

WISSENSCHAFTLICH-TECHNISCHE BERICHTE

FZR-326

Juli 2001

ISSN 1437-322X

Archiv-Ex.:



Sven Zschocke

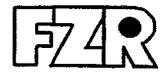
**Die Zwei-Photonen-Selbstenergie
und andere QED-Strahlungskorrekturen**

Herausgeber:
Forschungszentrum Rossendorf e.V.
Postfach 51 01 19
D-01314 Dresden
Telefon +49 351 26 00
Telefax +49 351 2 69 04 61
<http://www.fz-rossendorf.de/>

Als Manuskript gedruckt
Alle Rechte beim Herausgeber

FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF

WISSENSCHAFTLICH-TECHNISCHE BERICHTE



FZR-326

Juli 2001

Sven Zschocke

**Die Zwei-Photonen-Selbstenergie
und andere QED-Strahlungskorrekturen**

Dissertation

**Die
Zwei–Photonen–Selbstenergie
und andere
QED–Strahlungskorrekturen**

von der
Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden
genehmigte

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von
Sven Zschocke
geboren am 21. November 1966 in Dresden

Dresden 2001

eingereicht am 07. 03. 2001

1. Gutachter : Prof. Dr. Gerhard Soff

2. Gutachter : Dr. Günter Plunien

3. Gutachter : Prof. Dr. Jörg Eichler

verteidigt am 05. 07. 2001

Kurzfassung

Die genaue Messung der Lamb-Verschiebung stark gebundener Elektronen in Zusammenhang mit Tests der Quantenelektrodynamik (QED) in starken Feldern in hochgeladenen Ionen ist eines der Hauptthemen der heutigen Atomphysik. Die gegenwärtig durchgeführten Hochpräzisionsmessungen erfordern eine hohe Genauigkeit in den theoretischen Berechnungen der Lamb-Verschiebung. Diese Genauigkeit impliziert eine Berücksichtigung aller QED-Korrekturen der Ordnung α und α^2 , aber exakt in allen Ordnungen in $Z\alpha$. In den zurückliegenden Jahren sind die meisten dieser QED-Korrekturen sowohl in 1. Ordnung als auch in 2. Ordnung Störungstheorie berechnet worden. Der Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie konnte jedoch bisher nicht ausgewertet werden und stellte somit die größte Ungenauigkeit in der Vorhersage der Lamb-Verschiebung für wasserstoffartige Systeme dar. In dieser Arbeit wird der Beitrag dieser Prozesse zur Lamb-Verschiebung untersucht. Darüber hinaus werden erstmals renormierte Ausdrücke der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation und der Selbstenergie-Vakuumpolarisation hergeleitet. Bisher konnten diese Beträge nur in Uehling-Näherung ausgewertet werden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
1.1	Allgemeines zur Quantenelektrodynamik	7
1.2	Einordnung und Ziele der Arbeit	10
2	Theoretisch-Physikalische Grundlagen	13
2.1	Quantenelektrodynamik im Furry-Bild	13
2.1.1	Externe Feldnäherung	14
2.1.2	Lösung der Dirac-Gleichung im Coulomb-Potential	15
2.1.3	Der gebundene Elektronenpropagator in sphärischen Koordinaten ..	19
2.1.4	Lösung der freien Dirac-Gleichung in sphärischen Koordinaten .. .	22
2.1.5	Der freie Elektronenpropagator in sphärischen Koordinaten .. .	23
2.1.6	Der Photonenpropagator	25
2.2	Lamb-Verschiebung	27
2.2.1	Gell-Mann-Low-Theorem	27
2.2.2	Feynman'sche Diagramm-Technik	30
2.2.3	Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion	34
2.3	Potentialentwicklung, Regularisierung und Ward-Identität	41
2.4	Renormierungstheorie der QED	46
2.4.1	Einleitung	46
2.4.2	Multiplikative Renormierung	48
2.4.3	BPHZ-Renormierung	53
2.5	Eichinvarianz und Vakuumpolarisationstensor 4. Ranges	60
3	Zwei-Photonen-Selbstenergie	65
3.1	Gegenwärtiger Stand der Vorhersagen der Lamb-Verschiebung	65
3.1.1	Strahlungskorrekturen der Ordnung α	65
3.1.2	Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2	68
3.2	Herleitung der mathematischen Ausdrücke der Zwei-Photonen-Selbstenergie	72
3.2.1	Das Loop-After-Loop-Diagramm	72
3.2.2	Das Loop-Inside-Loop-Diagramm	75
3.2.3	Das Loop-Crossed-Loop-Diagramm	76
3.3	Renormierung der Zwei-Photonen-Selbstenergie	78
3.3.1	Die Selbstenergie 1. Ordnung eines gebundenen Elektrons	78
3.3.2	Der reduzierbare Anteil des Loop-After-Loop-Diagramms	80
3.3.3	Das Loop-Inside-Loop-Diagramm	82
3.3.4	Das Loop-Crossed-Loop-Diagramm	92
3.3.5	Der renormierte Ausdruck der Zwei-Photonen-Selbstenergie	100

3.4	Betrachtung der Infrarot-Divergenzen	102
3.4.1	Einleitung in die Problematik der Infrarot-Divergenzen	102
3.4.2	Die Infrarot-Divergenzen der Gegenterme	104
3.4.3	Die Energieintegrationen und die Referenz-State-Divergenz	106
4	Numerische Auswertung	113
4.1	Die Methode der Partialwellen-Renormierung	113
4.1.1	PWR der Selbstenergie in Störungstheorie erster Ordnung	113
4.1.2	PWR der Zwei-Photonen-Selbstenergie	119
4.1.3	Abschließende Betrachtungen zur Methode	128
4.2	Die Winkelintegration der Matrixelemente	132
4.3	Semianalytische Berechnung der Gegenterme	135
4.4	B-Spline-Methode	138
4.5	Die numerischen Resultate zur Zwei-Photonen-Selbstenergie	145
4.5.1	Die Sign-Approximation der Zwei-Photonen-Selbstenergie	145
4.5.2	Vollständiger Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie	147
4.6	Stand der Vorhersagen zur Lamb-Verschiebung	152
5	Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation	155
5.1	Einleitung	155
5.2	Die Vakuumpolarisation der Ordnung α	156
5.2.1	Renormierung der Vakuumpolarisation der Ordnung α	156
5.2.2	Diskussion des spuriösen Terms	158
5.3	Renormierung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation	161
5.3.1	Potentialentwicklung	161
5.3.2	Die äußere Renormierung	163
5.3.3	Die innere Renormierung	176
5.3.4	Der renormierte Ausdruck der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation	177
5.4	Die Partialwellenentwicklung	181
6	Selbstenergie-Vakuumpolarisation	185
6.1	Einleitung	185
6.2	Renormierung der Selbstenergie-Vakuumpolarisation	187
6.2.1	Potentialentwicklung	187
6.2.2	Renormierung	187
6.2.3	Verschwinden der Gegenterme und Eichinvarianz	190
6.2.4	Der renormierte Ausdruck und Partialwellenentwicklung	195
7	Zusammenfassung und Ausblick	199
	Anhang A Umformung der Energieintegrale der Zwei-Photonen-Selbstenergie	201
	Anhang B Energieintegrale der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation	205
	Anhang C Energieintegral der Selbstenergie-Vakuumpolarisation	207
	Literaturverzeichnis	209

1 Einleitung

Der heutige Tag ist ein Resultat des gestrigen. Was dieser gewollt hat, müssen wir erforschen, wenn wir zu wissen wünschen, was jener will.

Heinrich Heine (1797–1856)

1.1 Allgemeines zur Quantenelektrodynamik

Die Quantenelektrodynamik (QED) beschreibt die fundamentale Wechselwirkung zwischen elektrisch geladenen Teilchen. Die Kraft zwischen den elektrisch geladenen Materiefeldern wird dabei durch den Austausch virtueller Vektor-Eichbosonen, d.h. den Photonen als Quanten des elektromagnetischen Feldes vermittelt. Die QED stellt gleichzeitig die erste abelsche und renormierbare Eichfeldtheorie der Physik dar und ist somit als der Prototyp aller Quantenfeldtheorien anzusehen und auch deshalb von zentraler Bedeutung. Ihre Entstehung beginnt um 1928 mit der Aufstellung der Dirac-Gleichung [1] und der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes [2, 3, 4], einschließlich der Lösung der Eichproblematik in einer abelschen Quantenfeldtheorie [5]. Durch die kleine Größe der elektromagnetischen Kopplungskonstanten $\alpha \approx 1/137$, welche ein Maß für die Stärke der elektromagnetischen Kraft ist, läßt sich die Wechselwirkung zwischen den Materiefeldern und den Eichfeldern störungstheoretisch beschreiben. Jedoch wurde frühzeitig erkannt, daß die höheren Ordnungen solch einer Störungsreihe divergente Resultate erzeugen. Dieses Problem der Divergenz stellte sich über 20 Jahre als Haupthindernis der weiteren Entwicklung dieser Theorie entgegen. Dennoch gelang *Uehling* bereits 1935, d.h. zu einem Zeitpunkt, als noch keine Renormierungstheorie existierte, die Berechnung der Vakuumpolarisation [6]. Und obwohl diese äußerst bemerkenswerte Leistung eine Aufspaltung der in der Dirac-Theorie energetisch entarteten Niveaus $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ im Wasserstoff vorraussagte, gab es keine eindeutigen experimentellen Hinweise für solch eine Energie-Verschiebung, welche die Entwicklung der QED hätte weiter befördern können. Dies änderte sich jedoch mit der Entdeckung der *klassischen Lamb-Verschiebung*, also eben jener von *Uehling* vorrausgesagten Aufspaltung des $2s_{1/2}$ und des $2p_{1/2}$ -Energieniveaus im Wasserstoffatom, s. Abbildung 1.1. Diese Abweichung des Experiments von der Dirac-Theorie war der Wegweiser für die Entwicklung der Quantenelektrodynamik und wohl selten hat ein einzelnes Experiment derartig tiefen Einfluß auf die weitere Entwicklung der Physik genommen. Allerdings stimmten die Vorraussagen von *Uehling* in Größe und Vorzeichen nicht mit den Messungen von *Lamb* und *Retherford* [7] überein, welche eine energetische Aufspaltung beider Energieniveaus um ungefähr 1000 MHz (heute gemessener Wert ungefähr $1057.844(3) \pm 0.02$ MHz [1]) ergaben. Die Lamb-Verschiebung im Wasserstoffatom wird im Wesentlichen von der Selbstenergie des gebundenen Elektrons bestimmt, so daß der von *Uehling* berechnete Beitrag der Vakuumpolarisation von der Selbstenergie überlagert wird. Dennoch schien es nun klar, daß die Vakuumfluktuationen des Diracfeldes und des elektromagnetischen Feldes, d.h. quantenelektrodynamische Korrekturen für diese Verschiebung verantwortlich waren. Eine Berechnung der Lamb-Verschiebung von

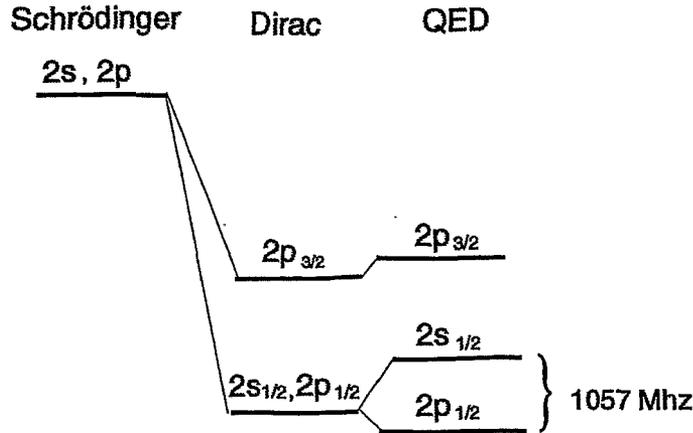


Abbildung 1.1: Die Aufspaltung des $2s_{1/2}$ und des $2p_{1/2}$ Niveaus im Wasserstoff (1057 MHz) wird als die klassische Lamb-Verschiebung bezeichnet.

Bethe [13] unter Einbeziehung der Selbstenergie des im Atom gebundenen Elektrons ergab einen ungefähren Wert von 1400 MHz und betätigte somit diese Vermutungen. Das Problem der Unendlichkeiten in der Störungsentwicklung der QED konnte ebenfalls kurz darauf durch *Feynman*, *Schwinger*, *Dyson* und *Tomonaga* in den Jahren 1948 bis 1949 gelöst werden (mehr zu diesem wesentlichen Teilaspekt der QED s. Abschnitt 2.4 *Renormierungstheorie der QED*). In den darauffolgenden Jahren wurde eine grandiose und spektakuläre Übereinstimmung zwischen Theorie und verschiedensten Experimenten festgestellt und die QED wird deshalb bis heute als die am besten getestete Theorie angesehen. Als Beispiel sei der g -Faktor eines freien Elektrons genannt, welcher den Spin und das magnetische Moment des Elektrons verknüpft. Nach der Dirac-Theorie ist dieser Wert $g_{\text{free}} = 2$. Die Wechselwirkung des freien Elektrons mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld des Vakuums verändert jedoch diesen Wert:

$$g_{\text{free}} = 2 + 2 \times 1\,159\,652\,188.4(4.3) \times 10^{-12} \quad (\text{Experiment [8]})$$

$$g_{\text{free}} = 2 + 2 \times 1\,159\,652\,216.0(1.2)(67.8) \times 10^{-12} \quad (\text{Theorie [9]}) \quad (1.1)$$

(Die angegebene Ungenauigkeit in der 2. Klammer resultiert aus der Ungenauigkeit der in [9] verwendeten Kopplungskonstanten α [10].) Die in (1.1) dargelegten Werte des g -Faktors stellen eine exzellente Übereinstimmung der QED mit dem Experiment dar, und sie gelten derzeit als eine der genauesten Überprüfungen in der Physik überhaupt.

Als eine weitere Größe sei die klassische Lamb-Verschiebung in Wasserstoff genannt:

$$\Delta(2s_{1/2} - 2p_{1/2}) = 1057.844(3) \text{ MHz} \quad (\text{Experiment [11]})$$

$$\Delta(2s_{1/2} - 2p_{1/2}) = 1057.839(4)(4) \text{ MHz} \quad (\text{Theorie [12]}) \quad (1.2)$$

Auch hier kann eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment festgestellt werden.

Jedoch betrafen diese und andere Untersuchungen der QED zunächst nur atomare Systeme mit kleiner Kernladungszahl ($Z \leq 10$). Ungeachtet dieser großartigen Erfolge der QED

in Systemen mit schwachen externen elektromagnetischen Feldern muss festgestellt werden, daß die Voraussagen der Theorie viel weniger im Grenzfall extrem starker Felder untersucht wurden (siehe dazu auch die Übersichtsartikel [14, 15, 16] und den exzellenten Review [24]). Jedoch ist die Untersuchung der Bereiche starker Felder in mehrfacher Hinsicht sehr wesentlich. So demonstrierte z.B. eine Untersuchung in [17], daß mögliche nichtlineare Erweiterungen der Lagrangedichte der QED besonders deutlich durch Präzisionsmessungen der Übergangsenergien in sehr schweren atomaren Systemen ($Z \geq 50$) sichtbar werden. Insbesondere Ein-Elektronen-Systeme eignen sich offensichtlich besonders für solche Untersuchungen, denn dann ist es nicht notwendig, die komplizierten Wechselwirkungen der einzelnen Elektronen untereinander zu berücksichtigen. Solche einfachen atomaren Systeme mit starken elektromagnetischen Feldern können erhalten werden, indem mit Ausnahme eines einzigen Elektrons alle anderen Elektronen eines Elements mit hoher Kernladungszahl Z entfernt werden (für experimentelle Details s. z.B. [19]). Man bekommt somit ein sogenanntes *Ein-Elektronen-System*, an dem nun die Übergangsenergien der einzelnen Energieniveaus gemessen und mit den Voraussagen der Theorie verglichen werden. Heute werden in diesem Zusammenhang alle Abweichungen von den Energieniveaus der Dirac-Theorie allgemein als *Lamb-Verschiebung* bezeichnet.

Ein anderer Beweggrund zur Untersuchung hoch geladener Ionen liegt in den enormen Feldstärken dieser Systeme. In wasserstoffartigem Uran z.B. beträgt die Stärke des elektromagnetischen Feldes, welches ein $1s$ -Elektron spürt, ungefähr $|\mathbf{E}| \approx 2 \times 10^{16}$ V/cm. Diese Feldstärke liegt um sechs Größenordnungen über der elektrischen Feldstärke eines Wasserstoffatoms. Es ist deshalb klar, daß in extrem starken elektromagnetischen Feldern die Gültigkeit der "normalen" Atomphysik, welche für atomare Systeme mit kleiner Kernladungszahl ihre Vorhersagekraft überzeugend demonstrierte, hinterfragt werden muss. Da zudem die QED die fundamentale Wechselwirkung zwischen allen elektrisch geladenen Teilchen beschreibt, ist sie als ein Eckpfeiler der heutigen Physik anzusehen und die Untersuchung ihres allgemeinen Gültigkeitsbereiches einschließlich der Renormierungstheorie ist deshalb von grundlegender Bedeutung.

Es sollte jedoch darauf verwiesen werden, daß sich bei weitem nicht alle atomaren Systeme für Messungen der Lamb-Verschiebung in starken Feldern besonders eignen. Eine Bedingung ist zunächst an die Kernladungszahl Z zu stellen, welche möglichst große Werte annehmen sollte. Demnach wäre vom Standpunkt des experimentellen Aufwandes das Uransystem als geeignetster Kandidat anzusehen, da alle Trans-Urane zwar höhere Kernladungszahlen Z besitzen, jedoch künstlich erzeugt werden müssten und zudem eine höhere Zerfallswahrscheinlichkeit aufweisen. Eine weitere Einschränkung ergibt sich aus den Unsicherheiten der nuklearen Freiheitsgrade. Der Atomkern stellt ein kompliziertes Vielteilchen-System dar, welches aus vielen Nukleonen aufgebaut ist. Die Beschreibung der Dynamik dieser Nukleonen führt über die Theorie der QED hinaus und kann nur modellmäßig erfaßt werden, da Vielteilchensysteme nicht exakt gelöst werden können. Diese Unsicherheiten setzen demnach eine Grenze für Tests der QED. Für das Uransystem z.B. liegt diese Grenze bei ± 0.1 eV für den $1s$ -Zustand, d.h. ab dieser Genauigkeit in der Bestimmung der $1s$ -Lamb-Verschiebung wird der Bereich reiner QED-Tests verlassen, und man beginnt, die intrinsische Kerndynamik und Kernstruktur zu erkunden [20]. Deshalb wird man bestrebt sein, möglichst Atomkerne mit einfacher Struktur für Messungen der Lamb-Verschiebung auszuwählen, in denen die Ungenauigkeiten der Kernmodelle am geringsten sind. Dies trifft insbesondere für Kerne mit gerader Nukleonenzahl zu [18]. Desweiteren sollten die betrachteten Atomkerne keine energetisch tief liegenden Anregungen (z.B. Rotations- oder Vibrationszustände) besitzen,

da die Beschreibung dieser Kernanregung selbstverständlich im Rahmen der Kernmodelle erfolgt und somit wieder die Genauigkeit der theoretischen Vorhersagen der reinen QED negativ beeinflussen. Solch ein System mit nur schwer anzuregenden Kernzuständen stellt der Bleikern dar, welches somit neben dem Uransystem als ein weiteres sehr geeignetes atomares System für reine QED-Effekte erscheint. Beide Systeme sind deshalb ein zentrales Untersuchungsobjekt der heutigen Atomphysik und werden in der vorliegenden Arbeit betrachtet.

1.2 Einordnung und Ziele der Arbeit

Vom theoretischen Standpunkt aus ergibt sich in Untersuchungen im Limes hoher Kernladungszahl Z unmittelbar folgende Problematik. In schweren Atomen mit hoher Kernladungszahl Z stellt die Kopplungskonstante $Z\alpha \rightarrow 1$ offenbar keine kleine Größe mehr dar (für das Uransystem gilt beispielsweise $Z\alpha \approx 0.6$), und deshalb sind die bisherigen störungstheoretischen Methoden nicht unmittelbar anwendbar. Die adäquate Beschreibung solcher Systeme erfolgt durch das sogenannte Furry-Bild der QED. In diesem Bild werden die freien Elektronenpropagatoren durch volle Elektronenpropagatoren ausgedrückt, welche die Wechselwirkung virtueller Elektronen und Positronen mit dem starken Kernfeld bereits exakt, d.h. in allen Ordnungen in $Z\alpha$ nichtstörungstheoretisch berücksichtigen. Dies verkompliziert jedoch beträchtlich die Berechnungsmethoden, und darin ist auch der Hauptgrund zu suchen, warum die QED im Limes starker Felder sich eigentlich bis in die achziger Jahre hinein einer theoretischen Untersuchung entzog. Durch den Fortschritt der theoretischen und numerischen Methoden sind die Strahlungskorrekturen der QED zu den Energieniveaus der Dirac-Theorie für hochgeladene Ionen heute Gegenstand zahlreicher Untersuchungen. In dem Abschnitt über die Strahlungskorrekturen wird darauf im Detail eingegangen. An dieser Stelle sei nur soviel erwähnt, daß die Berechnung der Diagramme in 1. Ordnung Störungstheorie zumindest bei dem heutigen Stand der experimentellen Genauigkeit der Messung der Lamb-Verschiebung (± 13 eV für $1s_{1/2}$ -Zustand in wasserstoffartigem Uran) als abgeschlossen betrachtet werden kann. Der Fortschritt im experimentellen Bereich läßt jedoch in sehr naher Zukunft schon Genauigkeiten bis hin zu ± 1 eV oder gar ± 0.1 eV erwarten. Deshalb ist es notwendig, QED-Korrekturen bis zur Ordnung α^2 zu berücksichtigen. Bisher konnten jedoch nicht alle Beiträge exakt in $Z\alpha$ und in 2. Ordnung Störungstheorie berechnet werden. Insbesondere die Unkenntnis des Beitrags der Zwei-Photonen-Selbstenergie stellte sich dabei als die größte Ungenauigkeit in der Berechnung der Lamb-Verschiebung heraus. In dieser Arbeit wurde deshalb erstmalig der vollständige Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie zur Lamb-Verschiebung in den wichtigsten wasserstoffartigen Systemen Uran und Blei untersucht. Die Arbeit untergliedert sich folgendermaßen:

Nach einer Bereitstellung der theoretischen Grundlagen folgt die Herleitung des renormierten Ausdrucks der Zwei-Photonen-Selbstenergie. In einem anschließendem Teil wird auf die numerische Auswertung einschließlich einem Vergleich der erhaltenen theoretischen Ergebnisse mit experimentellen Resultaten eingegangen. Schließlich werden in zwei anschließenden Teilen auch renormierte Ausdrücke der bisher nur in Uehlingnäherung berechneten Diagramme der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation und der Selbstenergie-Vakuumpolarisation erstmalig hergeleitet. Die Schwerpunkte dieser Arbeit sind:

1. Anwendung der BPHZ-Renormierung auf die Zwei-Photonen-Selbstenergie und Untersuchung des Infrarotverhaltens des renormierten Ausdrucks

2. Auswertung des Beitrags der Zwei-Photonen-Selbstenergie zur Lamb-Verschiebung des $1s_{1/2}$ -Grundzustandes für wasserstoffartiges Uran und Blei.
3. Herleitung eines renormierten Ausdrucks der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation
4. Renormierung der Selbstenergie-Vakuumpolarisation und Betrachtung der Eichinvarianz

Einheitensystem:

In dieser Arbeit werden die natürlichen Einheiten $\hbar = m_e = c = 1$ und $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$ (Heaviside-Lorentz-System) verwendet. In diesen Einheiten gilt für die elektromagnetische Kopplungskonstante $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \rightarrow \frac{e^2}{4\pi} \approx \frac{1}{137.036}$.

Eine Ausnahme bildet der Abschnitt *2.4.1 Einleitung zur Renormierungstheorie*, in welchem zur besseren Klarheit alle Konstanten und ihre physikalischen Werte explizit notiert werden.

Desweiteren werden die atomaren Einheiten (a.u.) $\hbar = m_e = e = 1$ und $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$ (Heaviside-Lorentz-System) im Abschnitt *4.5 Die numerischen Resultate zur Zwei-Photonen-Selbstenergie* verwendet. In diesen Einheiten gilt dann $4\pi c = 137.036$.

2 Theoretisch-Physikalische Grundlagen

Wir haben keinen Grund zu der Annahme, daß die Naturgesetze menschliche Erfindungen sind. Was sie aber genau sind, wissen wir nicht.

Henning Genz (geb. 1938)

2.1 Quantenelektrodynamik im Furry-Bild

Die Wechselwirkung zwischen dem quantisierten elektromagnetischen Feld $\hat{A}(x)$ und dem quantisierten Dirac-Feld $\hat{\Psi}(x)$ wird durch die spinorielle Quantenelektrodynamik (QED) beschrieben. Eines der wesentlichen Ziele der QED ist es, Systeme zu betrachten, in denen sich die Dirac-Teilchen im Hintergrund eines klassischen externen elektromagnetischen Feldes $A_\mu^{\text{ext}}(x)$ bewegen, dessen Ursache beliebige äußere Quellströme $j_{\text{em}}^\mu(x)$ sind. Hier werden zunächst in voller Allgemeinheit die externen Ströme noch nicht als klassische Ströme, und die externen Felder dementsprechend noch nicht als klassische Felder angenommen. Die relativistische Theorie ist dann definiert über die Lagrangedichte

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \hat{N} \left[\hat{\Psi}(x)(i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^\mu \hat{A}_\mu(x) - m)\hat{\Psi}(x) - \frac{1}{4} \hat{F}_{\mu\nu}(x) \hat{F}^{\mu\nu}(x) \right] \\ & + \hat{N} \left[-\frac{1}{2} \zeta (\partial^\mu \hat{A}_\mu(x))^2 - \hat{j}_{\text{em}}^\mu(x) \hat{A}_\mu(x) \right], \end{aligned} \quad (2.1)$$

wobei aus Gründen der Übersichtlichkeit auf die explizite Notation der Diracindizes in den Dirac-Feldoperatoren $\hat{\Psi}(x)$ und in den Dirac-Matrizen γ_μ verzichtet sei.

In die obige Lagragedichte wurde der Normalordnungs-Operator \hat{N} von Beginn an eingefügt, welcher immer im weiter unten dargelegten S-Matrix-Formalismus zu verstehen ist. Er ordnet alle Operatoren so an, daß die Vernichtungsoperatoren rechts von den Erzeugungsoperatoren stehen.

Der Feldstärkeoperator ist definiert als $\hat{F}_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu \hat{A}_\nu(x) - \partial_\nu \hat{A}_\mu(x)$. Es soll nicht unerwähnt bleiben, daß der für die Quantisierung notwendige Eichfixierungsterm $\frac{1}{2} \zeta (\partial^\mu \hat{A}_\mu(x))^2$ seinen Ursprung bereits bei E. Fermi [5] findet.

In der Dichte \mathcal{L} sind in Verallgemeinerung zur freien QED zusätzliche äußere quantisierte elektromagnetische Quellströme $\hat{j}_{\text{em}}^\mu(x)$ aufgenommen wurden, und dieser Fall wird auch als *Bound-State-QED* bezeichnet. Diese Quellströme können zunächst ganz allgemeine Struktur haben.

Man könnte nun geneigt sein, aus (2.1) die Hamilton-Operatoren in Wechselwirkungsdarstellung abzuleiten und mit Hilfe des Wick'schen Theorems zur Feynmanschen Diagrammtechnik zu gelangen. Solch ein direkter störungstheoretischer Zugang ist jedoch nicht gangbar, wenn das äußere Feld, hervorgerufen durch die äußeren Quellströme, keine kleine Störung darstellt

und insbesondere, wenn es für die Quantenteilchen gebundene Zustände in diesem äußeren Hintergrundfeld $A_\mu^{\text{ext}}(x)$ gibt. Deshalb ist es notwendig, ein nichtstörungstheoretisches Verfahren bereitzustellen, welches diese Wechselwirkung mit dem Hintergrundfeld von Anfang an berücksichtigt. Die theoretische Grundlage dazu liefert das Furry-Bild der QED [21], welches direkt aus (2.1) hergeleitet werden kann. Das Furry-Bild der QED umfasst die folgenden Problemkreise:

1. externe Feldnäherung
2. Lösung der Dirac-Gleichung mit Coulomb-Potential
3. Konstruktion des gebundenen Elektronenpropagators
4. Konstruktion des Photonpropagators

In diesem Kapitel sollen diese theoretischen Grundlagen bereitgestellt und im einzelnen erläutert werden.

2.1.1 Externe Feldnäherung

Wir betrachten hier den Fall eines äußeren Quellstromes, dessen Ursache der Atomkern ist. Die quantenmechanischen Fluktuationen sind umgekehrt proportional zur Masse der Quantenfelder. Deshalb ist im Falle eines Atomkerns, dessen Masse um Größenordnungen schwerer als die Masse der Dirac-Teilchen ist, die *externe Feldnäherung* anwendbar. In der externen Feldnäherung wird die Quantennatur des Quellstromes $\hat{j}_\mu^{\text{em}}(x)$ vernachlässigt, d.h. als c-Zahl betrachtet. Das äußere elektromagnetische Feld wird deshalb ebenfalls ein c-Zahl-Feld $A_\mu^{\text{ext}}(x)$ und das gesamte elektromagnetische Feld spaltet sich dann in diesen c-Zahl-Anteil und einen zweitquantisierten, sogenannten Strahlungsanteil auf:

$$\begin{aligned} \hat{j}_{\text{em}}^\mu(x) &\rightarrow j_{\text{ext}}^\mu(x) \\ \hat{A}^\mu(x) &\rightarrow A_{\text{ext}}^\mu(x) + \hat{A}_{\text{rad}}^\mu(x) \quad . \end{aligned} \quad (2.2)$$

Es ist klar, daß eine Quelle des elektromagnetischen Feldes natürlich auch das zweitquantisierte Dirac-Feld ist, so daß dieser zweitquantisierte Strahlungsanteil in (2.2) auftritt.

Der klassische Quellstrom-Vierervektor $j_{\text{ext}}^\mu(x) = (\rho_{\text{ext}}(x), \mathbf{j}_{\text{ext}}(x))$ vereinfacht sich im Ruhesystem des Atomkerns zu einer zeitunabhängigen externen Ladungsdichte $\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Die Ladungsdichte eines Atomkerns erzeugt entsprechend ein Coulomb-Potential $V(\mathbf{r})$, in dessen Feld sich nun die Elektronen bewegen und der Vierervektor des klassischen Anteils vom elektromagnetischen Feld lautet damit

$$eA_{\text{ext}}^\mu(x) = (V(\mathbf{r}), 0, 0, 0) \quad . \quad (2.3)$$

Zusammen mit der externen Feldnäherung (2.2) gewinnt man also aus der obigen Lagrange-dichte jetzt den Hamilton-Operator zu (mit $x = (t, \mathbf{r})$)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{QED}} &= \hat{H}_0^{\text{Dirac}} + \hat{H}_0^{\text{Photon}} + \hat{H}_{\text{int}} \quad , \\ \hat{H}_0^{\text{Dirac}} &= \int d^3\mathbf{r} \hat{N} \left[\hat{\Psi}^\dagger(x) (-i\alpha\nabla + \beta + V(\mathbf{r})) \hat{\Psi}(x) \right] \quad , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0^{\text{Photon}} &= \int d^3\mathbf{r} \hat{N} \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \hat{A}_\nu^{\text{rad}}(x)) (\partial^\nu \hat{A}^{\text{rad}\mu}(x)) + \frac{1}{2} \hat{A}_\mu^{\text{rad}}(x) \partial^\mu (\partial_\nu \hat{A}^{\text{rad}\nu}(x)) \right. \\
&\quad \left. - (\partial^0 \hat{A}^{\text{rad}\mu}(x)) (\partial_0 \hat{A}_\mu^{\text{rad}}(x)) + \frac{1}{2} \zeta (\partial_\mu \hat{A}^{\text{rad}\mu}(x))^2 \right], \\
\hat{H}_{\text{int}} &= -e \int d^3\mathbf{r} \hat{N} \left[\hat{\Psi}^\dagger(x) \alpha^\mu \hat{A}_\mu^{\text{rad}}(x) \hat{\Psi}(x) \right].
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Diese Hamilton-Operatoren stellen die QED in der externen Feldnäherung dar. Die Aufspaltung des Feldes $\hat{A}_\mu(x)$ (2.2) in einen klassischen c-Zahl-Anteil und einem zweitquantisierten Anteil muss prinzipiell auch im Feldstärkeoperator $\hat{F}_{\mu\nu}(x)$ der Lagragedichte (2.1) vorgenommen werden. Die sich daraus ergebende Wechselwirkung zwischen dem externen Hintergrundfeld $A_\mu^{\text{ext}}(x)$ und dem quantisierten Strahlungsfeld \hat{A}_μ^{rad} wurde nicht in den Wechselwirkungs-Hamilton-Operator \hat{H}_{int} in (2.4) aufgenommen, da die Änderung der Lamb-Verschiebung durch den Einfluss des Strahlungsfeldes auf das Hintergrundfeld als vernachlässigbar klein vorausgesetzt werden kann.

Die Lösungen der entsprechenden Eigenwert-Gleichungen sind Hilbertzustände im Schrödinger-Bild und werden als $|\Psi_{\text{Schrödinger}}\rangle$ bezeichnet. Es erweist sich jedoch als sehr zweckmäßig, in das sogenannte Furry-Bild zu transformieren. Im Furry-Bild werden neue Zustandsraumvektoren eingeführt, welche mit den Zuständen des Schrödinger-Bildes durch die Transformation

$$|\Psi_{\text{Furry}}\rangle = e^{i(\hat{H}_0^{\text{Dirac}} + \hat{H}_0^{\text{Photon}})t} |\Psi_{\text{Schrödinger}}\rangle \tag{2.5}$$

zusammenhängen. Da die Erwartungswerte der Operatoren bildunabhängig sein müssen, folgt daraus, daß die (zeitunabhängigen) Operatoren $\hat{Q}(\mathbf{r})$ des Schrödinger-Bildes, insbesondere also auch die Hamilton-Operatoren und Feldoperatoren, sich folgendermaßen transformieren:

$$\hat{O}_{\text{Furry}}(t, \mathbf{r}) = e^{i(\hat{H}_0^{\text{Dirac}} + \hat{H}_0^{\text{Photon}})t} \hat{O}(\mathbf{r}) e^{-i(\hat{H}_0^{\text{Dirac}} + \hat{H}_0^{\text{Photon}})t}, \tag{2.6}$$

d.h. alle Zustände und Operatoren (mit Ausnahme natürlich von $\hat{H}_0^{\text{Dirac}} + \hat{H}_0^{\text{Photon}}$) werden zeitabhängig. Somit ist das Furry-Bild ein spezielles Wechselwirkungs-Bild der QED. Ein beliebiges Quantensystem wird also im Furry-Bild durch die Zustände (2.5) beschrieben, welche der Bewegungsgleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_{\text{Furry}}\rangle = \hat{H}_{\text{int, Furry}}(t, \mathbf{r}) |\Psi_{\text{Furry}}\rangle \tag{2.7}$$

unterliegen. Die verbleibende Wechselwirkung der Diracfelder mit dem zweitquantisierten Strahlungsfeld $\hat{A}_\mu^{\text{rad}}(x)$ wird störungstheoretisch behandelt. Im Folgenden wird ab jetzt immer $\hat{A}_\mu^{\text{rad}}(x) \equiv \hat{A}_\mu(x)$ gesetzt. Ebenso wird in dieser Arbeit, mit Ausnahme des Abschnitts der Zwei-Zeiten-Greenfunktions-Methode (in welchem jedoch explizit auf die verwendeten Bilder hingewiesen wird), immer das Furry-Bild verwendet, so daß es sinnvoll erscheint, für alle Operatoren $\hat{O}_{\text{Furry}}(t, \mathbf{r}) \equiv \hat{O}(t, \mathbf{r})$ zu setzen.

2.1.2 Lösung der Dirac-Gleichung im Coulomb-Potential

Ein wichtiger Punkt im Furry-Bild der QED stellt die Lösung der Dirac-Gleichung in einem sphärisch symmetrischen Potential $V(\mathbf{r}) = V(r)$ dar, welches im Folgenden immer als

Coulomb-Potential bezeichnet werden soll. Die Ein-Teilchen-Dirac-Gleichung für die Wellenfunktion

$$\Psi(x) = \varphi(\mathbf{r}) e^{-iEt} \quad (2.8)$$

lautet entsprechend (2.4):

$$(-i\alpha\nabla + \beta + V(\mathbf{r}))\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

Das Energiespektrum dieses Hamilton-Operators besteht aus einem diskreten Spektrum, welches die gebundenen Zustände, und einem kontinuierlichen Spektrum, welches die ungebundenen Zustände beschreibt (s. Abbildung 2.1). Die mit dem Hamilton-Operator (2.9)

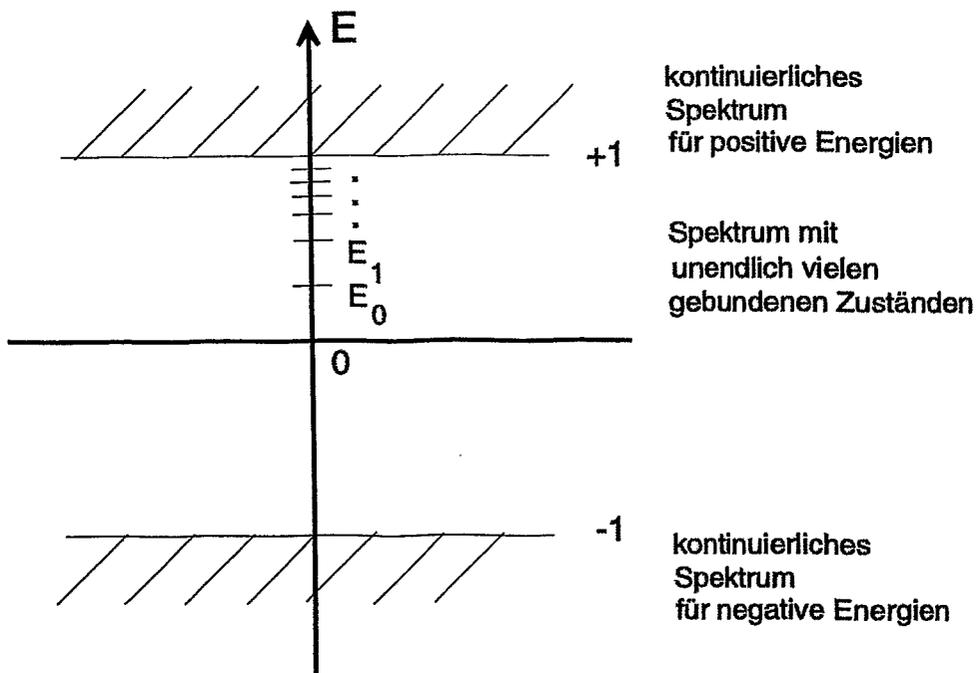


Abbildung 2.1: Das Spektrum der Diracgleichung der gebundenen und ungebundenen Zustände

vertauschbaren Operatoren sind (neben dem Paritäts-Operator \hat{P} , welcher ebenfalls mit dem Hamilton-Operator vertauscht) gegeben durch [22]

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \mathbf{L} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \quad \text{Gesamtdrehimpuls-Operator,} \\ K &= \beta(\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{L} + 1) \quad \text{Dirac-Operator.} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die Operatoren H, K, \mathbf{J}^2, J_z vertauschen untereinander und man kann deshalb Wellenfunktionen konstruieren, welche alle gleichzeitig Eigenfunktionen dieser Operatoren mit den Eigenwerten $E, -\kappa, j(j+1)$ und μ sind. Die Lösungen von (2.9) in sphärischen Koordinaten

lauten in expliziter Darstellung [23] sowohl für die Zustände des diskreten als auch für die Zustände des kontinuierlichen Spektrums

$$\varphi_{n,\kappa,\mu}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \\ iG(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Durch Herausziehen der imaginären Einheit i wird erreicht, daß die radiale Komponente $G(r)$ eine reelle Funktion ist. $\chi_{\kappa}^{\mu}(\theta, \phi)$ ist die zweikomponentige Spinwinkelfunktion

$$\chi_{\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} -\frac{\kappa}{|\kappa|} \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} - \mu}{2\kappa + 1}} Y_{|\kappa + \frac{1}{2}| - \frac{1}{2}, \mu - \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} + \mu}{2\kappa + 1}} Y_{|\kappa + \frac{1}{2}| - \frac{1}{2}, \mu + \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

wobei $Y_{|\kappa + \frac{1}{2}| - \frac{1}{2}, \mu \pm \frac{1}{2}}(\theta, \phi)$ die Kugelfunktionen sind. Der Ausdruck der Spinwinkelfunktion $\chi_{-\kappa}^{\mu}(\theta, \phi)$ kann aus (2.12) in einfacher Weise durch Umkehrung des Vorzeichens in jedem κ erhalten werden.

Nicht unerwähnt bleiben soll die folgende wichtige Beziehung [22] zwischen der sogenannten relativistischen Quantenzahl κ , der Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses j und der Bahndrehimpulsquantenzahl l (vergl. mit (2.48)):

$$\begin{aligned} \kappa &= j + \frac{1}{2} \quad \text{für } j = l - \frac{1}{2}, \\ \kappa &= -\left(j + \frac{1}{2}\right) \quad \text{für } j = l + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Das bedeutet, daß die Quantenzahlen κ und j nicht unabhängig voneinander sind. Zudem erlauben diese Beziehungen, von der relativistischen Klassifikation n, κ, μ zur sogenannten spektroskopischen Notation n, l, μ zu wechseln.

Die radialen Komponenten $F(r)$ und $G(r)$ erfüllen die gekoppelte Differentialgleichung

$$\begin{bmatrix} 1 + V(r) - E_n & -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r + \frac{\kappa}{r} \\ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r + \frac{\kappa}{r} & -1 + V(r) - E_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F(r) \\ G(r) \end{bmatrix} = 0. \quad (2.14)$$

Im Weiteren wird nur der spezielle Fall eines punktförmigen Coulomb-Potentials relevant sein, da in der vorliegenden Arbeit ausschließlich nur dieser Spezialfall benötigt wird (für kugelsymmetrische, ausgedehnte Atomkerne sei auf [24] und die darin enthaltenen Referenzen verwiesen). Die radialen Komponenten für die Zustände des diskreten Spektrums lauten

$$\begin{aligned} F_{n,\kappa}(r) &= \sqrt{N} \sqrt{(1 + E_{n,\kappa})} \sum_{m=0}^{n_r} (C_1^{(m)} + C_2^{(m)}) (2ar)^{m+\lambda-1} e^{-ar}, \\ G_{n,\kappa}(r) &= -\sqrt{N} \sqrt{(1 - E_{n,\kappa})} \sum_{m=0}^{n_r} (C_1^{(m)} - C_2^{(m)}) (2ar)^{m+\lambda-1} e^{-ar}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Dabei wurden die folgenden Abkürzungen verwendet

$$\gamma = Z\alpha, \quad \lambda = \sqrt{(\kappa^2 - \gamma^2)}, \quad n_r = n - |\kappa|, \quad a = \frac{\gamma}{\sqrt{(n_r + \lambda)^2 + \gamma^2}}. \quad (2.16)$$

Der Energieeigenwert läßt sich schreiben als

$$E_{n,\kappa} = \sqrt{1 - a^2} > 0, \quad \text{d.h.} \quad E_{n,\kappa} = E_0, \dots, 1, \quad (2.17)$$

wobei der gebundene Zustand mit der niedrigsten Energie als $E_0 = E_{1,-1}$ bezeichnet wurde. Der Normierungsfaktor N folgt aus der Normierungsbedingung der radialen Komponenten

$$\int_0^\infty (F_{n,\kappa}^2 + G_{n,\kappa}^2) r^2 dr = 1 \quad (2.18)$$

zu

$$N = \frac{2a^5}{\gamma(\gamma - \kappa a)} \frac{\Gamma(2\lambda + 1 + n_r)}{[\Gamma(2\lambda + 1)]^2 \Gamma(n_r + 1)}. \quad (2.19)$$

Die Koeffizienten $C_i^{(m)}$ lassen sich rekursiv über die Beziehung

$$\begin{aligned} C_1^{(0)} &= -n_r; & C_1^{(m+1)} &= \frac{m+1-n_r}{(m+2\lambda+1)(m+1)} C_1^{(m)}, \\ C_2^{(0)} &= \frac{\gamma}{a} - \kappa; & C_2^{(m+1)} &= \frac{m-n_r}{(m+2\lambda+1)(m+1)} C_2^{(m)} \end{aligned} \quad (2.20)$$

bestimmen.

Schließlich soll auch kurz auf das kontinuierliche Spektrum der Dirac-Gleichung eingegangen werden, welches die Streuzustände im Coulomb-Potential beschreibt. Entsprechend der Abbildung 2.1 gilt für die Energien der Zustände des kontinuierlichen Spektrums

$$\begin{aligned} E &\leq -1, \\ E &\geq +1. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Die Energie eines Zustandes des kontinuierlichen Spektrums ist demnach einfach eine Variable E und hängt nicht mehr von den Quantenzahlen n, κ, μ ab. Die Winkelabhängigkeit der Zustände des kontinuierlichen Spektrums ist wieder durch die Spinwinkelfunktion (2.12) gegeben. Die radialen Komponenten F, G sind Funktionen von κ und der kontinuierlich verteilten Energie E , d.h. $F_{E,\kappa}, G_{E,\kappa}$. Eine übersichtliche und explizite Darstellung der radialen Komponenten des kontinuierlichen Spektrums findet sich z.B. in [22, 32, 66]. Es ist in diesem Zusammenhang interessant festzustellen, daß es vom theoretischen Standpunkt aus nicht notwendig ist, die radialen Komponenten des kontinuierlichen Spektrums neu zu berechnen, denn sie können prinzipiell, unter Verwendung der Normierung der Wellenfunktion

$$\int d^3r \varphi_{E',\kappa,\mu}^\dagger(r, \theta, \phi) \varphi_{E,\kappa,\mu}(r, \theta, \phi) = \delta(E' - E) \quad (2.22)$$

und einem entsprechenden Phasenfaktor, aus den radialen Komponenten (2.15) des diskreten Spektrums durch die Substitutionen

$$\begin{aligned} E_{n,\kappa} &\rightarrow E, \\ n_r &\rightarrow i \frac{Z\alpha E}{\sqrt{E^2 - 1}} - \lambda, \\ \sqrt{1 - E} &\rightarrow -i\sqrt{E - 1}, \\ \gamma &\rightarrow -i|\kappa|\sqrt{E^2 - 1} \end{aligned} \quad (2.23)$$

gewonnen werden [32]. Dazu ist es zweckmäßig, die radialen Lösungen (2.15) vor dieser Substitution durch die konfluenten hypergeometrischen Funktionen $F(\alpha, \beta, z)$ auszudrücken. Es sei jedoch erwähnt, daß sich solch eine Substitution in numerischen Rechnungen als nicht praktikabel erweist.

2.1.3 Der gebundene Elektronenpropagator in sphärischen Koordinaten

Ein zentraler Punkt im Furry-Bild der QED stellt die Herleitung des gebundenen Elektronenpropagators dar [21]. Der gebundene Elektronenpropagator beschreibt ein virtuelles Elektron/Positron, welches sich im Coulomb-Potential des Atomkerns bewegt. Er ist für die Untersuchung der Eigenschaften von gebundenen Zuständen erforderlich, speziell für die Berechnung der Energieniveaus dieser gebundenen Zustände unter Berücksichtigung der QED-Strahlungskorrekturen. Im Furry-Bild werden die fermionischen Feldoperatoren nach dem vollständigen Funktionensystem (2.11) entwickelt

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) &= \sum_{E_s > 0} \hat{a}_s \varphi_s(\mathbf{r}) e^{-iE_s t} + \sum_{E_s < 0} \hat{b}_s^\dagger \varphi_s(\mathbf{r}) e^{iE_s t}, \\ \hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) &= \sum_{E_s > 0} \hat{a}_s^\dagger \varphi_s^\dagger(\mathbf{r}) e^{iE_s t} + \sum_{E_s < 0} \hat{b}_s \varphi_s^\dagger(\mathbf{r}) e^{-iE_s t},\end{aligned}\quad (2.24)$$

wobei s für alle drei Quantenzahlen n, κ, μ steht. Die Operatoren \hat{a}_s bzw. \hat{a}_s^\dagger vernichten bzw. erzeugen Elektronen, und die Operatoren \hat{b}_s bzw. \hat{b}_s^\dagger vernichten bzw. erzeugen Positronen. Sie gehorchen den fermionischen Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}\{\hat{a}_s, \hat{a}_{s'}^\dagger\} &= \delta_{s, s'} \quad , \quad \{\hat{a}_s, \hat{a}_{s'}\} = 0 \quad , \quad \{\hat{a}_s^\dagger, \hat{a}_{s'}^\dagger\} = 0 \quad , \\ \{\hat{b}_s, \hat{b}_{s'}^\dagger\} &= \delta_{s, s'} \quad , \quad \{\hat{b}_s, \hat{b}_{s'}\} = 0 \quad , \quad \{\hat{b}_s^\dagger, \hat{b}_{s'}^\dagger\} = 0 \quad ,\end{aligned}\quad (2.25)$$

wobei $\{, \}$ den Antikommutator bezeichnet. Das Vakuum ist definiert als

$$\hat{a}_s |0\rangle = 0 \quad , \quad \hat{b}_s |0\rangle = 0 \quad , \quad (2.26)$$

d.h. das Vakuum im Furry-Bild enthält keine Elektronen bzw. Positronen des kontinuierlichen oder des diskreten Spektrums. Die Zeitentwicklung der Feldoperatoren in (2.24) wird durch den Hamilton-Operator \hat{H}_0^{Dirac} aus (2.4) bestimmt. Dieser Hamilton-Operator enthält nur einen Anteil (nämlich den c -Zahl-Anteil) der vollen Wechselwirkung und deshalb kann das Furry-Bild als eine spezielle Variante des Wechselwirkungs-Bildes der QED angesehen werden.

Jetzt soll der gebundene Elektronenpropagator hergeleitet werden. Da das statische äußere Feld des Atomkerns die Homogenität des Raumes zerstört, wird der volle Elektronenpropagator nicht mehr von der Differenz der Ortskoordinaten sondern explizit von beiden Ortskoordinaten abhängen. Er ist zunächst in gewohnter Weise definiert als Vakuumerwartungswert des zeitgeordneten Produkts

$$iS_F(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^\dagger(t_2, \mathbf{r}_2) | 0 \rangle \quad (2.27)$$

mit dem Wick'schen Zeitordnungsoperator

$$\hat{T} \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^\dagger(t_2, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^\dagger(t_2, \mathbf{r}_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ -\hat{\Psi}^\dagger(t_2, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases} . \quad (2.28)$$

Das direkte Einsetzen von (2.24) in (2.27) unter Verwendung der Vertauschungsrelationen (2.25) ergibt

$$iS_F(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Theta(t_1 - t_2) \sum_{n, \kappa, \mu}^+ e^{-iE_{n, \kappa}(t_1 - t_2)} \varphi_{n, \kappa, \mu}(\mathbf{r}_1) \varphi_{n, \kappa, \mu}^\dagger(\mathbf{r}_2) - \Theta(t_2 - t_1) \sum_{n, \kappa, \mu}^- e^{iE_{n, \kappa}(t_1 - t_2)} \varphi_{n, \kappa, \mu}(\mathbf{r}_1) \varphi_{n, \kappa, \mu}^\dagger(\mathbf{r}_2) \quad (2.29)$$

mit der Schrittfunction

$$\Theta(x) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{für } x > 0 \\ 1/2 & \text{für } x = 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{array} \right\}. \quad (2.30)$$

Dieser Ausdruck für den vollen Elektronenpropagator läßt sich schreiben als

$$S_F(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-iE(t_1 - t_2)} S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.31)$$

wobei der bezüglich der Zeit fouriertransformierte gebundene Elektronenpropagator lautet

$$S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{n, \kappa, \mu} \frac{\varphi_{n, \kappa, \mu}(\mathbf{r}_1) \varphi_{n, \kappa, \mu}^\dagger(\mathbf{r}_2)}{E - E_{n, \kappa}(1 - i\epsilon)}. \quad (2.32)$$

Die Summe geht dabei über das gesamte kontinuierliche und diskrete Diracspektrum. Es ist nicht schwierig zu zeigen, daß die direkte Integration in der komplexen E -Ebene unmittelbar zurück auf (2.29) führt.

In der Bound-State-QED gibt es jedoch eine weitere Besonderheit. Im Gegensatz zur freien QED ist es nämlich notwendig, den speziellen Fall eines Vakuumerwartungswertes, in welchem die Feldoperatoren des Dirac-Feldes zum selben Raum-Zeit-Argument gehören, zu untersuchen. Dieser Fall tritt nur bei der Vakuumpolarisation in der Bound-State-QED auf. In der freien QED verschwindet der entsprechende Term aufgrund des Furry-Theorems, und es ist deshalb nicht notwendig ihn dort zu untersuchen. Dieser sogenannte Gleichzeit-Elektronenpropagator lautet

$$iS_F(t, \mathbf{r}) = \langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) | 0 \rangle. \quad (2.33)$$

Für diesen speziellen Fall gleicher Zeiten ist die Wick'sche Zeitordnung (2.28) definiert als

$$\hat{T} \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) - \hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) \right). \quad (2.34)$$

Dieser spezielle Fall der Wick'schen Zeitordnung liefert anstelle von (2.29)

$$iS_F(0, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{n, \kappa, \mu} \text{sign}(E_{n, \kappa}) \varphi_{n, \kappa, \mu}(\mathbf{r}) \varphi_{n, \kappa, \mu}^\dagger(\mathbf{r}), \quad (2.35)$$

und in Analogie zu (2.32), wobei die obige Fouriertransformation dabei als Limes $t_1 \rightarrow t_2$ zu verstehen ist, erhält man für diesen speziellen Fall des Elektronenpropagators in Orts-Energie-Darstellung,

$$S_F(E, \mathbf{r}) = \sum_{n, \kappa, \mu} \frac{\varphi_{n, \kappa, \mu}(\mathbf{r}) \varphi_{n, \kappa, \mu}^\dagger(\mathbf{r})}{E - E_{n, \kappa}(1 - i\epsilon)}. \quad (2.36)$$

Schließlich sei noch auf eine andere wichtige explizite Darstellung des vollen Elektronenpropagators in sphärischen Koordinaten verwiesen. Der volle Elektronenpropagator $S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ist gerade die Greensche Funktion, welche der Differentialgleichung

$$(\hat{H}_0^{\text{Dirac}} - E)S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2.37)$$

mit dem Dirac-Hamilton-Operator (2.4) genügt. Durch die Gleichungen (2.32) und (2.11) kann der folgende Ansatz für den vollen Elektronenpropagator gemacht werden:

$$S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} G_{\kappa}^{11}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{11} & G_{\kappa}^{12}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{12} \\ G_{\kappa}^{21}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{21} & G_{\kappa}^{22}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{22} \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

wobei die Funktionen π_{κ}^{ij} als Summe über die weiter oben eingeführten Spinwinkelfunktionen (2.12) folgendermaßen definiert sind:

$$\begin{aligned} \pi_{\kappa}^{11} &= \sum_{\mu} \chi_{\kappa}^{\mu}(\theta_1, \varphi_1) \chi_{\kappa}^{\mu \dagger}(\theta_2, \varphi_2); & \pi_{\kappa}^{12} &= \sum_{\mu} \chi_{\kappa}^{\mu}(\theta_1, \varphi_1) \chi_{-\kappa}^{\mu \dagger}(\theta_2, \varphi_2); \\ \pi_{\kappa}^{21} &= \sum_{\mu} \chi_{-\kappa}^{\mu}(\theta_1, \varphi_1) \chi_{\kappa}^{\mu \dagger}(\theta_2, \varphi_2); & \pi_{\kappa}^{22} &= \sum_{\mu} \chi_{-\kappa}^{\mu}(\theta_1, \varphi_1) \chi_{-\kappa}^{\mu \dagger}(\theta_2, \varphi_2). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Einsetzen des Ansatzes (2.38) liefert unmittelbar die Bestimmungsgleichung für die radialen Komponenten, welche in Matrixform wie folgt geschrieben werden kann:

$$\begin{bmatrix} 1 + V(r_1) - E & -\frac{1}{r_1} \frac{d}{dr_1} r_1 + \frac{\kappa}{r_1} \\ \frac{1}{r_1} \frac{d}{dr_1} r_1 + \frac{\kappa}{r_1} & -1 + V(r_1) - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{\kappa}^{11}(E, r_1, r_2) & G_{\kappa}^{12}(E, r_1, r_2) \\ G_{\kappa}^{21}(E, r_1, r_2) & G_{\kappa}^{22}(E, r_1, r_2) \end{bmatrix} = \mathbb{1} \frac{1}{r_1 r_2} \delta(r_1 - r_2), \quad (2.40)$$

wobei $\mathbb{1}$ die Einheitsmatrix ist. Die Lösungen dieser Gleichung lauten explizit für den Fall $r_1 < r_2$:

$$\begin{aligned} G_{\kappa}^{11}(E, r_1, r_2) &= (1 + E)Q[(\lambda - \nu)M_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_1) - (\kappa - (\gamma/c))M_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_1)] \\ &\quad \times [(\kappa + (\gamma/c))W_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_2) + W_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_2)], \\ G_{\kappa}^{12}(E, r_1, r_2) &= cQ[(\lambda - \nu)M_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_1) - (\kappa - (\gamma/c))M_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_1)] \\ &\quad \times [(\kappa + (\gamma/c))W_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_2) - W_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_2)], \\ G_{\kappa}^{21}(E, r_1, r_2) &= cQ[(\lambda - \nu)M_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_1) + (\kappa - (\gamma/c))M_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_1)] \\ &\quad \times [(\kappa + (\gamma/c))W_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_2) + W_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_2)], \\ G_{\kappa}^{22}(E, r_1, r_2) &= (1 - E)Q[(\lambda - \nu)M_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_1) + (\kappa - (\gamma/c))M_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_1)] \\ &\quad \times [(\kappa + (\gamma/c))W_{\nu-(1/2),\lambda}(2cr_2) - W_{\nu+(1/2),\lambda}(2cr_2)], \end{aligned} \quad (2.41)$$

wobei $M_{\alpha,\beta}(x)$ und $W_{\alpha,\beta}(x)$ die Whittakerfunktionen sind [26]. Die Abkürzungen bedeuten

$$c = \sqrt{1 - E^2} \quad \text{mit} \quad \text{Re}(c) > 0 \quad ; \quad \nu = \frac{\gamma E}{c} \quad ;$$

$$\text{und} \quad Q = \frac{1}{\sqrt{r_1 r_2} (4c^2 r_1 r_2)} \frac{\Gamma(\lambda - \nu)}{\Gamma(1 + 2\lambda)}. \quad (2.42)$$

Die Größen λ und γ wurden schon oben in (2.16) definiert. Der andere Fall $r_1 > r_2$ läßt sich aus den Symmetrieverhältnissen

$$\begin{aligned} G_{\kappa}^{11}(E, r_1, r_2) &= G_{\kappa}^{11}(E, r_2, r_1), \\ G_{\kappa}^{12}(E, r_1, r_2) &= G_{\kappa}^{21}(E, r_2, r_1), \\ G_{\kappa}^{21}(E, r_1, r_2) &= G_{\kappa}^{12}(E, r_2, r_1), \\ G_{\kappa}^{22}(E, r_1, r_2) &= G_{\kappa}^{22}(E, r_2, r_1). \end{aligned} \quad (2.43)$$

erhalten. Eine genauere Beschreibung und weitere grundlegende Eigenschaften dieser radialen Green'schen Funktionen findet man z.B. in dem klassischen Paper [27]. Schließlich sei noch auf die Polstruktur und die Schnitte des vollen Elektronenpropagators $S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ in der komplexen E -Ebene eingegangen. Sie ist in der Abbildung 2.2 ersichtlich.

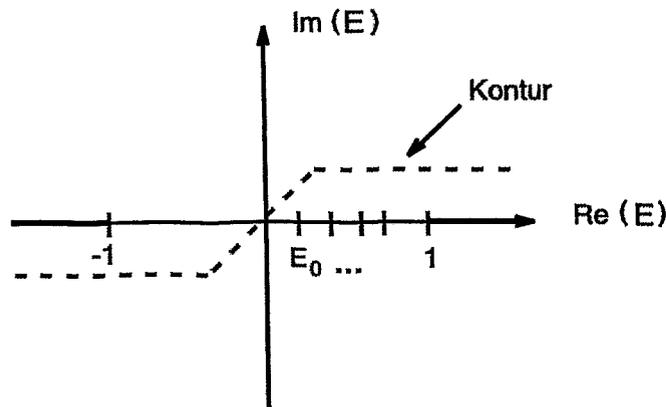


Abbildung 2.2: Der volle Elektronenpropagator hat in der komplexen E -Ebene von ± 1 ausgehend entlang der x -Achse bis $\pm\infty$ einen Schnitt. Die Pole sind die Energieeigenwerte der Dirac-Gleichung, s. dazu auch die Abbildung 2.1. Die Energieintegration ist immer entlang dem dargestellten Kontur zu verstehen.

Der freie Elektronenpropagator $S_F^0(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ folgt formal aus dem vollen Elektronenpropagator im Limes $Z\alpha \rightarrow 0$. Dieser Limes ist aber nicht trivial. Im übernächsten Abschnitt soll deshalb der freie Elektronenpropagator besprochen werden, nachdem die Zustände der freien Dirac-Gleichung diskutiert wurden.

2.1.4 Lösung der freien Dirac-Gleichung in sphärischen Koordinaten

Die Betrachtung der Lösungen der freien Dirac-Gleichung in sphärischen Koordinaten ($\mathbf{r} = (r, \theta, \phi)$) ist deshalb von Bedeutung, da der später aus ihnen zu konstruierende freie Elek-

tronenpropagator ebenso in einer sphärischen Darstellung benötigt wird. Die freie Dirac-Gleichung lautet

$$(-i\alpha\nabla + \beta)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.44)$$

Ihre Lösungen beschreiben die Bewegung eines freien Elektrons mit Impuls \mathbf{p} und in Kugelkoordinaten sind sie gegeben durch [23]

$$\Psi_{s,\kappa,\mu}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_{s,\kappa}(pr) \chi_{\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \\ iG_{s,\kappa}(pr) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Dabei wurde $p \equiv |\mathbf{p}|$ definiert und der Index s unterscheidet wieder die Zustände mit positiven und negativen Energien, welche gegeben sind durch

$$E_{s,p} = \begin{cases} +\sqrt{1+p^2} & \text{für } s = 1 \\ -\sqrt{1+p^2} & \text{für } s = 2 \end{cases}. \quad (2.46)$$

Die Spinwinkelfunktionen wurden bereits in (2.12) definiert, und die radialen Komponenten ergeben sich zu

$$F_{s,\kappa}(pr) = \sqrt{\frac{E_{s,p} + 1}{\pi E_{s,p}}} p j_l(pr),$$

$$G_{s,\kappa}(pr) = \text{sign}(E_{s,p}) \text{sign}(\kappa) \sqrt{\frac{E_{s,p} - 1}{\pi E_{s,p}}} p j_{\bar{l}}(pr). \quad (2.47)$$

Der Zusammenhang zwischen l, \bar{l} mit der Quantenzahl κ ist dabei definiert zu (vergl. mit (2.13))

$$l = |\kappa + 1/2| - 1/2,$$

$$\bar{l} = |\kappa - 1/2| - 1/2. \quad (2.48)$$

Mit diesen Lösungen kann nun der freie Elektronenpropagator hergeleitet werden.

2.1.5 Der freie Elektronenpropagator in sphärischen Koordinaten

In dieser Arbeit wird der freie Elektronenpropagator in sphärischen Koordinaten in der Orts-Energie-Darstellung benötigt. Der freie Elektronenpropagator in sphärischen Koordinaten wurde unter Verwendung der Methode der Greenschen Funktionen in [28] angegeben. Jedoch soll hier eine direkte Herleitung aus den Lösungen der freien Dirac-Gleichung erfolgen. Dieselben Überlegungen, welche im Abschnitt 2.1.3. zum vollen Elektronenpropagator in Orts-Energie-Darstellung führten (s. (2.32)), liefern zunächst für den freien Elektronenpropagator

$$S_F^0(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \int_0^\infty dp \sum_{\kappa,\mu} \sum_{s=1}^2 \frac{\psi_{s,\kappa,\mu}(\mathbf{r}_1) \psi_{s,\kappa,\mu}^\dagger(\mathbf{r}_2)}{E - E_{s,p}(1 - i\epsilon)}$$

$$= \int_0^\infty dp \sum_{\kappa,\mu} \sum_{s=1}^2 \frac{1}{E - E_{s,p}(1 - i\epsilon)} \begin{pmatrix} F_{s,\kappa}^{11} & F_{s,\kappa}^{12} \\ F_{s,\kappa}^{21} & F_{s,\kappa}^{22} \end{pmatrix},$$

wobei in der 2. Zeile bereits die Lösungen der freien Dirac-Gleichung (2.45) eingesetzt wurden. Die Matrixelemente ergeben sich somit zu

$$\begin{aligned}
 F_{s,\kappa}^{11} &= F_{s,\kappa}(pr_1) F_{s,\kappa}^*(pr_2) \chi_\kappa^\mu(\theta_1, \phi_1) \chi_\kappa^{\mu\dagger}(\theta_2, \phi_2), \\
 F_{s,\kappa}^{12} &= iG_{s,\kappa}(pr_1) F_{s,\kappa}^*(pr_2) \chi_{-\kappa}^\mu(\theta_1, \phi_1) \chi_\kappa^{\mu\dagger}(\theta_2, \phi_2), \\
 F_{s,\kappa}^{21} &= -iF_{s,\kappa}(pr_1) G_{s,\kappa}^*(pr_2) \chi_\kappa^\mu(\theta_1, \phi_1) \chi_{-\kappa}^{\mu\dagger}(\theta_2, \phi_2), \\
 F_{s,\kappa}^{22} &= G_{s,\kappa}(pr_1) G_{s,\kappa}^*(pr_2) \chi_{-\kappa}^\mu(\theta_1, \phi_1) \chi_{-\kappa}^{\mu\dagger}(\theta_2, \phi_2).
 \end{aligned} \tag{2.49}$$

Interessant ist nun, daß sich das Integral über p direkt analytisch auswerten läßt. Nach Integration über p ergibt sich demnach die Darstellung des freien Elektronenpropagators in sphärischen Koordinaten für ($r_1 > r_2$) zu:

$$S_F^0(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} G_{0,\kappa}^{11}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{11} & G_{0,\kappa}^{12}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{12} \\ G_{0,\kappa}^{21}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{21} & G_{0,\kappa}^{22}(E, r_1, r_2) \pi_{\kappa}^{22} \end{pmatrix} \tag{2.50}$$

mit den radialen Komponenten

$$\begin{aligned}
 G_{0,\kappa}^{11} &= -i(E+1)\sqrt{E^2-1} j_l(-r_1\sqrt{E^2-1}) h_l^{(1)}(-r_2\sqrt{E^2-1}), \\
 G_{0,\kappa}^{12} &= i(E^2-1) \text{sign}(\kappa) j_l(-r_1\sqrt{E^2-1}) h_l^{(1)}(-r_2\sqrt{E^2-1}), \\
 G_{0,\kappa}^{21} &= i(E^2-1) \text{sign}(\kappa) j_l(-r_1\sqrt{E^2-1}) h_l^{(1)}(-r_2\sqrt{E^2-1}), \\
 G_{0,\kappa}^{22} &= -i(E-1)\sqrt{E^2-1} j_l(-r_1\sqrt{E^2-1}) h_l^{(1)}(-r_2\sqrt{E^2-1}).
 \end{aligned} \tag{2.51}$$

Die Spinwinkelfunktionen in (2.50) waren durch (2.39) definiert. Der Fall $r_1 < r_2$ ergibt sich aus den obigen Lösungen wieder durch die Relationen (2.43). Die analytische Fortsetzung der sphärischen Besselfunktionen und sphärischen Hankelfunktionen erster Art sind gegeben durch [26]

$$j_l(ze^{i\pi m}) = e^{i\pi ml} j_l(z), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

$$h_l^{(1)}(ze^{2i\pi m}) = h_l^{(1)}(z), \quad m = 0, 1, 2, \dots \tag{2.52}$$

Schließlich sei noch folgende Bemerkung angefügt. Der freie Elektronenpropagator ist wegen der Translationsinvarianz nur eine Funktion der Differenz der Koordinaten $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ und der Energie E . Das gilt offensichtlich nicht für die einzelnen Summanden in (2.50), jedoch muss diese Forderung selbstverständlich für die gesamte Summe erfüllt sein. Das ist auch tatsächlich der Fall. Die Summe über κ in (2.50) ist analytisch ausführbar und lautet [28]:

$$S_F^0(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \left[\left(\frac{\sqrt{1-E^2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2} \right) i\alpha(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \beta + E \right] \frac{e^{-\sqrt{1-E^2}|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{4\pi|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \tag{2.53}$$

2.1.6 Der Photonenpropagator

Der Photonenpropagator im Furry-Bild unterscheidet sich nicht vom Photonpropagator der freien QED. Der Grund liegt darin, daß der Photonenfeldoperator $\hat{A}_\mu(x)$ mit dem dritten Summanden im Dirac-Hamilton-Operator \hat{H}_0^{Dirac} in (2.4), welcher ja zusammen mit dem Photon-Hamilton-Operator $\hat{H}_0^{\text{Photon}}$ die Zeitentwicklung der Feldoperatoren entsprechend (2.6) bestimmt, vertauscht. Deshalb stimmt der Photonenfeldoperator $\hat{A}_\mu(x)$ im Wechselwirkungs-Bild mit dem Photonenfeldoperator im Furry-Bild überein. Er ist in folgender Weise als zeitgeordnetes Produkt eines Vakuumerwartungswertes definiert:

$$iD_{\mu\nu}(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \langle 0 | \hat{T} \hat{A}_\mu(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{A}_\nu(t_2, \mathbf{r}_2) | 0 \rangle \quad (2.54)$$

mit dem Zeitordnungsoperator (für Bosonen stimmt der Wick'sche mit dem Dyson'schen Zeitordnungsoperator überein):

$$\hat{T} \hat{A}_\mu(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{A}_\nu(t_2, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} \hat{A}_\mu(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{A}_\nu(t_2, \mathbf{r}_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ \hat{A}_\nu(t_2, \mathbf{r}_2) \hat{A}_\mu(t_1, \mathbf{r}_1) & \text{für } t_1 < t_2 \end{cases} . \quad (2.55)$$

Die Quantisierung der Maxwell-Gleichungen ist ein äußerst nichtriviales Problem, jedoch wurde die Quantisierung in vielen Standardlehrbüchern ausführlich erläutert. An dieser Stelle sei deshalb gleich der Photonenfeldoperator in Feynman-Eichung (d.h. $\zeta = 1$) angegeben:

$$\hat{A}_\mu(t, \mathbf{r}) = \sum_{s=0}^3 \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{2E_{\mathbf{k}}} \left[\epsilon_\mu^s(\mathbf{k}) \hat{c}^s(\mathbf{k}) e^{-i(Et - \mathbf{k}\mathbf{r})} + \epsilon_\mu^{s*}(\mathbf{k}) \hat{c}^{s\dagger}(\mathbf{k}) e^{i(Et - \mathbf{k}\mathbf{r})} \right] \quad (2.56)$$

eingegangen. Die Dispersionsrelation für Photonen ist $E_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|$, und $\epsilon_\mu^s(\mathbf{k})$ ist der Polarisationsvektor. Die transversalen Photonen werden durch die Polarisationsquantenzahl $s = 1, 2$, die skalaren Photonen durch den Fall $s = 0$ und die longitudinalen Photonen durch die Quantenzahl $s = 3$ beschrieben. Die Vernichtungsoperatoren $\hat{c}^s(\mathbf{k})$ und Erzeugungsoperatoren $\hat{c}^{s\dagger}(\mathbf{k})$ der transversalen, skalaren und longitudinalen Photonen gehorchen der Bosostatistik und genügen den folgenden axiomatischen Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned} [\hat{c}^s(\mathbf{k}), \hat{c}^{s'\dagger}(\mathbf{k}')] &= \zeta_s \delta_{s,s'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} ; \\ [\hat{c}^s(\mathbf{k}), \hat{c}^{s'}(\mathbf{k}')] &= 0 ; \quad [\hat{c}^{s\dagger}(\mathbf{k}), \hat{c}^{s'\dagger}(\mathbf{k}')] = 0 , \end{aligned} \quad (2.57)$$

wobei $[\]$ den Kommutator bezeichnet. Hierbei ist $\zeta_s = 1$ für $s = 1, 2, 3$ und $\zeta_s = -1$, wenn $s = 0$. Das Vakuum ist definiert als

$$\hat{c}^s(\mathbf{k})|0\rangle = 0 , \quad (2.58)$$

d.h. es enthält keine Photonen. Einsetzen des Photonenfeldoperators in die Definition (2.54) führt direkt auf den Photonenpropagator in Feynman-Eichung:

$$D_{\mu\nu}(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -g_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{-i[E(t_1 - t_2) - \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]}}{E^2 - \mathbf{k}^2 + i\epsilon} . \quad (2.59)$$

Entsprechend dieser Gleichung kann der Photonenpropagator in Energie-Orts-Darstellung direkt abgelesen werden zu

$$D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -g_{\mu\nu} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}}{E^2 - \mathbf{k}^2 + i\epsilon} . \quad (2.60)$$

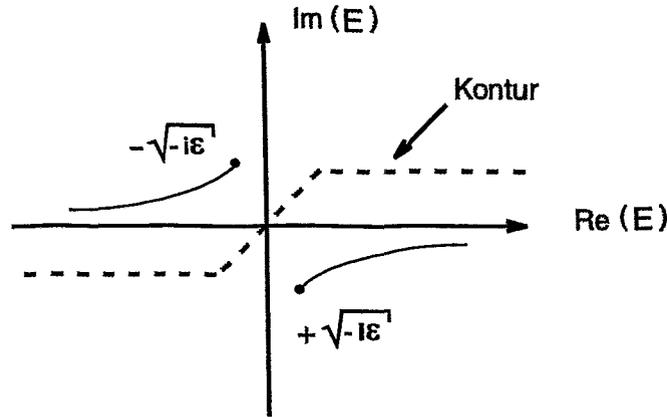


Abbildung 2.3: Die Verzweigungspunkte und Schnitte des Photonpropagators in der komplexen E -Ebene. Die Energieintegration wird entlang dem dargestellten Kontur geführt.

Legt man den Vektor $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ in z -Richtung, so kann dieses Integral im \mathbf{k} -Raum mit Hilfe der Dirac-Identität

$$\frac{1}{|\mathbf{k}| - |E| \pm i\epsilon} = P \frac{1}{|\mathbf{k}| - |E|} \mp i\pi\delta(|\mathbf{k}| - |E|) \quad (2.61)$$

(P bezeichnet hier den Cauchy'schen Hauptwert des Integrals) nach Einführung von sphärischen Koordinaten analytisch ausgeführt werden und liefert

$$D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{g_{\mu\nu} e^{i\sqrt{E^2 + i\epsilon}|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{4\pi |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (2.62)$$

In der komplexen E -Ebene hat dieser Photonpropagator wegen der beiden Riemannschen Blätter der Wurzelfunktion zwei Verzweigungspunkte und zwei Schnitte entsprechend der Abbildung 2.3. Legt man entsprechend diesen Verzweigungspunkten und Schnitten die Konturen der Energieintegration fest, so kann die $i\epsilon$ -Vorschrift fallen gelassen werden und der Photonpropagator (2.62) vereinfacht sich zu

$$D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{g_{\mu\nu} e^{iE|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{4\pi |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (2.63)$$

Die in der Abbildung 2.3 dargestellte Energiekontur ist gleichzeitig in Übereinstimmung mit dem geforderten Umlaufen der Pole des gebundenen und freien Elektronenpropagators (s.a. Abbildung 2.2).

2.2 Lamb-Verschiebung

Alle Korrekturen zu den Energieniveaus der Dirac-Theorie mit punktförmigen, unendlich schweren Atomkern werden allgemein als Lamb-Verschiebung betrachtet. Dieser Definition der Lamb-Verschiebung wird auch in dieser Arbeit gefolgt. Manchmal werden jedoch nur die reinen Strahlungskorrekturen, d.h. QED-Effekte, in die Definition der Lamb-Verschiebung einbezogen. Die Korrekturen, welche allein aus der endlichen Kernaussdehnung und endlichen Kernmasse folgen, werden in diesem Fall nicht als Lamb-Verschiebung angesehen.

Mit der S -Matrix lassen sich Streuprobleme berechnen. Sie ist aber zunächst ungeeignet, um die Lamb-Verschiebung in gebundenen Quantensystemen zu berechnen. Die entsprechenden mathematischen Ausdrücke der Energieverschiebungen exakt herzuleiten ist in der Bound-State-QED ein höchst nichttriviales Problem. Aus diesem Grund sollen in diesem Abschnitt zwei Methoden für die Herleitung der mathematischen Ausdrücke für die Lamb-Verschiebung näher betrachtet werden. Eine Methode ist die *Gell-Mann-Low-Sucher-Formel*, welche auf der Methode des adiabatischen Ein- und Ausschaltens der Wechselwirkung beruht. Gerade durch diesen Mechanismus ist diese Formel jedoch für reduzible Diagramme und insbesondere für Mehrelektronensysteme mathematisch schwieriger zu handhaben. Eine wesentlich elegantere Methode beruht auf der *Zwei-Zeiten-Green-Funktion*, welche diesen Mechanismus nicht verwendet.

2.2.1 Gell-Mann-Low-Theorem

In diesem Abschnitt soll die Gell-Mann-Low-Sucher-Formel betrachtet werden. Eine genauere Beschreibung ist in vielen Standard-Lehrbüchern enthalten ([31, 32, 33], s.a. [24]). Sie ist in engem Zusammenhang mit dem Existenzbeweis des adiabatischen Limes (2.73) zentraler Bestandteil des Gell-Mann-Low-Theorems [34] und gestattet ebenso wie die Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion die Herleitung der mathematischen Ausdrücke für die Energieverschiebungen [35]. Ihre Herleitung scheint vom physikalischen Standpunkt her einfacher, jedoch ihre Anwendung ist, zumindest für reduzible Diagramme, viel schwieriger als die Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion.

Die Formel zur Berechnung der Lamb-Verschiebungen gebundener Systeme bedient sich des adiabatischen Einschaltens und Ausschaltens der Wechselwirkung. Darunter versteht man das Ersetzen des Wechselwirkungs-Hamilton-Operators (im Furry-Bild) durch einen Wechselwirkungs-Hamilton-Operator mit einem zusätzlichen exponentiellen Faktor in der folgenden Weise

$$\hat{H}_{\text{int}}(t, \mathbf{r}) \rightarrow \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t, \mathbf{r}) = e^{-\epsilon|t|} \hat{H}_{\text{int}}(t, \mathbf{r}) \quad . \quad (2.64)$$

und der das Quantensystem beschreibende Gesamt-Hamilton-Operator ist deshalb jetzt gegeben durch (vergl. mit (2.4)):

$$\hat{H}_{\epsilon}(t, \mathbf{r}) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t, \mathbf{r}) \quad , \quad (2.65)$$

wobei die Hilfsgröße λ als eine Art Kopplungskonstante (neben der in $\hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t)$ steckenden elektrischen Ladung e) anzusehen ist. Sie ist bei der Herleitung des Ausdruckes für die Energieverschiebung notwendig, und am Ende der Berechnungen wird der Limes $\lambda \rightarrow 1$ vollzogen. Mit dieser Ersetzung wird der Störoperator $\hat{H}_{\text{int}}(t, \mathbf{r})$ für asymptotische Zeiten $t \rightarrow \pm\infty$ exponentiell gedämpft und für endliche Zeiten gelingt ein allmähliches Einschalten und Ausschalten der Wechselwirkung. Es ist dadurch möglich, divergente Zeitintegrale

der S-Matrix zunächst endlich zu halten. Nach Umsortieren dieser zunächst endlich gehaltenen Divergenzen heben sie sich durch geeignetes Zusammenfassen gegenseitig weg. Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß diese Prozedur des Weghebens der Divergenzen nicht in Zusammenhang steht mit der später zu behandelnden Renormierungprozedur der QED. Erst nach *Ausführen aller Rechnungen* kann der Limes $\epsilon \rightarrow 0$ vollzogen werden. Problematisch ist neben der Nichtkovarianz der Ersetzung (2.64) gerade dieser Limes $\epsilon \rightarrow 0$, da er sich als äußerst nichtrivial erweist.

Die Energieverschiebung ist definiert als die Differenz zwischen den Energieeigenwerten E_n des ungestörten Hamilton-Operators \hat{H}_0 und den Energieeigenwerten des Gesamt-Hamilton-Operators $\hat{H}_\epsilon(t, \mathbf{r})$ aus (2.65), d.h. die Energieverschiebung eines Zustandes $|n\rangle$ ist mit entsprechender Normierung gegeben durch

$$\Delta E_n = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \lambda \rightarrow 1}} \frac{\langle n | U_{\epsilon, \lambda}(\infty, 0) [\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(0) - E_n] U_{\epsilon, \lambda}(0, -\infty) | n \rangle}{\langle n | U_{\epsilon, \lambda}(\infty, -\infty) | n \rangle}. \quad (2.66)$$

In dieser Definitionsgleichung für die Lamb-Verschiebung erscheint der adiabatische Zeitentwicklungsoperator

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}_{\epsilon, \lambda}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle, \quad (2.67)$$

welcher die Zeitentwicklung eines Zustandes beschreibt. Entsprechend (2.7) genügt dieser Operator der Differentialgleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t, \mathbf{r}) \hat{U}(t, t_0) \quad (2.68)$$

mit der Randbedingung $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$. Durch Umformen dieser Differentialgleichung in eine Integralgleichung, welche durch Iteration lösbar ist, kann schließlich die explizite Form des Zeitentwicklungsoperators

$$\hat{U}_{\epsilon, \lambda}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{T} \left(\hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_1) \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_2) \dots \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_n) \right) \quad (2.69)$$

gewonnen werden. \hat{T} ist wieder der Wick'sche Zeitordnungsoperator. Wegen der Erhaltung der Norm eines beliebigen quantenmechanischen Zustandes für beliebige Zeiten folgt direkt aus der Definition (2.67) die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators.

Den Limes zu unendlichen Zeiten bezeichnet man als die adiabatische $S_{\epsilon, \lambda}$ -Matrix

$$\begin{aligned} \hat{S}_{\epsilon, \lambda} &= \hat{U}_{\epsilon, \lambda}(\infty, -\infty) \\ &= \hat{S}_{\epsilon, \lambda}^{(0)} + \hat{S}_{\epsilon, \lambda}^{(1)} + \hat{S}_{\epsilon, \lambda}^{(2)} + \dots \\ &= \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \hat{T} \left(\hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_1) \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_2) \dots \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_n) \right). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Unter Anwendung der wichtigen Beziehung [34, 35]

$$\langle n | U_{\epsilon, \lambda}(\infty, 0) [\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(0) - E_n] U_{\epsilon, \lambda}(0, -\infty) | n \rangle = \frac{i\epsilon\lambda}{2} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle n | S_{\epsilon, \lambda} | n \rangle \quad (2.71)$$

ergibt sich unmittelbar die Gell-Mann-Low-Sucher-Formel [34, 35]

$$\Delta E_n = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \lambda \rightarrow 1}} \frac{i\epsilon\lambda}{2} \frac{\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle n | S_{\epsilon, \lambda} | n \rangle}{\langle n | S_{\epsilon, \lambda} | n \rangle}. \quad (2.72)$$

Beim Beweis der Gleichung (2.71) wird die Voraussetzung gemacht, daß der sogenannte adiabatische Limes

$$|\Psi\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{|\Psi_\epsilon(t)\rangle}{\langle \Phi | \Psi_\epsilon(t)\rangle} \quad (2.73)$$

existiert, wobei $|\Psi_\epsilon(t)\rangle$ ein Eigenzustand des adiabatischen Hamilton-Operators (2.65), $|\Phi\rangle$ ein Eigenzustand des ungestörten Systems \hat{H}_0 und $|\Psi\rangle$ ein Eigenzustand des nichtadiabatischen, wechselwirkenden Gesamtsystems $\hat{H}(t, \mathbf{r}) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t, \mathbf{r})$ ist.

Schließlich soll noch die explizite Störungsentwicklung (unter Verwendung von (2.70)) der Gell-Mann-Low-Sucher-Gleichung bis zur Ordnung e^4 betrachtet werden:

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow 1} \frac{\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle n | S_{\epsilon, \lambda} | n \rangle}{\langle n | S_{\epsilon, \lambda} | n \rangle} &= \frac{\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle + 2\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle + 3\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(3)} | n \rangle + \dots}{1 + \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle + \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle + \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(3)} | n \rangle + \dots} \\ &= \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle \\ &\quad + \left(2\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle - (\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle)^2 \right) \\ &\quad + \left(3\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(3)} | n \rangle - 3\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle + (\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle)^3 \right) \\ &\quad + \left(4\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(4)} | n \rangle - 4\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(3)} | n \rangle - 2(\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle)^2 \right. \\ &\quad \left. + 4(\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle)^2 \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle - (\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle)^4 \right) \\ &\quad + \mathcal{O}(e^5). \end{aligned} \quad (2.74)$$

Es gibt zwei Typen von Matrixelementen, welche unterschieden werden müssen: *reduzible* und *irreduzible*. Ein reduzibles Matrixelement ist definiert als Matrixelement, welches geschrieben werden kann als Produkt von mehreren Matrixelementen niedrigerer Ordnung der Störungstheorie. Bei einem irreduziblen Matrixelement ist dies nicht möglich. Deshalb sind die Produktterme in (2.74), also z.B. die Terme $\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle^2$ und $\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(1)} | n \rangle \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle$ offensichtlich immer reduzible Matrixelemente und die reinen Terme, also z.B. die Terme $\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle$ und $\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(3)} | n \rangle$ sind die irreduziblen Matrixelemente. Jedoch auch diese irreduziblen Matrixelemente können Teile enthalten, welche reduzibel sind. Ein solches Beispiel wird gerade im Fall der Zwei-Photonen-Selbstenergie auftreten. In diesem Fall der irreduziblen Matrixelemente folgt deshalb unmittelbar aus der Gell-Mann-Low-Sucher-Formel (2.72) und der Entwicklung (2.74)

$$\Delta E_{n, \text{irr}}^{(l)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{i\epsilon}{2} l \langle n | S_{\epsilon, 1}^{(l)} | n \rangle_{\text{irr}}. \quad (2.75)$$

wobei l die Ordnung der Entwicklung nach der Kopplungskonstante e angibt. An dieser Stelle soll auf einen wichtigen Spezialfall der Gell-Mann–Low–Sucher–Formel (2.72) hingewiesen werden. Im Falle von irreduziblen Matrixelementen (oder irreduziblen Teilen eines reduziblen Matrixelements) kann nämlich der Limes $\epsilon \rightarrow 0$ sofort vollzogen werden, da für kleine Werte von ϵ die folgende Entwicklung gilt [33]

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle n | S_{\epsilon,1}^{(l)} | n \rangle_{\text{irr.}} = \frac{2}{i l \epsilon} \langle n | U^{(l)} | n \rangle_{\text{irr.}} + \mathcal{O}(\epsilon^0) \quad . \quad (2.76)$$

mit

$$\langle m | S^{(l)} | n \rangle_{\text{irr.}} = -2\pi i \delta(E_m - E_n) \langle n | U^{(l)} | n \rangle \quad (2.77)$$

Auf der linken Seite der letzten Gleichung steht die nichtadiabatische S -Matrix und nicht die adiabatische S_ϵ -Matrix. Einsetzen der Beziehung (2.76) in die Gell-Mann–Low–Sucher–Gleichung für irreduzible Diagramme (2.75) ergibt unmittelbar

$$\Delta E_{n,\text{irr.}}^{(l)} = \langle n | U^{(l)} | n \rangle \quad (2.78)$$

Ein Beweis dieser wichtigen Beziehung findet man auch in [33]. Somit ist es nicht schwierig, die mathematischen Ausdrücke für die Energieverschiebungen mit der Gell-Mann–Low–Sucher–Formel für irreduzible Matrixelemente zu finden. Allerdings bereitet dieser Zugang für die reduziblen Beiträge Schwierigkeiten, wie bereits Eingangs erwähnt wurde.

Die $S_{\epsilon,\lambda}$ -Matrix ist unitär, da sie aus dem unitären Zeitentwicklungsoperators durch den Limes zu unendlichen Zeiten hervorging. Da die einzelnen Summanden der Störungsreihe (2.70) direkt in engem Zusammenhang mit physikalischen Observablen stehen, sind sie einzeln eichinvariant. Im folgendem Abschnitt wird auf die Auswertung der adiabatischen $S_{\epsilon,\lambda}$ -Matrix (2.70) eingegangen.

2.2.2 Feynman'sche Diagramm-Technik

Um nun die zeitgeordneten Produkte in diesen einzelnen Summanden der Störungsreihe berechnen zu können, benutzt man das Wick'schen Theorem [36, 37], dessen Beweis u.a. auch in [31, 38] zu finden ist. Das Wick-Theorem stellt einen Zusammenhang her zwischen der Wick'schen Zeitordnung \hat{T} von Operatoren und der Normalordnung \hat{N} dieser Operatoren. Für zwei beliebige Operatoren \hat{A} und \hat{B} kann das Wick'sche Theorem wie folgt dargestellt werden:

$$\hat{T}(\hat{A}(x_1)\hat{B}(x_2)) = \hat{N}(\hat{A}(x_1)\hat{B}(x_2)) + \langle 0 | \hat{T}(\hat{A}(x_1)\hat{B}(x_2)) | 0 \rangle \quad . \quad (2.79)$$

Der dabei verwendete Vakuumerwartungswert $\langle 0 | \hat{T}(\hat{A}(x_1)\hat{B}(x_2)) | 0 \rangle$ wird sehr häufig auch als Kontraktion der Operatoren \hat{A} und \hat{B} bezeichnet, und es ist üblich, ihn symbolisch zu schreiben als

$$\langle 0 | \hat{T}(\hat{A}(x_1)\hat{B}(x_2)) | 0 \rangle = \overline{\hat{A}(x_1)\hat{B}(x_2)} \quad . \quad (2.80)$$

Als Vakuumerwartungswert wird er offensichtlich genau dann verschwinden, wenn keiner der beiden Operatoren \hat{A} , \hat{B} Teilchen erzeugt, die der andere vernichtet. Insbesondere verschwinden also diejenigen Vakuumerwartungswerte mit Operatoren, die zu verschiedenen

Quantenfeldern gehören. Die nichtverschwindenden Kontraktionen sind bis auf einen Konventionsfaktor i gerade die Feynman-Propagatoren. Sind also \hat{A} , \hat{B} Feldoperatoren des quantisierten Elektron-Positron-Feldes, so ist (2.80) der Feynmanische Elektronenpropagator und sind \hat{A} , \hat{B} die Feldoperatoren des quantisierten Maxwell-Feldes, so ist (2.80) der Feynmanische Photonenpropagator. Die Verallgemeinerung des Wick'schen Theorems für beliebig viele Operatoren bosonischer und fermionischer Natur lautet

$$\begin{aligned}
& \hat{T} \left(\hat{A}(x_1) \hat{B}(x_2) \hat{C}(x_3) \hat{D}(x_4) \dots \hat{W}(x_{n-3}) \hat{X}(x_{n-2}) \hat{Y}(x_{n-1}) \hat{Z}(x_n) \right) \\
&= \hat{N} \left(\hat{A}(x_1) \hat{B}(x_2) \hat{C}(x_3) \hat{D}(x_4) \dots \hat{W}(x_{n-3}) \hat{X}(x_{n-2}) \hat{Y}(x_{n-1}) \hat{Z}(x_n) \right) \\
&+ \hat{N} \left(\overline{\hat{A}(x_1) \hat{B}(x_2) \hat{C}(x_3) \hat{D}(x_4) \dots \hat{W}(x_{n-3}) \hat{X}(x_{n-2}) \hat{Y}(x_{n-1}) \hat{Z}(x_n)} \right) \\
&+ \hat{N} \left(\overline{\hat{A}(x_1) \hat{B}(x_2) \hat{C}(x_3) \hat{D}(x_4) \dots \hat{W}(x_{n-3}) \hat{X}(x_{n-2}) \hat{Y}(x_{n-1}) \hat{Z}(x_n)} \right) \\
&+ \dots + \hat{N} \left(\overline{\hat{A}(x_1) \hat{B}(x_2) \hat{C}(x_3) \hat{D}(x_4) \dots \hat{W}(x_{n-3}) \hat{X}(x_{n-2}) \hat{Y}(x_{n-1}) \hat{Z}(x_n)} \right) \\
&+ \hat{N} \left(\overline{\hat{A}(x_1) \hat{B}(x_2) \hat{C}(x_3) \hat{D}(x_4) \dots \hat{W}(x_{n-3}) \hat{X}(x_{n-2}) \hat{Y}(x_{n-1}) \hat{Z}(x_n)} \right) \\
&+ \dots + \hat{N} \left(\overline{\hat{A}(x_1) \hat{B}(x_2) \hat{C}(x_3) \hat{D}(x_4) \dots \hat{W}(x_{n-3}) \hat{X}(x_{n-2}) \hat{Y}(x_{n-1}) \hat{Z}(x_n)} \right) + \dots \quad (2.81)
\end{aligned}$$

Nach diesem Theorem läßt sich also ein zeitgeordnetes Produkt einer beliebigen Anzahl von Operatoren in eine Summe von Normalprodukten entwickeln, deren einzelne Summanden alle möglichen Kontraktionen von je zwei Operatoren enthalten. Eine weitere Verallgemeinerung des Wick'schen Theorems besteht in dem Fall, daß einige Operatoren $\hat{A}(x_1) \dots \hat{Z}(x_1)$ im zeitgeordneten Produkt (2.81) bereits normalgeordnet sind. Dieser Fall wird offensichtlich mit der Lagrangedichte (2.1) relevant. In diesem Fall müssen alle Normalordnungen, welche Kontraktionen von Operatoren enthalten, die bereits im zeitgeordneten Produkt normalgeordnet waren, wieder subtrahiert werden. Es ist klar, daß die entstandenen Terme sehr schnell unübersichtlich werden. Von Feynman u.a. wurde deshalb eine sehr kraftvolle und auch sehr anschauliche Diagramm-Technik entwickelt [39, 40]. Jedem Summanden in (2.81) entspricht demnach ein sogenanntes Feynman-Diagramm. Mit diesen Feynman-Diagrammen kann dann zusammen mit den sogenannten Feynman-Regeln in einfacher Weise die mathematische Struktur der Matrixelemente der adiabatischen $S_{\epsilon, \lambda}$ -Matrix bestimmt werden. An zwei grundlegenden Beispielen soll diese Diagramm-Technik im folgenden genauer erläutert werden.

Dazu betrachten wir die $S_{\epsilon, \lambda}$ -Matrix in 2. Ordnung Störungstheorie, wobei wir nun wegen (2.74) $\lambda = 1$ setzen können. Aus (2.70) folgt zunächst

$$\hat{S}_{\epsilon, 1}^{(2)} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \hat{T} \left(\hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_1) \hat{H}_{\epsilon, \text{int}}(t_2) \right) . \quad (2.82)$$

Einsetzen der expliziten Form der Wechselwirkung im Furry-Bild (s.a. (2.4))

$$\hat{H}_{\text{int}}(t) = -e \int d^3 \mathbf{r} \hat{N} \left[\hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) \alpha^\mu \hat{A}_\mu^{\text{rad}}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) \right] , \quad (2.83)$$

wobei wieder aus Gründen der Übersichtlichkeit die Diracindizes der Feldoperatoren $\hat{\Psi}(t, \mathbf{r})$ und der γ -Matrizen nicht explizit notiert wurden, führt unter Berücksichtigung des adiabatischen Faktors (2.64) auf

$$\hat{S}_{\epsilon, 1}^{(2)} = -\frac{1}{2}e^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int d^3\mathbf{r}_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int d^3\mathbf{r}_2 e^{-\epsilon|t_1|} e^{-\epsilon|t_2|} \times \hat{T} \left(\hat{N} \left[\hat{\Psi}^\dagger(t_1, \mathbf{r}_1) \alpha^\mu \hat{A}_\mu^{\text{rad}}(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) \right] \hat{N} \left[\hat{\Psi}^\dagger(t_2, \mathbf{r}_2) \alpha^\nu \hat{A}_\nu^{\text{rad}}(t_2, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t_2, \mathbf{r}_2) \right] \right). \quad (2.84)$$

Entsprechend dem Wick'schen Theorem (2.81) kann jetzt das zeitgeordnete Produkt als Summe von normalgeordneten Produkten mit allen möglichen Kontraktionen geschrieben werden. Es wird nun die Einschränkung auf Ein-Elektronensysteme getroffen werden, d.h. die in den Matrixelementen

$$\langle n | S_{\epsilon, 1}^{(2)} | n \rangle \quad (2.85)$$

auf tretenden Zustände $|n\rangle$ beschreiben Zustände mit nur einem Elektron. Somit sollen auch keine äußeren Photonen zugelassen sein. Diese Einschränkung bedeutet, daß die Photonfeldoperatoren $\hat{A}_\mu(t, \mathbf{r})$ und immer zwei der insgesamt vier Diracfeldoperatoren $\hat{\Psi}(t, \mathbf{r})$ kontrahiert werden müssen. Die unkontrahierten Operatoren nennt man auch freie Operatoren. Desweiteren sei an dieser Stelle bemerkt, daß die voll kontrahierten Beiträge zur $S_{\epsilon, \lambda}$ -Matrix sogenannte unverbundene Graphen darstellen. Diese unverbundenen Graphen tragen jedoch entsprechend dem Linked-Cluster-Theorem [41] nur einen Phasenfaktor zur Gesamtamplitude der $S_{\epsilon, \lambda}$ -Matrix bei. Deshalb können sie bei der Auswertung der Gell-Mann-Low-Sucher-Formel unberücksichtigt bleiben, denn die Quantentheorie ist nur bis auf einen beliebigen Phasenfaktor bestimmt, so daß dieser Phasenfaktor immer in den Zustand $|n\rangle$ absorbiert werden kann.

Nach diesen beiden Einschränkungen (Ein-Elektron-Zustände und Ausschluß der vollkontrahierten Beiträge) verbleiben nur vier mögliche Kontraktionen nach Anwendung des Wick-Theorems auf (2.84), von denen zwei explizit angegeben werden:

$$\hat{S}_{\epsilon, 1}^{(2, \text{SE})} = -\frac{e^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int d^3\mathbf{r}_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int d^3\mathbf{r}_2 e^{-\epsilon|t_1|} e^{-\epsilon|t_2|} \times \hat{N} \left[\overline{\left(\hat{N} \hat{\Psi}^\dagger(t_2, \mathbf{r}_2) \alpha^\mu \hat{A}_\mu^{\text{rad}}(t_2, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t_2, \mathbf{r}_2) \right) \left(\hat{N} \hat{\Psi}^\dagger(t_1, \mathbf{r}_1) \alpha^\nu \hat{A}_\nu^{\text{rad}}(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) \right)} \right] \quad (2.86)$$

und

$$\hat{S}_{\epsilon, 1}^{(2, \text{VP})} = -\frac{e^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int d^3\mathbf{r}_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int d^3\mathbf{r}_2 e^{-\epsilon|t_1|} e^{-\epsilon|t_2|} \times \hat{N} \left[\overline{\left(\hat{N} \hat{\Psi}^\dagger(t_2, \mathbf{r}_2) \alpha^\mu \hat{A}_\mu^{\text{rad}}(t_2, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t_2, \mathbf{r}_2) \right) \left(\hat{N} \hat{\Psi}^\dagger(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) \alpha^\nu \hat{A}_\nu^{\text{rad}}(t_1, \mathbf{r}_1) \right)} \right]. \quad (2.87)$$

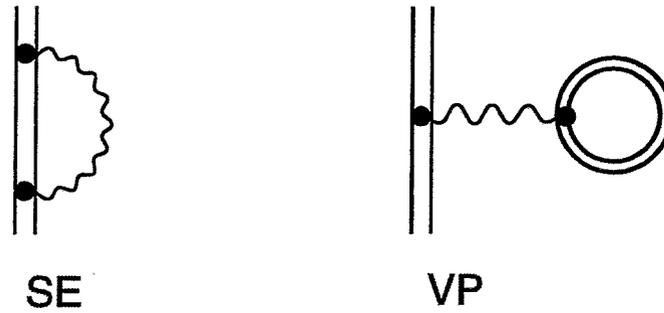


Abbildung 2.4: Die den expliziten Ausdrücken der $S_{\epsilon,1}^{(2)}$ -Matrix entsprechenden Feynmandiagramme der Selbstenergie SE und der Vakuumpolarisation VP

Mit der Definition des gebundenen Elektronenpropagators (2.27), (2.33) und der Definition des Photonpropagators (2.54) lassen sich diese beiden Ausdrücke graphisch darstellen (s. Abbildung 2.4). Die anderen beiden Möglichkeiten der Kontraktion ergeben dieselben Terme (2.86), (2.87) noch einmal, nur mit vertauschten Koordinaten. Da jedoch über den gesamten Raum $t_1, \mathbf{r}_1, t_2, \mathbf{r}_2$ integriert wird, liefern sie denselben Beitrag wie die obigen beiden. Der Faktor $\frac{1}{2}$ verschwindet also im Endergebnis.

Es ist nun nicht schwierig, aus den angegebenen expliziten Ausdrücken die folgenden, sogenannten Feynmanregeln zur Bildung aller $S_{\epsilon,1}$ -Matrixelemente $\langle \varphi_{n,\kappa,m} | S_{\epsilon,1} | \varphi_{n,\kappa,m} \rangle$ abzulesen:

1. ein Faktor $(-i)^n$ für ein Diagramm n -ter Ordnung Störungstheorie
2. ein Faktor $e^{\alpha^\mu} e^{-\epsilon|t|}$ für jeden Vertex
3. für jede innere Elektronenlinie: $iS_F(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$
4. für jede innere Photonlinie: $iD_{\mu\nu}(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$
5. ein Faktor -1 und die Spur für jede geschlossene Elektronenschleife
6. Integration über die Koordinaten t, \mathbf{r} in allen Vertizes
7. für jedes einlaufende Elektron $\varphi_{n,\kappa,\mu}(t, \mathbf{r})$
8. für jedes auslaufende Elektron $\varphi_{n,\kappa,\mu}^\dagger(t, \mathbf{r})$

Der Fall einlaufender bzw. auslaufender Photonen wird in dieser Arbeit nicht benötigt und wurde deshalb nicht aufgenommen. Allerdings sollen noch folgende Anmerkungen gemacht werden:

- a) In der $S_{\epsilon,1}$ -Matrix (2.70) erscheint der Faktor $\frac{1}{n!}$. Jedoch entsprechend dem Wick-Theorem (2.81) führt die Entwicklung des \hat{T} -Produktes zu genau $n!$ Summanden gleicher Struktur, die sich lediglich durch Permutation der Koordinaten unterscheiden. Da über diese Koordinaten integriert wird, beschreiben diese topologisch äquivalenten Graphen denselben physikalischen Prozess, d.h. sie liefern denselben mathematischen Ausdruck. Somit werden sie unter Weglassen des Faktors $n!$ nur einmal gezählt. Der oben explizit behandelte Fall in 2. Ordnung mit dem Wegfallen des Faktors $\frac{1}{2!}$ ist also ein Spezialfall dieser allgemeinen Aussage.

- b) Der zusätzliche Faktor -1 in der 5. Regel findet seine Ursache in der Antikommutation der fermionischen Feldoperatoren $\hat{\Psi}(t, \mathbf{r})$. Dies wird klar am obigen Beispiel (2.87). Die Kontraktion führt zwar auf den Elektronenpropagator, jedoch mit einem negativen Vorzeichen, d.h.: $\hat{\Psi}^\dagger(t_1, \mathbf{r}_1)\hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) = -iS_F(t, \mathbf{r})$.
- c) Unter der Spur in der 5. Regel ist die Spur in den Diracindizes zu verstehen. Auch dies wird verständlich, wenn man im Beispiel (2.87) die explizite Notation in den Diracindizes betrachtet: $\hat{\Psi}^\dagger(t_1, \mathbf{r}_1)\alpha_\mu\hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) \equiv \hat{\Psi}^{\beta\dagger}(t_1, \mathbf{r}_1)(\alpha_\mu)_{\beta\gamma}\hat{\Psi}^\gamma(t_1, \mathbf{r}_1) = -i\text{Tr}[\alpha_\mu S_F(t, \mathbf{r})]$
- d) Schließlich sei noch auf folgende Problematik hingewiesen, welche aus der Methode des adiabatischen Ein- und Ausschaltens der Wechselwirkung folgt. Eine wesentliche Verkomplizierung dieser Feynman-Regeln steckt nämlich in der 2. Regel, da bei den Zeitintegrationen in den Feynman-Diagrammen keine einfachen δ -Funktionen erscheinen. Vielmehr wird statt der δ -Funktion die veränderte Darstellung $\Delta_\epsilon(x)$ benötigt:

$$\Delta_\epsilon(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-ixt} e^{-\epsilon|t|} = \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \quad (2.88)$$

mit der Eigenschaft

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Delta_\epsilon(x) = \delta(x) . \quad (2.89)$$

Da der Limes $\epsilon \rightarrow 0$ erst nach Abschluß aller Rechnungen, d.h. insbesondere nach einer weiteren Integration mit $\Delta_\epsilon(x)$ als Integrand, durchgeführt wird, sind nun die einfachen Integrationen über δ -Funktionen nicht mehr möglich. Darin besteht die wesentliche Schwierigkeit des Zugangs von Gell-Mann, Low und Sucher.

Die Vorteile der Diagramm-Technik sind offensichtlich. Aus den sehr unanschaulichen algebraischen Ausdrücken der $S_{\epsilon, 1}$ -Matrix-Elemente werden physikalisch verständliche, elementare Prozesse mit sehr anschaulich-graphischen Charakter. Der zweite Vorteil ist sogar von noch entscheidenderer Bedeutung. Der Ausgangspunkt für theoretische Berechnungen ist oftmals nicht mehr die unzählige Fülle algebraischer Ausdrücke, welche sich ja nach dem Wick-Theorem ergeben. Vielmehr lautet die Aufgabe für störungstheoretische Berechnungen nunmehr: Finde alle topologisch äquivalenten Diagramme. Es ist klar, daß diese Aufgabe viel einfacher und übersichtlicher, vor allem für höhere Ordnungen der Störungstheorie, ist, als die doch etwas umständliche Anwendung des Wick-Theorems. Aus diesen Gründen ist die Feynmansche Diagramm-Technik von herausragender Bedeutung und nicht mehr wegzudenken, nicht nur aus der QED sondern aus allen Quantenfeldtheorien.

2.2.3 Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion

Nachdem auf die Vor- und Nachteile des Zugangs von Gell-Mann-Low-Sucher eingegangen wurde, soll nun eine moderne Methode erläutert werden, welche in der Lage ist, die beschriebenen Nachteile von Gell-Mann-Low-Sucher zu umgehen.

Die Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion wurde von *Shabaev* für die QED entwickelt und erstmalig veröffentlicht in [42].

Der entscheidende Vorteil dieser Methode gegenüber der Gell-Mann-Low-Sucher-Formel besteht darin, daß die Methode des adiabatischen Ein- und Ausschaltens der Wechselwirkung hier nicht zur Anwendung kommt. Dadurch wird eine wesentliche Vereinfachung erzielt, wie insbesondere später explizit bei der Herleitung der QED-Korrekturterme in 2. Ordnung Störungstheorie ersichtlich wird.

Die hier vorgestellte Methode soll zunächst allgemein für beliebig viele Elektronen entwickelt und erst später auf den Fall eines einzigen Elektrons spezifiziert werden. Diese allgemeinere Herangehensweise bringt keine wesentliche Verkomplizierung mit sich, sondern erlaubt sogar ein besseres Verständnis dieser Methode.

Ausgangspunkt ist die Green-Funktion für N Elektronen in Heisenberg-Darstellung (das Heisenberg-Bild wird nur in diesem Abschnitt von (2.90) bis (2.107) verwendet, so daß keine Verwechslung mit dem Furry-Bild auftreten kann):

$$\begin{aligned} G(t'_1, \mathbf{r}'_1, \dots, t'_N, \mathbf{r}'_N; t_1, \mathbf{r}_1, \dots, t_N, \mathbf{r}_N) \\ = \langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}(t'_1, \mathbf{r}'_1) \dots \hat{\Psi}(t'_N, \mathbf{r}'_N) \hat{\Psi}(t_N, \mathbf{r}_N) \dots \hat{\Psi}(t_1, \mathbf{r}_1) | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.90)$$

Diese Green-Funktion enthält sämtliche Informationen über die Energiezustände des betrachteten physikalischen Quantensystems. Jedoch ist es sehr schwierig, diese physikalischen Größen direkt aus dieser komplizierten Funktion zu gewinnen. Zudem enthält sie vom physikalischen Blickpunkt aus zu viele Informationen, welche nur mathematischer und nicht physikalischer Natur sind. Deshalb wird die sogenannte Zwei-Zeiten-Green-Funktion definiert:

$$\begin{aligned} \overline{G}(t', \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N; t, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ = G(t'_1 = \dots = t'_N \equiv t', t_1 = \dots = t_N \equiv t, \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ = \langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}(t', \mathbf{r}'_1) \dots \hat{\Psi}(t', \mathbf{r}'_N) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_N) \dots \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Die Zwei-Zeiten-Green-Funktionen wurden in der Vergangenheit in verschiedensten Gebieten der Physik untersucht [43, 44] und angewandt. Im später zu behandelnden Fall eines einzigen Elektrons ist es natürlich nicht notwendig, zu dieser Zwei-Zeiten-Green-Funktion überzugehen, da in diesem Fall nur zwei Diracoperatoren in (2.91) beitragen, d.h. sowieso nur zwei Zeiten auftreten.

Die Zwei-Zeiten-Green-Funktion (2.91) hat zunächst keinen direkten physikalischen Sinn. Jedoch sind die Verzweigungspunkte (bzw. die Pole) der Greenschen Funktion (2.91) die exakten Energieniveaus des betrachteten Quantensystems. Das wird klar an der Spektraldarstellung. Dazu wird von (2.91) die Fouriertransformierte bezüglich der Zeit betrachtet:

$$\begin{aligned} \overline{G}(E, \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \delta(E - E') &= \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-iEt + iE't') \\ &\times \langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}(t', \mathbf{r}'_1) \dots \hat{\Psi}(t', \mathbf{r}'_N) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_N) \dots \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Die Spektraldarstellung von $\overline{G}(E)$ lautet (ein Beweis ist z.B. im Anhang A von [46] zu finden)

$$\overline{G}(E, \mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_{N'}'; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \delta(E - E') \\ = \sum_n \frac{\overline{\Phi}_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \overline{\Phi}_n(\mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_{N'}')}{E - E_n + i0} + (-1)^N \sum_n \frac{\Xi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \Xi_n(\mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_{N'}')}{E + E_n - i0}$$

mit

$$\begin{aligned} \overline{\Phi}_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_1), \dots, \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_N) | n \rangle, \\ \overline{\Phi}_n(\mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_{N'}') &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle n | \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_{N'}'), \dots, \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_1') | 0 \rangle, \\ \Xi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle n | \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_1), \dots, \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_N) | 0 \rangle, \\ \Xi_n(\mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_{N'}') &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_{N'}'), \dots, \hat{\Psi}(0, \mathbf{r}_1') | n \rangle, \end{aligned} \quad (2.93)$$

wobei $E_n = \epsilon_n^{(1)} + \epsilon_n^{(2)} + \dots + \epsilon_n^{(N)}$ die Summe über die einzelnen exakten Einteilchenenergien der N Elektronen ist, und die Zustände $|n\rangle$ sind die dazugehörigen exakten Elektronenzustände. D.h., insbesondere in nullter Ordnung gilt $E_n^{(0)} = \epsilon_n^{(1)(0)} + \epsilon_n^{(2)(0)} + \dots + \epsilon_n^{(N)(0)}$, wobei die $\epsilon_n^{(i)(0)}$ die Energieeigenwerte der Diracgleichung $(\alpha \mathbf{p} + \beta + V) \phi_k^{(i)} = \epsilon_k^{(i)(0)} \phi_k^{(i)}$ sind.

In der Spektraldarstellung (2.93) ist die Summe zu verstehen als Integral über das kontinuierliche Spektrum und als Summe über alle n diskreten Zustände des Systems Atom + Feld. Jedoch sollen dazu noch folgende Bemerkungen (s.a. [46]) zur Polstruktur des diskreten Spektrums von $G(E)$ gemacht werden (es soll hier nur das diskrete Spektrum für positive Energien betrachtet werden, da für die Lamb-Verschiebung nur der Grundzustand und die angeregten Zustände von Interesse sind):

In der Diractheorie mit klassischem Coulomb-Potential (d.h. ohne irgendeine Wechselwirkung mit einem quantisierten elektromagnetischen Feld) sind die Zustände stabil und können nicht ineinander übergehen bzw. zerfallen. Somit besitzen die Energiezustände in der Diractheorie keinen Imaginärteil, und es gibt nur isolierte Pole auf der reellen E -Achse. Die QED ändert dieses Bild, da, mit Ausnahme des Grundzustandes, keine stabilen Zustände existieren und somit alle Pole (mit Ausnahme des Grundzustandes) einen Imaginärteil besitzen. Hinzu kommt, daß das Photon keine Masse hat, und somit können die Elektronen in einem beliebigen Energiezustand E_n beliebig kleine Energien absorbieren. In der komplexen E -Ebene würde das bedeuten, daß jeder isolierte Pol der Diractheorie in der QED zu jeweils einem Verzweigungspunkt entartet ist, von dem aus ein Schnitt parallel zur positiven reellen E -Achse verläuft. Da man an den isolierten Energiezuständen des Systems, d.h. an den isolierten Polen der Zwei-Zeiten-Green-Funktion $G(E)$ interessiert ist, bedient man sich in der QED des folgenden Tricks. Es wird eine künstliche Photonenmasse μ eingeführt, so daß der Photonenpropagator einem massivem Vektorteilchen entspricht. Den Elektronen in den Zuständen E_n ist es nun nicht mehr möglich, beliebig kleine Energien zu emittieren. Vielmehr ist die kleinste mögliche Energie, welche emittiert werden kann, genau die Photonenmasse μ . Damit spalten die Pole von dem Schnitt um genau μ nach links ab, und man erhält isolierte Pole. Die Polstruktur der Zwei-Zeiten-Green-Funktion sieht nunmehr entsprechend Abbildung 2.5 aus. Die Schnitte parallel zur positiven E -Achse wurden dabei parallel zur imaginären E -Achse gezogen und um die isolierten Pole wurde bereits eine Integrationskurve Γ gezogen. Erst jetzt kann (im diskreten Spektrum) wirklich von einer Summe in (2.93)

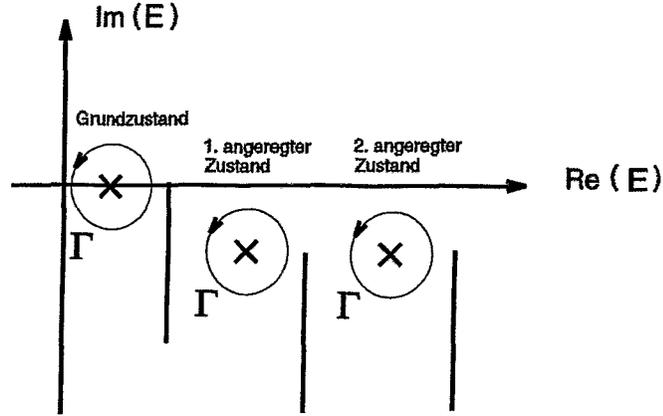


Abbildung 2.5: Die Polstruktur und die Schnitte der Zwei-Zeiten-Green-Funktion. Eine kleine Photonenmasse μ bewirkt in der komplexen Energieebene eine Isolierung der Energiezustände. Das Kreuz stellt den jeweiligen, isolierten Energiezustand dar. Die Linien parallel zur imaginären Achse stellen die Schnitte der Zwei-Zeiten-Green-Funktion dar.

gesprochen werden.

Das nächste Ziel ist nun, die isolierten Energiezustände E_n aus der Zwei-Zeiten-Green-Funktion zu gewinnen. Dazu ist es notwendig, eine neue Funktion $g(E)$ zu definieren. In den Funktionen $\bar{\Phi}_n$ und $\bar{\Xi}_n$ von (2.93) lassen sich jeweils N γ^0 -Matrizen rechts herausziehen, da gilt $\bar{\Phi} = \Phi^+ \gamma^0$ (diese N Matrizen $\gamma_N^0 \dots \gamma_1^0$ vertauschen, da sie zu verschiedenen Elektronen gehören). Aufgrund der Relation $\gamma^0 \gamma^0 = \mathbb{1}$ ist die folgende Definition sehr zweckmäßig:

$$\begin{aligned}
 g_{nn}(E) &= \langle u_n | \bar{G}(E) (\gamma_1^0 \dots \gamma_N^0) | u_n \rangle \\
 &= \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \int d^3 x'_1 \dots d^3 x'_N u_n^+(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \\
 &\times \left(\sum_n \frac{\bar{\Phi}_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \bar{\Phi}_n^+(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N)}{E - E_n + i0} + (-1)^N \sum_n \frac{\bar{\Xi}_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \bar{\Xi}_n^+(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N)}{E + E_n - i0} \right) u_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N),
 \end{aligned} \tag{2.94}$$

wobei $|u_n\rangle$ den ungestörten Elektronen-Zustand bezeichnet. Mit der Definition der beiden Konstanten (c -Zahlen):

$$\begin{aligned}
 A_n &= \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \int d^3 x'_1 \dots d^3 x'_N u_n^+(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \left(\bar{\Phi}_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \bar{\Phi}_n^+(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \right) u_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\
 B_n &= \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \int d^3 x'_1 \dots d^3 x'_N u_n^+(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \left(\bar{\Xi}_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \bar{\Xi}_n^+(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \right) u_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)
 \end{aligned} \tag{2.95}$$

folgt schließlich

$$g_{nn}(E) = \sum_n \frac{A_n}{E - E_n + i0} + (-1)^N \sum_n \frac{B_n}{E + E_n - i0}. \tag{2.96}$$

Nun wird eine Kurve Γ in der komplexen E -Ebene so gewählt, daß Γ immer in der Nähe des betrachteten Pols E_n liegt und dabei diesen Energiezustand umrundet (s. obige Abbildung).

Die Anwendung des Residuensatzes ergibt für die beiden Konturintegrale

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE g_{nn}(E) &= A_n, \\ \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE E g_{nn}(E) &= E_n A_n, \end{aligned} \quad (2.97)$$

und aus diesen beiden Gleichungen folgt unmittelbar die zentrale Formel zur Berechnung der Energieverschiebungen mit der Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion nach *Shabaev* [42, 45, 46]:

$$E_n = \frac{\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE E g_{nn}(E)}{\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE g_{nn}(E)}. \quad (2.98)$$

Diese Gleichung gestattet es, die exakten Energiezustände zu berechnen. Jedoch ist es zweckmäßiger, eine Formel abzuleiten, welche es ermöglicht, direkt die Lamb-Verschiebung zu berechnen. Dazu wird die Größe

$$\Delta g_{nn}(E) = g_{nn} - g_{nn}^{(0)} \quad (2.99)$$

definiert, wobei $g_{nn}^{(0)}$ die 0. Ordnung Störungstheorie bedeutet, d.h. wenn bei der Berechnung der Funktion g_{nn} entsprechend (2.94) nur die Diractheorie mit Coulombpotential benutzt wird. Einsetzen dieser Funktion (2.99) in (2.98) liefert

$$\Delta E_n = \frac{\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \Delta E \Delta g_{nn}(E)}{1 + \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \Delta g_{nn}(E)}, \quad (2.100)$$

wobei $\Delta E_n = E_n - E_n^{(0)}$ und $\Delta E = E - E_n^{(0)}$ definiert wurde. Mit Hilfe dieser Gleichung kann man nun direkt die Energieverschiebungen berechnen. Allerdings ist es doch zweckmäßig, sie noch auf die beiden wichtigen Fälle der 1. und 2. Ordnung Störungstheorie zu spezifizieren. Dazu wird die Entwicklung der Funktion $\Delta g_{nn}(E)$ nach der Kopplungskonstanten

$$\Delta g_{nn}(E) = \Delta g_{nn}^{(1)}(E) + \Delta g_{nn}^{(2)}(E) + \dots \quad (2.101)$$

in die obige Gleichung (2.100) eingesetzt, und dies ergibt schließlich für die 1. Ordnung Störungstheorie

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \Delta E \Delta g_{nn}^{(1)}, \quad (2.102)$$

und für die 2. Ordnung Störungstheorie

$$\Delta E_n^{(2)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \Delta E \Delta g_{nn}^{(2)} - \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \Delta E \Delta g_{nn}^{(1)} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \Delta g_{nn}^{(1)}. \quad (2.103)$$

Um nun in konkreten Rechnungen diese beiden Formeln (2.102) und 2.103) tatsächlich anwenden zu können, muss noch die Gleichung zur Berechnung der zentralen Funktion g_{nn}

(d.h. (2.94) zusammen mit (2.92)) in eine praktischere Form gegossen werden. Diese Form wird durch die folgenden beiden Gleichungen erreicht:

$$\begin{aligned}
 g_{nn}(E) \delta(E - E') &= \frac{2\pi}{i} \frac{1}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 \dots dE_N \int_{-\infty}^{\infty} dE'_1 \dots dE'_N \\
 &\times \delta(E - E_1 - \dots - E_N) \delta(E' - E'_1 - \dots - E'_N) \\
 &\times \langle u_n | \overline{G}(E'_1, \dots, E'_N; E_1, \dots, E_N) \gamma_1^0 \dots \gamma_N^0 | u_n \rangle
 \end{aligned} \tag{2.104}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \overline{G}(E'_1, \dots, E'_N; E_1, \dots, E_N) &= (2\pi)^{-2N} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_N \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \dots dt'_N \\
 &\times \exp(iE'_1 t'_1 + \dots + iE'_N t'_N - iE_1 t_1 - \dots - iE_N t_N) \\
 &\times \langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}(x'_1) \dots \hat{\Psi}(x'_N) \hat{\Psi}(x_N) \dots \hat{\Psi}(x_1) | 0 \rangle.
 \end{aligned} \tag{2.105}$$

Natürlich muss diese zuletzt angegebene Form mit der Form in den Gleichungen (2.94) und (2.92) übereinstimmen. Dies kann man aber zeigen, indem man (2.105) in (2.104) einsetzt und die Integrationen über die δ -Funktionen ausführt. Nun soll noch (2.104) auf den in dieser Arbeit relevanten Fall eines einzelnen Elektrons spezifiziert werden. Die Formel zur Berechnung der Funktion $g_{nn}(E)$ lautet dann

$$\begin{aligned}
 g_{nn}(E) \delta(E - E') &= \frac{2\pi}{i} \frac{1}{1!} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 \int_{-\infty}^{\infty} dE'_1 \delta(E - E_1) \delta(E' - E'_1) \\
 &\times \langle u_n | \overline{G}(E'_1, E_1) \gamma_1^0 | u_n \rangle,
 \end{aligned} \tag{2.106}$$

und nach Integration über die beiden δ -Funktionen folgt unmittelbar

$$g_{nn}(E) \delta(E - E') = \frac{2\pi}{i} \langle u_n | \overline{G}(E', E) \gamma_1^0 | u_n \rangle. \tag{2.107}$$

Die Gleichung (2.107) zusammen mit (2.105) bildet das Grundgerüst für die Herleitung der mathematischen Ausdrücke für die Lamb-Verschiebung eines Atoms mit einem Elektron. Es ist klar, daß die komplizierte Gleichung (2.105) zur Berechnung von \overline{G} nur in Störungstheorie ausgewertet werden kann. Um zu diesen Feynmanregeln zu gelangen, ist es notwendig (s. Kapitel 2.1), vom Heisenbergbild (2.105) in das Furry-Bild überzugehen und anschließend das Wicktheorem anzuwenden. Der Übergang in das Furry-Bild ist durch folgende Gleichung gegeben:

$$\begin{aligned}
 &\langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}(x'_1) \dots \hat{\Psi}(x'_N) \hat{\Psi}(x_N) \dots \hat{\Psi}(x_1) | 0 \rangle \\
 &= \frac{\langle 0 | \hat{T} \hat{\Psi}_{\text{int}}(x'_1) \dots \hat{\Psi}_{\text{int}}(x'_N) \hat{\Psi}_{\text{int}}(x_N) \dots \hat{\Psi}_{\text{int}}(x_1) \exp(i \int d^4z \mathcal{L}_{\text{int}}(z)) | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{T} \exp(i \int d^4z \mathcal{L}_{\text{int}}(z)) | 0 \rangle}
 \end{aligned} \tag{2.108}$$

Einen Beweis dieser Formel findet man für den Übergang vom Heisenberg-Bild in das Wechselwirkungs-Bild z.B. in [47]. Der dort explizit gezeigte Übergang ist aber direkt übertragbar für den hier benötigten Fall zwischen Heisenberg- und Furry-Bild. Nun kann das Wick-Theorem wie im vorherigen Abschnitt direkt angewendet werden und man bekommt die folgenden Feynmanregeln in der Energie-Orts-Darstellung zur Berechnung der Funktion $\overline{G}(E'_1, \dots, E'_N; E_1, \dots, E_N)$:

1. für eine äußere Elektronenlinie einen Faktor $(i/2\pi)S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\gamma_0$
2. für jede innere Elektronenlinie ein Integral $(i/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} dE S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\gamma_0$
3. für jede Elektronenlinie, welche nicht verbunden ist mit anderen Elektronenlinien oder Photonlinien einen Faktor $(i/2\pi)S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\gamma_0 \delta(E - E')$
4. für jede innere Photonlinie ein Integral $(i/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} dE D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$
5. für jeden Elektron-Photon-Vertex ein Integral $-ie\alpha^\mu 2\pi \int d^3\mathbf{r} \delta(E_1 - E_2 - E_3)$
6. ein Faktor $(-1)^m$, wobei m die Zahl der geschlossenen Elektronenschleifen angibt
7. ein Symmetrie-Faktor $(-1)^P$, wobei P die Parität der Permutationen der Koordinaten der auslaufenden Elektronen bezüglich der einlaufenden Elektronen ist

Dabei ist $S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ wieder der gebundene Elektronenpropagator und $D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ der Photonpropagator (s. Kap. Furry-Bild der QED). Die direkte Anwendung der hier vorgestellten Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion, insbesondere auch im Fall der Lamb-Verschiebung der Zwei-Photonen-Selbstenergie, bringt große Vereinfachungen gegenüber der Gell-Mann-Low-Sucher-Formel mit sich. Sie stellt somit einen wesentlichen Fortschritt bei der Herleitung der mathematischen Ausdrücke für die Energieverschiebungen dar. Dieser sehr moderne und elegante Zugang sollte bei der Herleitung der Energieverschiebungen zumindest in den reduzierbaren Diagrammen und in Mehrelektronen-Systemen immer angewendet werden.

2.3 Potentialentwicklung, Regularisierung und Ward-Identität

Im Abschnitt 2.1.3 wurde der gebundene Elektronenpropagator in Gl. (2.32) definiert, welcher in der Feynman'schen Diagrammtechnik durch eine doppelte Linie dargestellt wird. Die später zu behandelnde Renormierungstheorie der QED ist jedoch zunächst nur für die QED ohne äußere Quellströme, d.h. nur für die freie QED, definiert. Somit ist es notwendig, einen Zusammenhang zwischen dem gebundenen Elektronenpropagator und dem Elektronenpropagator der freien Theorie herzustellen. Dieser Zusammenhang ist durch die sogenannte Potentialentwicklung gegeben. Dabei benutzt man die folgende Darstellung des gebundenen Elektronenpropagators durch die Resolvente des Hamiltonoperators \hat{H}_0^{Dirac} (2.4):

$$S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left\langle \mathbf{r}_1 \left| \frac{1}{E - \hat{H}(1 - i\epsilon)} \right| \mathbf{r}_2 \right\rangle. \quad (2.109)$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise wurde dabei der Hamiltonian \hat{H}_0^{Dirac} als \hat{H} abgekürzt. Diese etwas ungewöhnliche Darstellung des Elektronenpropagators soll kurz bewiesen werden:

Die Lösungen des Hamilton-Operators \hat{H} sind in der Dirac'schen Schreibweise die abstrakten bra-Vektoren $|\Psi_n\rangle$, d.h. es gilt

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle. \quad (2.110)$$

Die Projektion der bra-Vektoren auf die Basis $|\mathbf{r}\rangle$ ergibt die Wellenfunktion im Ortsraum [48],

$$\varphi_n(\mathbf{r}_1) = \langle \mathbf{r}_1 | \Psi_n \rangle, \quad (2.111)$$

wobei mit n wieder der vollständige Satz Quantenzahlen gemeint ist. Aus dieser Gleichung folgt mit der Vollständigkeitsrelation $\sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| = \mathbf{1}$ unmittelbar

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1 | &= \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}_1) \langle \Psi_n |, \\ |\mathbf{r}_2\rangle &= \sum_{n'} \varphi_{n'}^\dagger(\mathbf{r}_2) |\Psi_{n'}\rangle. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Einsetzen dieser beiden Beziehungen in (2.109) liefert

$$\begin{aligned} S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{n,n'} \varphi_n(\mathbf{r}_1) \left\langle \Psi_n \left| \frac{1}{E - \hat{H}(1 - i\epsilon)} \varphi_{n'}(\mathbf{r}_2) \right| \Psi_{n'} \right\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \frac{\varphi_n(\mathbf{r}_1) \varphi_{n'}^\dagger(\mathbf{r}_2)}{E - E_{n'}(1 - i\epsilon)} \underbrace{\langle \Psi_n | \Psi_{n'} \rangle}_{\delta_{n,n'}} \\ &= \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{r}_1) \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_2)}{E - E_n(1 - i\epsilon)}, \end{aligned} \quad (2.113)$$

wobei in der 2. Zeile die Beziehung (2.110) verwendet wurde. Jetzt kann die Potentialentwicklung definiert werden. Dabei benutzt man die Operatoridentität

$$\begin{aligned} \frac{1}{E - \hat{H}(1 - i\epsilon)} &= \frac{1}{E - \hat{H}_0(1 - i\epsilon)} \\ &+ \frac{1}{E - \hat{H}_0(1 - i\epsilon)} \gamma_0 V \frac{1}{E - \hat{H}_0(1 - i\epsilon)} \\ &+ \frac{1}{E - \hat{H}_0(1 - i\epsilon)} \gamma_0 V \frac{1}{E - \hat{H}(1 - i\epsilon)} \gamma_0 V \frac{1}{E - \hat{H}_0(1 - i\epsilon)}, \end{aligned} \quad (2.114)$$

welche durch Multiplikation mit dem Nenner $E - \hat{H}_0(1 - i\epsilon)$ auf beiden Seiten der Gleichung bewiesen werden kann und setzt diese in (2.109) ein. Die Potentialentwicklung (2.114) läßt sich auch graphisch veranschaulichen, s. Abbildung 2.6. Solch eine Potentialentwicklung kann

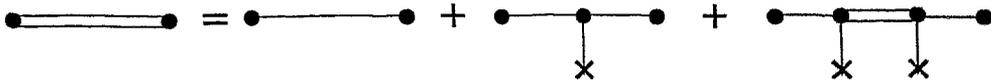


Abbildung 2.6: Die Potentialentwicklung des gebundenen Elektronenpropagators.

solange durchgeführt werden, bis die Diagramme bzw. Unterdiagramme, welche gebundene Elektronenpropagatoren enthalten, konvergent sind. Die divergenten Diagramme bzw. ihre divergenten Unterdiagramme enthalten nach der Potentialentwicklung nur freie Elektronenpropagatoren und können mit der Renormierungstheorie der freien QED renormiert werden. Die grundlegenden divergenten Diagramme der freien QED sind in Abbildung 2.7 dargestellt. Im Impulsraum lauten die mathematischen Ausdrücke dieser Diagramme:

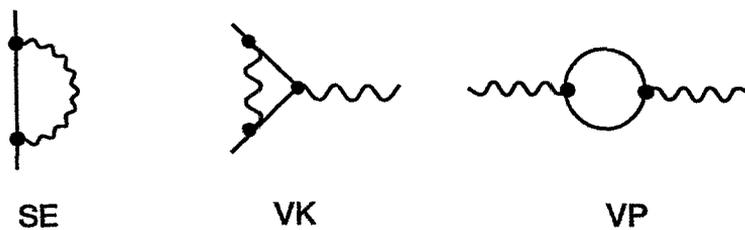


Abbildung 2.7: Die Ein-Schleifen-Selbstenergie SE, die Ein-Schleifen-Vertexkorrektur VK und die Ein-Schleifen-Vakuumpolarisation VP als die typischen divergenten Ein-Schleifen-Diagramme der freien QED.

$$\hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p}) = -ie^2 \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^2} \gamma_\beta \frac{1}{\not{p} - \not{q} - m + i\epsilon} \gamma^\beta \frac{1}{q^2 + i\epsilon}, \quad (2.115)$$

$$\hat{\Gamma}_\mu^{(1)}(p_1, p_2) = ie \hat{\Lambda}_\mu^{(1)}(p_1, p_2) \quad (2.116)$$

mit

$$\hat{\Lambda}_\mu^{(1)}(p_1, p_2) = -ie^2 \int \frac{d^4q}{(2\pi)^2} \gamma^\beta \frac{1}{\not{p}_1 - \not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\mu \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q} - m + i\epsilon} \gamma^\beta \frac{1}{q^2 + i\epsilon}, \quad (2.117)$$

$$\hat{\Pi}_{\mu\nu}^{(1)}(k) = -e^2 \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left[\gamma_\mu \frac{1}{\not{k} - \not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right]. \quad (2.118)$$

Eine explizite Lösung der Ein-Schleifen-Selbstenergie und der Ein-Schleifen-Vertexkorrektur kann z.B. in [49] gefunden werden, und für die Ein-Schleifen-Vakuum polarisation sei auf [170] verwiesen.

An dieser Stelle sei auf die sehr wichtige Identität von *Ward* hingewiesen. Die unrenormierte Selbstenergie $\hat{\Sigma}$ und die unrenormierte Vertexkorrektur $\hat{\Lambda}$ sind nämlich nicht unabhängig voneinander, sondern genügen der sogenannten *Ward-Identität* [50]:

$$\frac{\partial \hat{\Sigma}(p)}{\partial p^\mu} = -\hat{\Lambda}_\mu(p_1 = p_2 \equiv p). \quad (2.119)$$

Diese Identität ist in jeder Ordnung Störungstheorie erfüllt. Es ist interessant, daß *Ward* in [51] diese Identität zuerst in der Photon-Photon-Streuung bemerkte. Für den obigen Ein-Schleifen-Fall kann sie leicht nachgerechnet werden. Die *Ward-Identität* ist in den ersten beiden Ordnungen der Störungstheorie in Abbildung 2.8 dargestellt. Im Abschnitt 3.3 *Renormierung der Zwei-Photonen-Selbstenergie* wird sie eine wichtige Rolle einnehmen. Auf

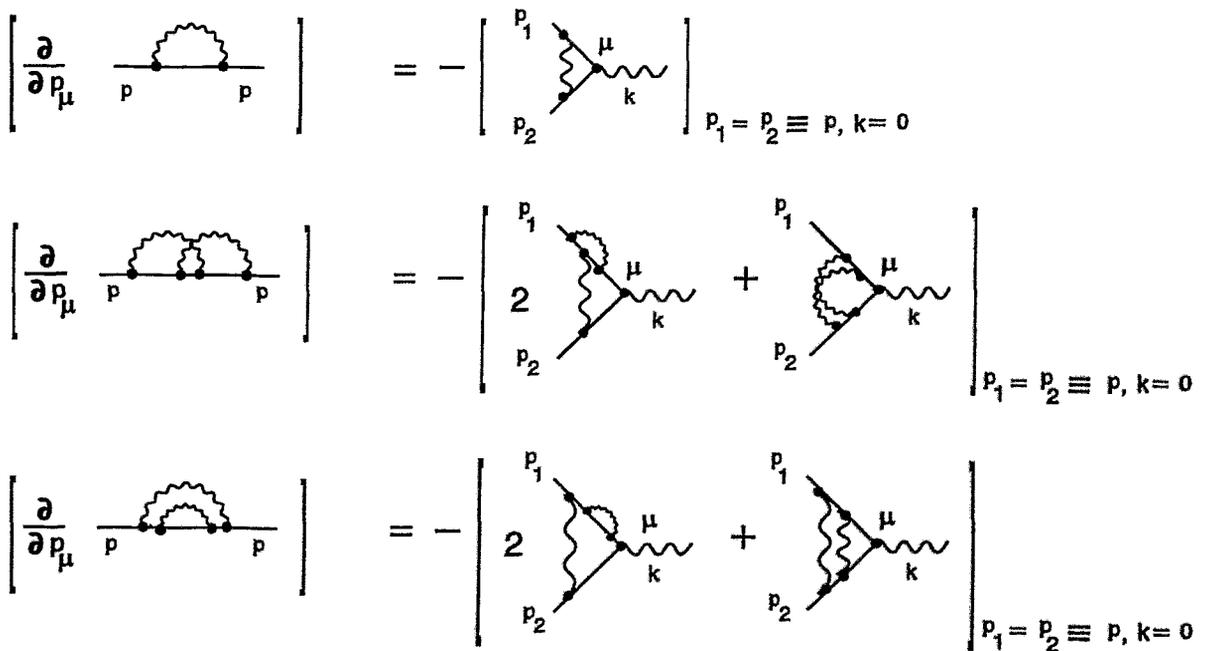


Abbildung 2.8: Die unrenormierte Ward-Identität (2.119) der Ordnung α und α^2 .

die allgemeinere *Ward-Takahashi-Identität* sei auf die Literatur verwiesen [52, 68], denn

auf diese Identität wird in dieser Arbeit nicht zurückgegriffen. Für einen guten historischen Überblick dieser auch für die Renormierungstheorie wichtigen Identitäten sei auf [53] verwiesen.

Eine analoge Beziehung gilt auch zwischen der renormierten Selbstenergie und der renormierten Vertexkorrektur. Sie lautet:

$$\frac{\partial \hat{\Sigma}^{\text{ren}}(p)}{\partial p^\mu} = -\hat{\Lambda}_\mu^{\text{ren}}(p_1 = p_2 \equiv p). \quad (2.120)$$

Auch diese Identität gilt in beliebiger Ordnung Störungstheorie.

Kommen wir zurück zu den Integralen in (2.118). Durch einfaches Abzählen der Potenzen der Impulse ist klar, daß diese Integrale für große Schleifen-Impulse divergieren. Da diese Diagramme divergent sind, sind sie zunächst mathematisch nicht definiert. Durch einen cut-off müssen sie endlich gehalten, d.h. regularisiert werden. Ein direkter Impuls-cut-off als obere Integrationsgrenze wäre aber weder eichinvariant noch lorentzinvariant. Ein eich- und lorentzinvariantes Verfahren zur Regularisierung solcher Diagramme stellt die Methode von *Pauli* und *Villars* (1949) [54] dar. In dieser Methode, welche eine wesentliche Weiterentwicklung der Arbeit von *Rayski* [56] darstellt, werden massive fermionische und bosonische Hilfsfelder eingeführt. Es soll jedoch nicht unerwähnt bleiben, daß diese Methode nur in abelschen Theorien praktikabel ist, denn in nichtabelschen Theorien ist die Pauli-Villars-Regularisierung nicht eichinvariant. Hier muss die dimensionale Regularisierung von *'t Hooft* und *Veltman* [55] benutzt werden [68].

Die Grundidee von *Pauli* und *Villars* besteht darin, vom Integranden eine Funktion mit gleichem asymptotischen Verhalten zu subtrahieren. Dadurch wird das Verhalten des gesamten Integranden in Limes großer Impulse verbessert. Mit der Regularisierung der Diagramme SE und VK auf der einen Seite und VP auf der anderen Seite sind zwei etwas verschiedene Varianten der Pauli-Villars-Regularisierung verbunden. In dem Diagramm der Selbstenergie SE und der Vertexkorrektur VK erfolgt die Regularisierung der Integrale durch die Einführung eines massiven bosonischen Hilfsfeldes der Masse Λ , d.h. durch eine Ersetzung des Photonpropagator in der folgenden Weise:

$$\frac{1}{q^2 + i\epsilon} \rightarrow \frac{1}{q^2 + i\epsilon} - \frac{1}{q^2 - \Lambda^2 + i\epsilon}. \quad (2.121)$$

Es ist klar, daß für große Schleifen-Impulse die obigen Integrale SE und VK dann endlich sind.

Im Diagramm der Vakuumpolarisation VP gibt es in der Schleife keinen Photonpropagator. Deshalb muss hier eine Ersetzung der freien Elektronenpropagatoren vorgenommen werden. Dies geschieht durch Einführung massiver fermionischer Hilfsfelder der Masse M_s :

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[\gamma_\mu \frac{1}{\not{k} - \not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right] \rightarrow \\ & \text{Tr} \left[\gamma_\mu \frac{1}{\not{k} - \not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right] \\ & + \sum_{s=1}^S C_s \text{Tr} \left[\gamma_\mu \frac{1}{\not{k} - \not{q} - M_s + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{q} - M_s + i\epsilon} \right]. \end{aligned} \quad (2.122)$$

Die Konstanten C_s und die Massen M_s werden so gewählt, das die divergenten Anteile des betrachteten Diagramms vollständig absorbiert werden. Eine notwendige und hinreichende Bedingung dafür ist gegeben durch

$$\sum_{s=1}^S C_s^2 M_s^2 = 0 \quad ; \quad \sum_{s=1}^S C_s^2 = 0 . \quad (2.123)$$

Im Fall der Ein-Schleifen-Vakuumpolarisation VP genügt es z.B., nur zwei schwere Elektronenmassen, M_1 und M_2 , einzuführen. Nach Abschluss aller Rechnungen, insbesondere also auch der Renormierung, wird der Limes $\Lambda \rightarrow \infty, M_s \rightarrow \infty$ vollzogen. Diese Vorgehensweise ist natürlich nur dann sinnvoll, wenn die physikalischen Größen nicht von Λ und M_s abhängen. Dies wird eingehender im Abschnitt *Renormierung* diskutiert. Für eine genauere Betrachtung der Problematik *Regularisierung der freien QED* sei auf [57, 68] verwiesen.

2.4 Renormierungstheorie der QED

2.4.1 Einleitung

Im vorhergehenden Abschnitt wurde erläutert, daß die S-Matrixelemente der freien QED und damit auch der QED mit äußeren Quellströmen divergent sind. Durch eine eichinvariante Regularisierung konnten sie zunächst endlich gehalten werden. Dabei treten typische Terme der Form $\ln(\Lambda^2/m^2)$ auf. Im Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ treten die Divergenzen wieder hervor. Deshalb ist es notwendig, ein eindeutiges mathematisches Schema zu entwickeln, nach dem diese divergierenden Terme in den S-Matrixelementen eliminiert werden können, um so die physikalisch relevanten Anteile in den berechneten S-Matrixelementen zu erhalten. Dies ist Aufgabe der Renormierungstheorie. In der Renormierungsprozedur werden dabei unendlich große, aber endlich viele Gegenterme in einem wohldefinierten und eindeutigen mathematischen Schema in die Lagrangedichte der betrachteten Theorie eingefügt. Dieses komplexe Teilgebiet der Quantenfeldtheorie bildete sich in einem sehr langwierigen und mühseligen Erkenntnisprozeß heraus und ist selbst heute Gegenstand intensiver physikalischer Forschung. Einen exzellenten historischen Überblick findet man z.B. in [58]. Hier seien dabei nur folgende Punkte erwähnt:

Bereits in der klassischen Elektrodynamik von *Maxwell* begegnet man Divergenzen. Betrachtet man ein Elektron ohne sein eigenes elektromagnetisches Feld, so spricht man von einer rein mechanischen Masse m_0 des Elektrons. Nach *Lorentz* [59] setzt sich entsprechend dieser Überlegung die experimentelle Masse m des Elektrons aus der mechanischen Masse m_0 plus der trägen Masse δm des elektromagnetischen Eigenfeldes des Elektrons zusammen, d.h. $m = m_0 + \delta m$. Jedoch die Energie dieses Eigenfeldes (klassische Selbstenergie) des punktförmigen Elektrons, welcher einer rein elektromagnetischen Masse des Elektrons entsprechen würde, divergiert in der Maxwell-Theorie. Das Ergebnis in 4-dimensionalen sphärischen Koordinaten $x = (r, \theta, \varphi, ct)$ lautet nämlich

$$\delta mc^2 = \int_{x^4=\text{const.}} d^3x T^{44} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int_0^\infty dr \frac{1}{r^2}, \quad (2.124)$$

wobei die Zeit-Zeit-Komponente des Energie-Impulstensors einer Punktladung gegeben ist durch

$$T^{44} = -\frac{e^2}{32\pi^2} \frac{1}{r^4} g^{44} \quad \text{mit} \quad g^{44} = -1, \quad (2.125)$$

und $g^{\mu\nu}$ ist der metrische Tensor des Minkowski-Raumes. Die Frage nach der Natur oder Endlichkeit einer rein mechanischen Masse des Elektrons hat in der Maxwell-Theorie keinen Sinn, denn es existiert kein entsprechender mathematischer Ausdruck in der Theorie. Da aber auch der Ausdruck (2.124) bei kleinen Raum-Zeitabständen divergiert, ist auch der Begriff einer rein elektromagnetischen Masse des Elektrons nicht sinnvoll. Es sei jedoch bemerkt, daß ein passend gewähltes Abschneiden des Integrals (2.124) bei einer kleinen radialen Koordinate $r = r_0$ den sogenannten klassischen Elektronenradius $r_0 = 2.8 \cdot 10^{-13}$ cm ergibt, wenn man die Maxwell-Selbstenergie δmc^2 in (2.124) gleich der experimentellen Ruheenergie des Elektrons setzt. Ebenso sei an dieser Stelle festgehalten, daß kleine Raum-Zeitabstände, entsprechend einer Fouriertransformation in den Impulsraum, großen Impulsen entsprechen. Deshalb bezeichnet man die auftretenden Divergenzen als ultraviolette (UV) Divergenzen. In diesem Sinn kann man r_0 auch als klassischen UV-cut-off bezeichnen. Es wird, obwohl es

sich bei (2.124) um eine nichtstörungstheoretische Berechnung handelt, oft argumentiert, daß in dieser Unendlichkeit der klassischen Maxwell-Theorie eine Ursache der UV-Divergenzen zu suchen sei, welche in der Störungstheorie der quantisierten Elektrodynamik auftreten. Allerdings sollte man dabei nicht die Aussagen der Störungstheorie der QED, sondern vielmehr eine nichtstörungstheoretische Berechnung der Selbstenergie des Elektrons in der QED mit dem klassischen Resultat vergleichen. Jedoch gerade dieser Punkt ist nicht genügend erforscht. Es ist unklar, ob die QED in ihrer exakten, d.h. nichtstörungstheoretischen Lösung des Problems der rein elektromagnetischen Masse des Elektrons endlich ist oder divergiert. Es sei in diesem Zusammenhang auf die grundlegenden Artikel in der Literatur verwiesen [60]. Dennoch gibt es einen wesentlichen Zusammenhang zwischen den UV-Divergenzen der klassischen Theorie und den UV-Divergenzen in der Störungstheorie der QED. Sowohl in der klassischen Elektrodynamik als auch in der QED ist die rein elektromagnetische Masse δm ebenso wie die rein mechanische Masse m_0 des Elektrons eine physikalisch nicht messbare Größe. Einzig die experimentelle Masse m des Elektrons hat physikalische Bedeutung. Ebenso verhält es sich mit der nicht beobachtbaren, sogenannten nackten Ladung e_0 des Elektrons. Die nackte Ladung e_0 entspricht einer Ladung, welche das Elektron hätte, wenn das elektromagnetische Feld des Elektrons abgeschaltet würde. Die grundlegende Feststellung der Nichtbeobachtbarkeit dieser unendlichen Größen erlaubt es, eine unendliche Skalentransformation der Masse m_0 und der Ladung e_0 vorzunehmen und so die QED zu renormieren. Im Ergebniss dieser Prozedur erhält man endliche, physikalisch beobachtbare Größen e und m . Die Renormierungstheorie der QED wurde von *Feynman* [61], *Schwinger* [62], *Tomonaga* [63] und *Dyson* [64] ausgearbeitet und in sehr erfolgreicher Weise auf die Strahlungskorrekturen der QED angewandt. Insbesondere in den Arbeiten von *Dyson* [64, 65] findet sich erstmalig eine vollständige Zusammenfassung der Renormierungsproblematik der QED. Eine modernere Darstellung der Renormierungstheorie speziell der QED, einschließlich der Problematik der Renormierungsgruppengleichung der QED, findet man z.B. in [66, 67], wovon insbesondere das Buch von *Schwinger* hervorzuheben ist. Eine weitere sehr gute Darstellung der Renormierungstheorie für Quantenfeldtheorien findet man in [68, 69].

Ganz allgemein ist festzustellen, daß die Ultraviolett-Divergenzen der QFT eine Konsequenz des verwendeten Konzepts lokaler Wechselwirkungen punktförmiger Teilchen sind [47]. Es wird aber allgemein angenommen, daß die den Theorien zugrunde liegende Minkowski-Raum-Zeit im Bereich der Planck-Länge $l_{\text{Pl}} \approx 10^{-32}$ cm ihre Gültigkeit verliert und Einflüsse der Quantengravitation wesentlich werden. Die Divergenzen könnten dann irrelevant werden. In diesem Zusammenhang ist es auch bemerkenswert, daß eine Berücksichtigung der klassischen Gravitationstheorie von *Einstein* in der klassischen Maxwell-Theorie bereits eine endliche Selbstenergie des Elektrons ergibt. Das elektrische Eigenfeld krümmt den Minkowski-Raum zu einer Reissner-Nordström-Raum-Zeit. Das Ergebnis einer solchen Überlegung lautet in 4-dimensionalen sphärischen Koordinaten $x = (r, \theta, \varphi, ct)$

$$\begin{aligned} \delta mc^2 &= \int_{x^4=\text{const.}} d^3x T^{i4} \zeta_i \sqrt{-g} \\ &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int_0^\infty dr \frac{1}{r^2} \left[1 - \frac{2m_0}{r} + \frac{\kappa e^2}{32\pi^2\epsilon_0 r^2} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (2.126)$$

wobei der einzige zeitartige Killingvektor der Reissner-Nordström-Raum-Zeit gegeben ist durch $\zeta_i = (0, 0, 0, 1)$. Die Zeit-Zeit-Komponente des Energie-Impulstensors einer Punktladung

dung berechnet sich wieder zu

$$T^{44} = -\frac{e^2}{32\pi^2} \frac{1}{r^4} g^{44} \quad \text{mit} \quad g^{44} = -\left[1 - \frac{2m_0}{r} + \frac{\kappa e^2}{32\pi^2 \epsilon_0 r^2}\right]^{-1}, \quad (2.127)$$

und $g^{\mu\nu}$ ist der metrische Tensor der Reissner–Nordström–Raum–Zeit. Das Integral (2.126) divergiert offensichtlich keineswegs, sondern liefert eine endliche Selbstenergie des klassischen Elektrons. Deshalb ist in diesem Zugang auch die rein mechanische Masse m_0 eine endliche Größe.

Einen etwas anderen Aspekt der Renormierungsproblematik stellt die unendliche Ladung Q und Energie E (Masse) des Vakuums der QED dar. Ebenso wie im Fall der Selbstenergie und der nackten Ladung des Elektrons sind diese Größen physikalisch nicht beobachtbar. Deshalb kann hier ähnlich verfahren werden. Es sei jedoch erwähnt, daß der Begriff der Vakuumenergie im allgemeinen Fall ein sehr komplizierter Begriff ist, insbesondere hängt der Wert der Vakuumenergie auch von externen Bedingungen (z.B. in Kavitäten) ab. Hier soll jedoch nur der Fall des unendlichen Minkowskiraumes betrachtet werden. Von der unendlichen Ladung und Energie des Vakuums des Dirac- und des Photonfeldes wird eine unendliche Ladung und Energie subtrahiert. Das Resultat solch einer Umskalierung (Renormierung) ist, daß das Vakuum die physikalisch sinnvollen Werte $E = 0$ und $Q = 0$ erhält [48, 66]. Mathematisch findet diese Art der Renormierung seine Umsetzung in der sogenannten Normalordnung. Bindet man den Normalordnungsoperator bereits zu Beginn in die Lagrangedichte der Theorie ein, dann ergeben sich keine unendlichen Werte des Vakuumzustandes. Deshalb soll hier dieser Teil der Renormierungstheorie nicht weiter verfolgt werden.

Im Folgenden wird die Renormierung der freien QED dargestellt. Die Renormierung der QED mit äußeren Quellströmen kann auf den Fall der Renormierung der freien QED zurückgeführt werden. Dieser Aspekt wurde schon im Abschnitt 2.3 erwähnt und soll in späteren Abschnitten ausführlicher besprochen werden.

2.4.2 Multiplikative Renormierung

Die QED beschreibt die Wechselwirkung zwischen dem quantisierten Diracfeld und dem quantisierten Photonfeld. Das bedeutet, daß bereits alle möglichen Wechselwirkungen, einschließlich der Selbstwechselwirkung dieser Felder, in der Theorie inbegriffen sind und durch sie beschrieben wird. Somit ist klar, daß die in der Theorie auftretenden Parameter und Felder die reinen, d.h. unrenormierten Parameter und Felder sind. Diese sollen durch einen Index 0 gekennzeichnet werden. Betrachten wir also die Lagrangedichte der freien QED, d.h. die Lagrangedichte (2.1) ohne äußere Quellströme als eine Lagrangedichte unrenormierter Größen:

$$\mathcal{L} = \hat{N} \left[\hat{\Psi}_0(x) (i\gamma^\mu \partial_\mu - e_0 \gamma^\mu \hat{A}_{\mu 0}(x) - m_0) \hat{\Psi}_0(x) - \frac{1}{4} \hat{F}_{\mu\nu 0}(x) \hat{F}_0^{\mu\nu}(x) - \frac{1}{2} \zeta_0 (\partial^\mu \hat{A}_{\mu 0}(x))^2 \right]. \quad (2.128)$$

Entsprechend der grundlegenden Beobachtung, daß die divergenten Anteile der Feynmandiagramme der S-Matrix zu physikalisch, d.h. experimentell nicht beobachtbaren Größen

gehören, spaltet man die experimentell beobachtbare Masse m des Elektrons in einen reinen Massenanteil ohne elektromagnetisches Eigenfeld des Elektrons m_0 und einen reinen Strahlungsanteil δm auf.

$$m = m_0 + \delta m . \quad (2.129)$$

Der Massenanteil m_0 entspricht also einer fiktiven, rein mechanischen Masse, welche das Elektron besitzen würde, wenn es sein elektromagnetisches Eigenfeld nicht hätte. Der reine Strahlungsanteil entspricht dann genau der trägen Masse des Strahlungsfeldes des Elektrons. Entsprechend kann man mit derselben Überlegung die experimentell beobachtbare Ladung e des Elektrons aufspalten in eine reine Ladung e_0 , welche das Elektron ohne elektromagnetisches Eigenfeld hätte, und einen reinen Strahlungsanteil δe :

$$e = e_0 + \delta e . \quad (2.130)$$

Die reine Ladung e_0 würde das Elektron in Wechselwirkungen zeigen, wenn es nicht von seinem elektromagnetischen Eigenfeld umgeben wäre. Die Ladung δe ist entsprechend dieser Überlegung dann genau die Differenz zwischen e_0 und der experimentell beobachteten elektrischen Ladung e .

Die oben definierten Zusammenhänge zwischen den unrenormierten und experimentell messbaren, d.h. renormierten Größen, lassen sich auch folgendermaßen umschreiben:

$$m_0 = m - \delta m = \left(1 - \frac{\delta m}{m}\right) m \equiv Z_m m , \quad (2.131)$$

$$e_0 = e - \delta e = \left(1 - \frac{\delta e}{e}\right) e \equiv Z_e e . \quad (2.132)$$

Die Erwartungswerte der Diracfelder $\hat{\Psi}$ stehen in engem Zusammenhang mit physikalisch messbaren Größen, und die Erwartungswerte der Photonenfelder \hat{A}_μ sind physikalisch messbare Größen. In Hinblick auf die genaue Definition ihrer Messbarkeit sei auf *Bohr, Rosenfeld* [70] verwiesen. Somit muss ein ebensolcher multiplikativer Zusammenhang zwischen den in der Lagrangedichte auftretenden unrenormierten Feldern $\hat{\Psi}_0, \hat{A}_{\mu 0}$ und den physikalischen Feldern $\hat{\Psi}, \hat{A}_\mu$ existieren. Er lautet für das Diracfeld

$$\hat{\Psi}_0 = \sqrt{Z_2} \hat{\Psi} , \quad (2.133)$$

und für das Photonenfeld

$$\hat{A}_{\mu 0} = \sqrt{Z_3} \hat{A}_\mu . \quad (2.134)$$

Die Wurzelardarstellung wurde dabei aus Zweckmäßigkeitgründen gewählt, denn in der Definition der Elektronen- und Photonenpropagatoren treten die Felder immer paarweise auf. In der QED bleibt der eichfixierende Term in der Lagrangedichte $\frac{1}{2} \zeta_0 (\partial^\mu \hat{A}_{\mu 0})^2$ von der Renormierung unbeeinflusst. Diese spezielle Eigenschaft der QED [68] folgt aus der Ward-Identität und kann berücksichtigt werden durch eine formale Renormierung des Eichparameters ζ_0 , obwohl er natürlich keine physikalisch messbare Größe darstellt:

$$\zeta_0 = \frac{1}{Z_3} \zeta . \quad (2.135)$$

Der Begriff *multiplikative Renormierung* findet seine Entlehnung in dem in Gleichungen (2.131) bis (2.135) formulierten multiplikativen Zusammenhang zwischen unrenormierten und renormierten Größen. Die darin auftretenden (unendlichen) Konstanten Z_i werden als Renormierungskonstanten bezeichnet.

Es soll jedoch darauf verwiesen werden, daß in der Renormierungstheorie der QED oft eine etwas abweichende Notation der Renormierungskonstanten Z_e Verwendung findet, indem eine Renormierungskonstante Z_1 eingeführt und zweckmäßigerweise der Zusammenhang mit Z_e durch

$$Z_e = \frac{Z_1}{Z_2 \sqrt{Z_3}} \quad (2.136)$$

definiert wird. Durch die Ward-Identität folgt in beliebiger Ordnung Störungstheorie $Z_1 = Z_2$, so daß in der QED tatsächlich nur drei voneinander unabhängige Renormierungskonstanten (Z_m, Z_2, Z_3) existieren. Im Folgenden wird aber anstelle von Z_m immer δm benutzt, d.h. es wird immer der Satz ($\delta m, Z_2, Z_3$) Verwendung finden. Mit den obigen unendlichen Skalentransformationen (2.131) bis (2.135) kann die Lagrangedichte (2.128) umgeschrieben werden, so daß nun in der Lagrangedichte der QED nur renormierte Größen, d.h. physikalische Felder und physikalische Parameter, auftreten:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \mathcal{L}_{\text{QED}} + \mathcal{L}_{\text{Counter}} , \\ \mathcal{L}_{\text{QED}} &= \hat{N} \left[\hat{\Psi}(x) (i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^\mu \hat{A}_\mu(x) - m) \hat{\Psi}(x) - \frac{1}{4} \hat{F}_{\mu\nu}(x) \hat{F}^{\mu\nu}(x) - \frac{1}{2} \zeta (\partial^\mu \hat{A}_\mu(x))^2 \right] , \\ \mathcal{L}_{\text{Counter}} &= (Z_2 - 1) \left(\hat{N} \left[\hat{\Psi}(x) (i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^\mu \hat{A}_\mu(x) - m) \hat{\Psi}(x) \right] \right) \\ &\quad + Z_2 \delta m \hat{N} \left[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \right] - \frac{1}{4} (Z_3 - 1) \hat{N} \left[\hat{F}_{\mu\nu}(x) \hat{F}^{\mu\nu}(x) \right] . \end{aligned} \quad (2.137)$$

Die Lagrangedichte \mathcal{L}_{QED} stellt die bekannte Lagrangedichte der QED dar, allerdings mit den renormierten physikalischen Feldern und Parametern. Der Normalordnungs-Operator \hat{N} ist wieder im Sinne der S-Matrix-Entwicklung zu verstehen. Entsprechend der Renormierungsphilosophie stellen die Terme der Lagrangedichte $\mathcal{L}_{\text{Counter}}$ die sogenannten Counterterme (Gegenterme) der Lagrangedichte \mathcal{L}_{QED} dar und werden als zusätzliche Wechselwirkungen interpretiert. Ihre Aufgabe ist es, die unendlichen Anteile in den S-Matrixelementen von \mathcal{L}_{QED} so zu absorbieren, daß die endlichen, physikalisch messbaren Anteile in den S-Matrixelementen in Erscheinung treten.

In vollkommener Analogie zu Kapitel 2.2.2 lassen sich ebenso Feynman-Regeln aus $\mathcal{L}_{\text{Counter}}$ ableiten und diesen Feynmanregeln lassen sich auch Feynman-Diagramme für diese Gegenterme zuordnen. Die Feynman-Regeln werden gleich im Impulsraum angegeben (s. Abbildungen 2.9, 2.10, 2.11). Die Renormierungskonstanten setzen sich aus einem endlichen und einem unendlichen Anteil zusammen, welcher durch die Regularisierung endlich gehalten wird. Der unendliche Anteil ist eindeutig festgelegt. Jedoch aus der Renormierungsgruppengleichung der QED [67] folgt eine Beliebigkeit in der Festlegung der Renormierungsbedingungen. Die Unabhängigkeit des physikalischen Gehalts der renormierten Größen von der Wahl der Renormierungspunkte μ_1, μ_2 ist die zentrale Aussage der Renormierungsgruppengleichung der



Abbildung 2.9: Die Feynmanregel dieses Gegenterms lautet: $Z_2\delta m + (Z_2 - 1)(\not{p} - m)$.

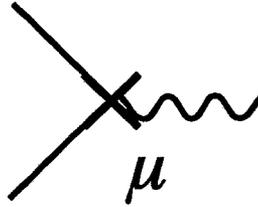


Abbildung 2.10: Die Feynmanregel dieses Gegenterms lautet: $-i(Z_2 - 1)e\gamma_\mu$.



Abbildung 2.11: Die Feynmanregel dieses Gegenterms lautet: $(Z_3 - 1)(g_{\mu\nu}k^2 - k_\mu k_\nu)$.

QED. Man spricht in diesem Zusammenhang von sogenannten Renormierungsschemata. Allgemein lauten die Renormierungsbedingungen in Störungstheorie der Ordnung $n = 1, 2, 3, \dots$:

$$\hat{\Sigma}^{\text{ren}(n)}(p) \Big|_{\not{p}=\mu_1} = 0, \tag{2.138}$$

$$\hat{\Gamma}_\mu^{\text{ren}(n)}(p_1, p_2) \Big|_{\not{p}_1=\not{p}_2=\mu_1} = 0, \tag{2.139}$$

$$\hat{\Pi}_{\mu\nu}^{\text{ren}(n)}(k) \Big|_{k^2=\mu_2^2} = 0, \tag{2.140}$$

$$\hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\rho}^{\text{ren}(n)}(k_1, k_2, k_3) \Big|_{k_1^2=k_2^2=k_3^2=\mu_2^2} = 0. \tag{2.141}$$

Diese Nichteindeutigkeit der Renormierungsbedingungen überträgt sich auf den endlichen Anteil der Renormierungskonstanten. Erst mit der Wahl eines bestimmten Renormierungsschemas sind die endlichen Anteile eindeutig festgelegt. In der vorliegenden Arbeit wird das on-shell-Renormierungsschema benutzt. Im on-shell-Renormierungsschema werden die Renormierungspunkte μ_1 und μ_2 auf die Massenschale der Quantenfelder $\hat{\Psi}$ und \hat{A}_μ gesetzt, also

$$\begin{aligned} \mu_1 &= m \\ \mu_2 &= 0. \end{aligned} \tag{2.142}$$

Man spricht von der sogenannten intermediären Renormierung, wenn alle Renormierungspunkte 0 gesetzt werden, d.h. $\mu_1 = 0, \mu_2 = 0$.

Mit der Festlegung des Renormierungsschemas können die Renormierungskonstanten explizit aufgeschrieben werden. Man muss jedoch noch beachten, daß die explizite Form der Renormierungskonstanten der QED neben dem verwendeten Renormierungsschema natürlich auch von der verwendeten Regularisierung als auch von der verwendeten Eichung ζ abhängt. Die Renormierungskonstanten seien jetzt für das on-shell-Renormierungsschema, der Pauli-Villars-Regularisierung und der Feynmaneichung ($\zeta = 1$) in Ein-Schleifen-Näherung aufgeführt [68]:

$$Z_2^{(1)} = 1 - \frac{e^2}{16\pi^2} \left(\ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + 2 \ln \left(\frac{\mu^2}{m^2} \right) + \frac{9}{2} \right), \quad (2.143)$$

$$Z_3^{(1)} = 1 - \frac{e^2}{12\pi^2} \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right), \quad (2.144)$$

$$\delta m^{(1)} = \frac{3e^2}{16\pi^2} m \left(\ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + \frac{1}{2} \right). \quad (2.145)$$

Es ist interessant und wesentlich, daß in der Ein-Schleifen-Näherung

$$\delta m^{(1)} = Z_2^{(1)} \delta m^{(1)} + \mathcal{O}(e^4) \quad (2.146)$$

gilt, so daß in 1. Ordnung Störungstheorie prinzipiell nicht zwischen diesen beiden Gegentermen $\delta m^{(1)}$ und $Z_2^{(1)} \delta m^{(1)}$ unterschieden werden kann [68]. Setzt man also diese explizite Form der Renormierungskonstanten in die Lagrangedichte (2.137) ein, so ist die Theorie in der Ein-Schleifen-Näherung bereits endlich. Für die grundlegenden divergenten Ein-Schleifen-Diagramme der QED folgen die renormierten Ausdrücke damit zu:

$$\hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}} = \hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p}) + Z_2^{(1)} \delta m^{(1)} + (Z_2^{(1)} - 1)(\not{p} - m), \quad (2.147)$$

$$\hat{\Gamma}_\mu^{(1)\text{ren}} = \hat{\Gamma}_\mu^{(1)} - i(Z_2^{(1)} - 1)e\gamma_\mu, \quad (2.148)$$

$$\hat{\Pi}_{\mu\nu}^{(1)\text{ren}} = \hat{\Pi}_{\mu\nu}^{(1)} + (Z_3^{(1)} - 1)(g_{\mu\nu}k^2 - k_\mu k_\nu). \quad (2.149)$$

In der Sprache der Feynman'schen Diagrammtechnik sind die renormierten Ausdrücke in multiplikativer Renormierung in Abbildung 2.12 dargestellt. Dieses Verfahren der multiplikativen Renormierung ist in der QED bis zu einer beliebigen Ordnung der Störungstheorie durchführbar. Will man z.B. die Gegenterme in 2. Ordnung Störungstheorie finden, so muss man mit der S-Matrix alle Diagramme der Ordnung e^4 unter Anwendung des Wick'schen Theorems, einschließlich also auch aller Gegenterme, aufschreiben. Die Diagramme als auch die Gegenterme lassen sich jeweils zu eichinvarianten Untergruppen zusammenfassen. D.h., es ist möglich, bestimmte Diagramme der Ordnung e^4 zu einer eichinvarianten Gruppe zusammenzufassen und ihnen eine eichinvariante Gruppe entsprechender Gegenterme zuzuordnen. Die Feynman'sche Diagrammtechnik erlaubt es zwar, in rein graphischer Darstellung die entsprechenden Counterterme eines bestimmten eichinvarianten Satzes zu finden, jedoch ist es dabei sehr leicht möglich, einen Gegenterm zu übersehen. Hierin besteht gerade der entscheidende Nachteil der multiplikativen Renormierung. Es ist nämlich in der multiplikativen Renormierung nicht möglich, einem Diagramm der Ordnung e^4 oder allgemein einem Diagramm in der höheren Ordnung Störungstheorie genau seine entsprechenden Gegenterme zuzuordnen. Man kann nur einzelne Diagramme zu eichinvarianten Gruppen zusammenfassen und

$$\begin{aligned}
 \hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}} &= \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \\
 \hat{\Gamma}_{\mu}^{(1)\text{ren}} &= \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \\
 \hat{\Pi}_{\mu\nu}^{(1)\text{ren}} &= \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6}
 \end{aligned}$$

The image shows three rows of equations, each representing a renormalized quantity as the sum of a loop diagram and a counterterm diagram.
 1. The first row shows the self-energy $\hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}$ as the sum of a fermion self-energy loop (a fermion line with a fermion loop) and a counterterm (a fermion line with a cross).
 2. The second row shows the vertex correction $\hat{\Gamma}_{\mu}^{(1)\text{ren}}$ as the sum of a vertex loop (a fermion line with a photon loop at the vertex) and a counterterm (a fermion line with a cross at the vertex).
 3. The third row shows the vacuum polarization $\hat{\Pi}_{\mu\nu}^{(1)\text{ren}}$ as the sum of a photon loop (two fermion lines forming a loop between two photon lines) and a counterterm (two photon lines with a cross between them).

Abbildung 2.12: Die renormierten Ausdrücke der Selbstenergie, Vakuumpolarisation und Vertexkorrektur in Ein-Schleifen-Näherung entsprechend den Gleichungen (2.147) bis (2.149)

diesen Gruppen ihre Gegenterme zuzuordnen. Ein illustratives und explizit in diagrammatischer Weise vorgeführtes Beispiel für die Zwei-Photonen Selbstenergie der freien QED findet man z.B. im Kapitel 7.2 von [69]. Wünschenswert wäre aus diesem Grunde ein übersichtlicheres Verfahren zum Auffinden aller Gegenterme. Die im folgenden Abschnitt vorgestellte Methode der Bogoljubow'schen \mathcal{R} -Operation schafft hier einen wesentlich eleganteren Zugang zur Renormierungsproblematik. Diese Methode gestattet es, *einzelnen Diagrammen* die entsprechenden Gegenterme zuzuordnen. Darin liegt ihre Stärke.

2.4.3 BPHZ-Renormierung

Wie bereits erwähnt, stellt die von *Bogoljubov, Parasiuk* (1957) [71], *Hepp* (1966) [72] und *Zimmermann* (1970–1973) [73] entwickelte BPHZ-Renormierung eine wesentliche Weiterentwicklung der Renormierungstheorie dar. Eine zusammenfassende Darstellung dieser sehr eleganten Renormierungstechnik ist in [74] enthalten. Eine didaktische Darstellung findet man auch in [68, 69]. Leider ist diese Renormierungsmethode in diesen Büchern und auch in der physikalischen Literatur nur für den einfacheren Fall der skalaren ϕ^4 -Theorie bzw. skalaren ϕ^3 -Theorie beschrieben. In diesem Abschnitt soll diese Methode jedoch auf den Fall der QED angewendet und durch grundlegende Beispiele erläutert werden.

Es war ein langer und beschwerlicher Weg, die Äquivalenz zwischen der BPHZ-Renormierung und der multiplikativen Renormierung zu beweisen. In den oben aufgeführten Arbeiten von *Bogoljubov* und *Parasiuk* ist dieser schwierige Beweis in jeder Ordnung Störungstheorie für eine große Klasse von Diagrammen gezeigt wurden. Jedoch erst *Hepp* konnte 1966 demonstrieren, daß dies auch für Diagramme mit überlappenden Divergenzen gilt, und *Zimmermann* bewies die Gleichheit beider Renormierungen schließlich auch für zusammengesetzte Operatoren. Es soll ebenfalls erwähnt werden, daß mit Hilfe der BPHZ-Renormierung auch Theorien formal renormiert werden können, welche als nichtrenormierbar gelten, wie z.B. die quantisierte Gravitationstheorie. Der Grund liegt darin, daß durch die BPHZ-Renormierung unendlich viele Gegenterme erzeugt werden können. Die Übereinstimmung zwischen multi-

plikativer und BPHZ–Renormierung gilt deshalb selbstverständlich nur für renormierbare Theorien, d.h. Theorien mit endlich vielen Gegentermen.

In der BPHZ–Renormierung werden die Gegenterme durch Differentiation nach äußeren Impulsen erzeugt. In der Lagrangedichte stehen deshalb keine Gegenterme. Ausgangspunkt der BPHZ–Renormierung ist also die Lagrangedichte \mathcal{L}_{QED} aus (2.137). Aus dieser Lagrangedichte kann wieder mit der S–Matrixentwicklung und dem Wick’schen Theorem die Feynman’sche Diagrammtechnik entwickelt werden. Wird solch ein beliebiges Feynmandiagramm Γ betrachtet, so fließen in dieses Diagramm N äußere fermionische Impulse $p_1 \dots p_N$ und M äußere bosonische Impulse $k_1 \dots k_M$ hinein (s. Abbildung 2.13). Im Diagramm selbst wird über r Schleifen–Impulse $q_1 \dots q_r$ integriert. Der mathematische Ausdruck F_Γ des Diagramms

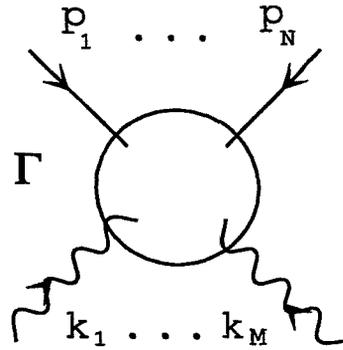


Abbildung 2.13: Ein beliebiges Feynmandiagramm Γ . Es fließen N fermionische Impulse p_i und M bosonische Impulse k_j in den Graphen. Die Vorzeichenwahl der Impulse ist aber beliebig.

Γ kann immer in der folgenden Weise aufgeschrieben werden:

$$F_\Gamma = \int d^4 q_1 \dots d^4 q_r \hat{I}_\Gamma(q_i, p_i, k_j) \quad (2.150)$$

Mit der Bogoljubov’schen \mathcal{R} –Operation wird der Integrand \hat{I}_Γ zu einem neuen Integranden \hat{R}_Γ transformiert:

$$F'_\Gamma = \int d^4 q_1 \dots d^4 q_r \hat{R}_\Gamma(q_i, p_i, k_j). \quad (2.151)$$

Der mathematische Ausdruck F'_Γ ist also der renormierte Ausdruck des Diagramms Γ . An einem Beispiel soll dies verdeutlicht werden, jedoch muss zunächst die Bogoljubov’sche \mathcal{R} –Operation, welche \hat{I}_Γ zu \hat{R}_Γ transformiert, definiert werden. Die Bogoljubov’sche \mathcal{R} –Operation ist definiert als

$$\hat{R}_\Gamma = \left\{ \begin{array}{ll} (1 - t^\Gamma) \hat{R}_\Gamma & \text{für } \omega(\Gamma) \geq 0 \\ \hat{R}_\Gamma & \text{für } \omega(\Gamma) < 0 \end{array} \right\}. \quad (2.152)$$

Die Größe $\omega(\Gamma)$ bezeichnet man als den oberflächlichen Divergenzgrad des Diagramms Γ . Ein Diagramm heißt oberflächlich divergent, wenn $\omega \geq 0$ gilt. Der Divergenzgrad ω ist ein Maß für die Stärke der Divergenz eines Graphen und ist für ein beliebiges Diagramm γ in der (4–dimensionalen) QED definiert als

$$\omega(\gamma) = 4 - E_B - \frac{3}{2} E_F, \quad (2.153)$$

wobei E_B die Zahl der äußeren bosonischen Beine und E_F die Zahl der äußeren fermionischen Beine des Graphen γ bezeichnet. Dieser oberflächliche Divergenzgrad spielt eine wesentliche Rolle im BPHZ-Renormierungsverfahren, denn das *Theorem über die absolute Konvergenz* eines beliebigen Feynman-Diagramms Γ sagt folgendes aus:

Ein Feynman-Diagramm Γ ist genau dann absolut konvergent, wenn für alle seine Untergraphen γ_i , einschließlich Γ selbst, der oberflächliche Divergenzgrad negativ ist, d.h. $\omega(\gamma_i) < 0$ und $\omega(\Gamma) < 0$ gilt.

Der Beweis dieses sehr wichtigen Theorems wurde von *Weinberg* (1960) [75] geführt. Es erlaubt, in einfacher Weise zu entscheiden, ob ein divergentes oder konvergentes Feynman-Diagramm vorliegt. Der Begriff "oberflächlich" ist so zu verstehen, daß ein Diagramm Γ zwar oberflächlich durch Abzählen der Impulse konvergent scheint, jedoch durchaus divergente Unterdiagramme γ_i enthalten kann. Jedoch – entsprechend dem Weinberg'schen Konvergenztheorem – kommt dem Begriff oberflächlicher Divergenzgrad trotzdem eine zentrale Bedeutung zu. Dies gilt in besonderem Maße für die BPHZ-Renormierung, wie bald klar werden wird.

Der Operator \hat{R}_Γ ist durch die folgende Rekursionsformel definiert:

$$\hat{R}_\Gamma = \hat{I}_\Gamma + \sum_{\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}} \hat{I}_{\Gamma/\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}} \prod_{\tau=1}^k (-t^{\gamma_\tau}) \hat{R}_{\gamma_\tau} \quad (2.154)$$

Die Diagramme γ_i sind oberflächlich divergente Unterdiagramme des Diagramms Γ , d.h. $\omega(\gamma_i) \geq 0$. Die Summe in (2.154) geht dabei über alle möglichen Kombinationen von disjunkten, oberflächlich divergenten Unterdiagrammen γ_i . Die mathematischen Ausdrücke für die Unterdiagramme γ_i erhält man mit denselben Feynmanregeln wie für das Diagramm Γ . Der Term $\hat{I}_{\Gamma/\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}}$ bezeichnet den Integranden eines Diagramms Γ , bei dem die Kombinationen disjunkter und oberflächlich divergenter Unterdiagramme $\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}$ zu einem Punkt kontrahiert wurden.

Der Operator t^{γ_τ} ist der Tayloroperator. Er entwickelt den mathematischen Ausdruck des Diagramms γ_τ nach den äußeren fermionischen und bosonischen Impulsen bis einschließlich zur Ordnung $\omega(\gamma_\tau)$. Entsprechend den on-shell-Renormierungsbedingungen (2.138) bis (2.142) bedeutet das also:

t^γ entwickelt den Integranden eines beliebigen Diagramms γ

- a) nach den N äußeren fermionischen Impulsen p_i um m
- b) nach den M äußeren bosonischen Impulsen k_j um 0.

(Dabei bedeutet die Schreibweise $k_j = 0 \equiv (0, 0, 0, 0)$, d.h. alle Komponenten des Vierervektors verschwinden. Selbstverständlich ist dies ein Spezialfall der Renormierungsbedingung $k_j^2 = 0$.) Mathematisch bedeutet das bis zur 2. Ordnung der Taylorentwicklung (γ ist kein Lorentzindex, sondern bezeichnet das entsprechende Diagramm)

$$t^\gamma \hat{I}_\gamma(p_i, k_j) = \hat{I}_\gamma(p_i, k_j)|_{p_i=m, k_j=0} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} \hat{I}_\gamma(p_i, k_j)|_{p_i=m, k_j=0} \right) \left(p_i^\alpha - m \frac{\gamma^\alpha}{4} \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{j=1}^M \left(\frac{\partial}{\partial k_j^\alpha} \hat{I}_\gamma(p_i, k_j) \Big|_{p_i=m, k_j=0} \right) (k_j^\alpha) \\
& + \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1}^N \left(\frac{\partial^2}{\partial p_{i_1}^\alpha \partial p_{i_2}^\beta} \hat{I}_\gamma(p_i, k_j) \Big|_{p_{i_1}=p_{i_2}=m, k_j=0} \right) \left(p_{i_1}^\alpha - m \frac{\gamma^\alpha}{4} \right) \left(p_{i_2}^\beta - m \frac{\gamma^\beta}{4} \right) \\
& + \sum_{j_1=1}^M \sum_{j_2=1}^M \left(\frac{\partial^2}{\partial k_{j_1}^\alpha \partial k_{j_2}^\beta} \hat{I}_\gamma(p_i, k_j) \Big|_{p_i=m, k_{j_1}=k_{j_2}=0} \right) (k_{j_1}^\alpha k_{j_2}^\beta) \\
& + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \left(\frac{\partial^2}{\partial p_i^\alpha \partial k_j^\beta} \hat{I}_\gamma(p_i, k_j) \Big|_{p_i=m, k_j=0} \right) \left(p_i^\alpha - m \frac{\gamma^\alpha}{4} \right) (k_j^\beta) \\
& + \dots \quad (2.155)
\end{aligned}$$

Mit diesem Tayloroperator können alle Diagramme der QED bis zur 2. Ordnung Störungstheorie, d.h. alle Zwei-Schleifen-Diagramme renormiert werden.

Zu beachten ist dabei noch, daß die Taylorentwicklung nur in den kinematisch voneinander unabhängigen äußeren Impulsen zu erfolgen hat. Wenn alle äußeren Impulse in das Diagramm γ hineinfließen, so bedeutet das, daß sie wegen der Viererimpulserhaltung immer der Beziehung

$$\sum_i p_i + \sum_j k_j = 0 \quad (2.156)$$

genügen. Somit läßt sich immer genau ein äußerer Impuls mit dieser Beziehung eliminieren. Die Taylorentwicklung wird also über diesen eliminierten äußeren Impuls nicht ausgeführt. Welchen Impuls man dabei eliminiert, ist vollkommen beliebig und unterliegt keiner Beschränkung.

Bevor an einem Beispiel diese Renormierungstechnik demonstriert werden soll, sollen noch die Begriffe *äußere Renormierung* und *innere Renormierung* definiert werden. In der physikalischen Literatur und in vielen Lehrbüchern [66] werden diese Begriffe oft verwendet. Wenn das gesamte Diagramm Γ oberflächlich divergent ist, d.h. $\omega(\Gamma) \geq 0$ gilt, dann gibt es entsprechend (2.152) immer die Terme $t^\Gamma \hat{R}_\Gamma$. Diese Terme werden als Terme der äußeren Renormierung bezeichnet. Die Terme \hat{R}_Γ werden hingegen als Terme der inneren Renormierung bezeichnet. Es sei jedoch erwähnt, daß trotz aller Ähnlichkeiten die Methode der inneren und äußeren Renormierung durchaus keine so systematische Methode darstellt wie die BPHZ-Renormierung. Dies wird insbesondere später am Fall der Renormierung eines Diagramms mit überlappenden Divergenzen deutlich.

In dieser Arbeit werden später mit dieser Technik mehrere Zwei-Schleifen-Diagramme ausgewertet. Es ist jedoch sinnvoll, zunächst an zwei grundlegenden und auch später benötigten Ein-Schleifen-Beispielen diese elegante und übersichtliche Renormierungstechnik zu verdeutlichen. Betrachtet seinen die Vertexkorrektur und die Selbstenergie in Abbildung 2.14. Betrachten wir zuerst den Graph der Selbstenergie SE. Der mathematische Ausdruck für die Selbstenergie berechnet sich zu

$$\begin{aligned}
\hat{\Sigma}^{(1)}(p) &= \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p) \\
\hat{I}_\Gamma^{(1)}(p) &= -ie^2 \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} + \not{q} - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{q^2 + i\epsilon}, \quad (2.157)
\end{aligned}$$

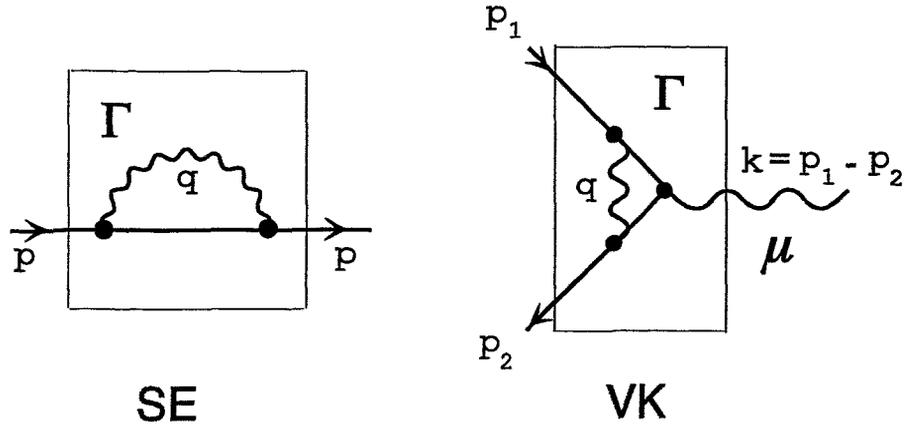


Abbildung 2.14: Die Graphen der Selbstenergie SE und Vertexkorrektur VK.

und entsprechend der BPHZ-Renormierung lautet der renormierte Ausdruck

$$\hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{p}) = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma^{(1)}(\not{p}). \quad (2.158)$$

Die Selbstenergie hat zwei äußere fermionische Beine, so daß $E_F = 2, E_B = 0$ gilt und deshalb ist $\omega(\Gamma) = 1$. Damit folgt also nach Formel (2.152)

$$\hat{R}_\Gamma^{(1)}(\not{p}) = (1 - t^\Gamma) \hat{R}_\Gamma^{(1)}(\not{p}). \quad (2.159)$$

Da im Ein-Schleifen-Fall natürlich keine Unterdiagramme γ existieren, folgt aus (2.154) einfach

$$\hat{R}_\Gamma^{(1)}(\not{p}) = \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p}). \quad (2.160)$$

Die beiden Gleichungen (2.159) und (2.160) zusammen ergeben also

$$\hat{R}_\Gamma^{(1)}(\not{p}) = \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p}) - t^\Gamma \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p}). \quad (2.161)$$

Die Taylorentwicklung (2.155) muss wegen $\omega(\Gamma) = 1$ bis einschließlich 1. Ordnung nach dem äußeren Impuls p ausgeführt werden:

$$t^\Gamma \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p}) = \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p})|_{\not{p}=m} + \frac{\partial}{\partial p^\alpha} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p})|_{\not{p}=m} \left(p^\alpha - m \frac{\gamma^\alpha}{4} \right). \quad (2.162)$$

Insgesamt ergibt sich damit nach Einsetzen dieser Taylorentwicklung in (2.161) und Einsetzen wiederum von $\hat{R}_\Gamma^{(1)}(\not{p})$ in die Gleichung (2.158) der renormierte Ausdruck für die Ein-Schleifen-Selbstenergie:

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{p}) &= \underbrace{\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p})}_{\hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p})} - \underbrace{\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p})|_{\not{p}=m}}_{\Sigma^{(1)}} \\ &\quad - \left(p^\alpha - m \frac{\gamma^\alpha}{4} \right) \underbrace{\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{\partial}{\partial p^\alpha} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(\not{p})|_{\not{p}=m}}_{\gamma_\alpha \Sigma^{(1)'}} \\ &= \hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p}) - \Sigma^{(1)} - \Sigma^{(1)' }(\not{p} - m). \end{aligned} \quad (2.163)$$

Die analytische Berechnung der beiden hergeleiteten Gegenterme ergibt [68]

$$\Sigma^{(1)} = \frac{3e^2}{16\pi^2} m \left(\ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + \frac{1}{2} \right) \quad (2.164)$$

und

$$\Sigma^{(1)'} = -\frac{e^2}{16\pi^2} \left(\ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + 2 \ln \left(\frac{\mu^2}{m^2} \right) + \frac{9}{2} \right). \quad (2.165)$$

Wie bereits eingangs erwähnt wurde, ist es schwierig, die Äquivalenz zwischen multiplikativer und BPHZ-Renormierung in jeder Ordnung Störungstheorie zu beweisen. Jedoch für den Fall der 1. Ordnung Störungstheorie kann dies hier demonstriert werden. Ein Vergleich von (2.163) mit (2.147) zeigt, daß

$$\Sigma^{(1)} = Z_2^{(1)} \delta m^{(1)} \quad \text{und} \quad \Sigma^{(1)'} = (Z_2^{(1)} - 1) \quad (2.166)$$

gelten muss. Ein Vergleich der explizit berechneten Gegenterme (2.165) und (2.143) bzw. (2.146) demonstriert diese Äquivalenz beider Renormierungsmethoden für die Selbstenergie. Der zweite wichtige Ein-Schleifen-Fall ist die Vertexkorrektur. Der explizite Ausdruck im Impulsraum lautet

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_\mu^{(1)}(p_1, p_2) &= \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2), \\ \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) &= -ie^2 \gamma_\beta \frac{1}{\not{p}_1 - \not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\mu \frac{1}{\not{p}_1 - \not{q} - \not{p}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\beta \frac{1}{q^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (2.167)$$

Der renormierte Ausdruck entsprechend der BPHZ-Renormierungsmethode ist definiert zu

$$\hat{\Lambda}_\mu^{(1)\text{ren}}(p_1, p_2) = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) \quad (2.168)$$

wobei, wie im Fall der Selbstenergie,

$$\hat{R}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) = (1 - t^\Gamma) \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) \quad (2.169)$$

und

$$\hat{R}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) = \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) \quad (2.170)$$

gilt. Das Diagramm der Vertexkorrektur hat zwei äußere fermionische Beine, d.h. $E_F = 2$, und ein äußeres bosonisches Bein, $E_B = 1$. Mit (2.153) folgt der oberflächliche Divergenzgrad zu $\omega(\Gamma) = 0$, so daß die Taylorentwicklung (2.155) bis zur 0. Ordnung erfolgt:

$$t^\Gamma \hat{R}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) = \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) \Big|_{\not{p}_1 = \not{p}_2 = m}, \quad (2.171)$$

und mit (2.168) folgt der renormierte Ausdruck der Vertexkorrektur zu

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_\mu^{(1)\text{ren}}(p_1, p_2) &= \underbrace{\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2)}_{\hat{\Lambda}_\mu^{(1)}(p_1, p_2)} - \underbrace{\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma^{(1)}(p_1, p_2) \Big|_{\not{p}_1 = \not{p}_2 = m}}_{\gamma_\mu \Lambda^{(1)}} \\ &= \hat{\Lambda}_\mu^{(1)}(p_1, p_2) - \gamma_\mu \Lambda^{(1)}. \end{aligned} \quad (2.172)$$

Aus der Wardidentität folgt

$$\Sigma^{(1)'} = -\Lambda^{(1)}, \tag{2.173}$$

so daß es nicht notwendig ist, den Gegenterm $\Lambda^{(1)}$ explizit zu berechnen. Wieder zeigt ein Vergleich des renormierten Ausdrucks (2.172) mit dem mit Hilfe der multiplikativen Renormierung hergeleiteten renormierten Ausdruck der Vertexkorrektur (2.148), daß (s. (2.116))

$$\Lambda^{(1)} = -\Sigma^{(1)'} = (Z_2^{(1)} - 1) \tag{2.174}$$

gelten muss. Ein Vergleich von (2.143) und (2.165) demonstriert abermals die Äquivalenz beider Renormierungsmethoden. Mit diesem direkten Verfahren läßt sich auch die Äquivalenz beider Renormierungsmethoden für die 2. Ordnung Störungstheorie explizit zeigen, denn die Gegenterme in beiden Renormierungszugängen sind für die QED analytisch bekannt. Schließlich sei auch für die BPHZ-Renormierungstechnik die graphische Darstellung der renormierten Ausdrücke (2.163) und (2.172) in Abbildung 2.15 angegeben. Das Kreuz in dem Gegenterm für die Selbstenergie hat jetzt eine andere Bedeutung als in der multiplikativen Renormierung. Hier bedeutet es nämlich, daß der Elektronenpropagator $1/(\not{p} - m + i\epsilon)$ ersetzt wird durch $1/(\not{p} - m + i\epsilon)^2$. Bemerkte sei außerdem, daß die Matrix γ_μ im Gegenterm für die Vertexkorrektur (2.172) bereits in der graphischen Darstellung Abbildung 2.15 enthalten ist, entsprechend den Feynmanregeln.

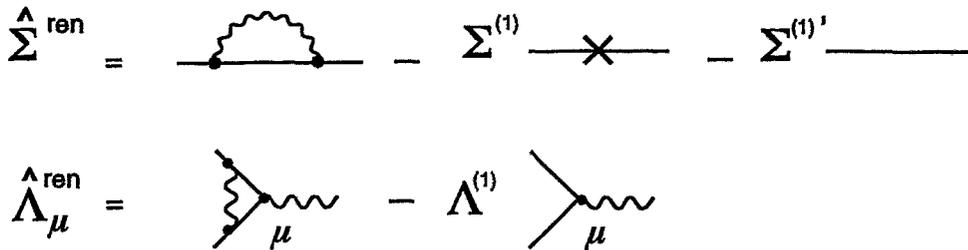


Abbildung 2.15: Die graphische Darstellung der renormierten Selbstenergie und der renormierten Vertexkorrektur im Rahmen der BPHZ-Renormierung.

2.5 Eichinvarianz und Vakuumpolarisationstensor 4. Ranges

Der Vakuumpolarisationstensor 4. Ranges ist Bestandteil jedes Diagramms der Bound-State-QED, welches eine Vakuumpolarisation des vollen Elektronenpropagators enthält und wird deshalb in dieser Arbeit bei der Renormierung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation und der Renormierung der Selbstenergie-Vakuumpolarisation relevant werden. Für spätere Betrachtungen ist es deshalb wichtig, den Begriff Eichinvarianz und die Renormierung des Vakuumpolarisationstensors zu klären.

Wird der Prozess der Licht-Licht-Streuung betrachtet, so entstehen in niedrigster Ordnung Störungstheorie die in Abbildung 2.16 dargestellten Diagramme. Der Vakuumpolarisations-

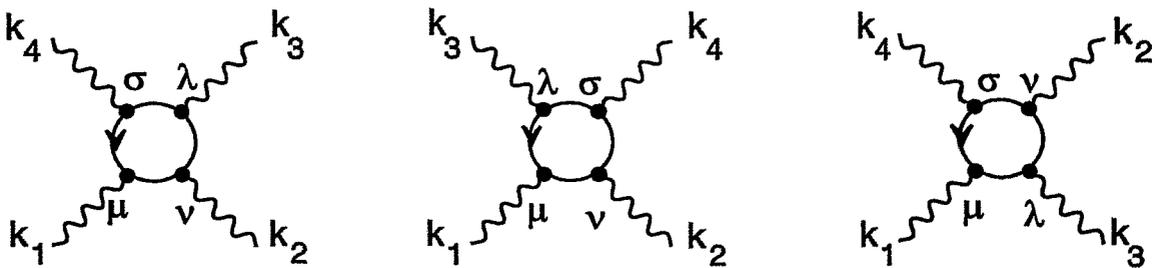


Abbildung 2.16: Die drei Diagramme der Licht-Licht-Streuung. Die anderen drei Diagramme unterscheiden sich von den dargestellten Diagrammen nur durch die Richtung der Elektronenschleife und liefern denselben Beitrag. Deshalb genügt es, nur die drei dargestellten Diagramme zu betrachten.

tensor 4. Ranges ist nun definiert als

$$\hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(k_1, k_2, k_3, m) = 2 \left[\hat{T}_{\mu\nu\lambda\sigma}^{\text{unren}}(k_1, k_2, k_3, m) + \hat{T}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(k_1, k_2, -k_1 - k_2 - 2k_3, m) + \hat{T}_{\mu\lambda\nu\sigma}^{\text{unren}}(k_1, k_3, k_2, m) \right]. \quad (2.175)$$

Die drei Tensoren \hat{T}^{unren} sind durch die Diagramme der Abbildung 2.16 dargestellt. Sie sind gegeben durch

$$\hat{T}_{\mu\nu\lambda\sigma}^{\text{unren}}(k_1, k_2, k_3, m) = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left(\gamma_\mu \frac{1}{\not{q} + \not{k}_1 - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{q} + \not{k}_1 + \not{k}_2 - m + i\epsilon} \gamma_\lambda \frac{1}{\not{q} + \not{k}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_\sigma \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right). \quad (2.176)$$

Die Impulserhaltung $k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = 0$ ist immer erfüllt, jedoch i.a. können die Photonen wieder Teil eines größeren Feynmandiagramms sein und müssen nicht auf der Massenschale liegen. Dieser allgemeine Fall ist für dieses Kapitel von Bedeutung, d.h. es gilt $k_i^2 \neq 0$. Eine allgemeine Struktur der Lösung dieses Tensors wurde erstmalig in [76] angegeben.

Es wurde schon frühzeitig erkannt, daß zwar die einzelnen Tensoren \hat{T}^{unren} logarithmisch divergent sind, jedoch ihre Summe, d.h. der Vakuumpolarisationstensor $\hat{\Pi}^{\text{unren}}$ ist endlich

[77, 78]. Ein exzellenter und einfacher Beweis dafür ist z.B. in [57] und in *Achieser, Berestezki* [66] zu finden. Trotzdem soll auf diese bemerkenswerte Eigenschaft genauer eingegangen werden, da sie die Ursache der Verletzung der Eichinvarianz des Tensors (2.175) darstellt und deshalb von wesentlicher Bedeutung ist.

Der Vakuumpolarisationstensor (2.175) setzt sich aus den Tensoren (2.176) zusammen, welche also bei großen Impulsen q logarithmisch divergieren. Diese Divergenz ist offensichtlich genau in dem Term

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\mu\nu\lambda\sigma}^{\text{unren}}(0,0,0,m) &= \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left(\gamma_\mu \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\lambda \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\sigma \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right) \\ &= \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left(\gamma_\mu \not{q} \gamma_\nu \not{q} \gamma_\lambda \not{q} \gamma_\sigma \not{q} \right) \frac{1}{(q^2 - m^2 + i\epsilon)^4} \\ &\quad + \text{endliche Integrale} \end{aligned} \quad (2.177)$$

enthalten. Die Ausführung der Spur ergibt

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\mu\nu\lambda\sigma}^{\text{unren}}(0,0,0,m) &= \left(g_{\sigma\lambda} g_{\mu\nu} + g_{\sigma\mu} g_{\lambda\nu} - 2g_{\sigma\nu} g_{\lambda\mu} \right) \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} q^4 \frac{1}{(q^2 - m^2 + i\epsilon)^4} \\ &\quad + \text{endliche Integrale.} \end{aligned} \quad (2.178)$$

Entsprechende Ausdrücke entstehen bei den anderen beiden Tensoren, so daß für den divergenten Anteil insgesamt folgt

$$\begin{aligned} &\hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(0,0,0,m) \\ &= \underbrace{\left(g_{\sigma\lambda} g_{\mu\nu} + g_{\sigma\mu} g_{\lambda\nu} - 2g_{\sigma\nu} g_{\lambda\mu} + g_{\lambda\sigma} g_{\mu\nu} + g_{\lambda\mu} g_{\sigma\nu} - 2g_{\lambda\nu} g_{\sigma\mu} + g_{\sigma\nu} g_{\mu\lambda} + g_{\mu\sigma} g_{\nu\lambda} - 2g_{\sigma\lambda} g_{\nu\mu} \right)}_{=0} \\ &\quad \times \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} q^4 \frac{1}{(q^2 - m^2 + i\epsilon)^4} + \text{endliche Integrale.} \end{aligned} \quad (2.179)$$

Dieser Ausdruck ist die Ursache der Verletzung der Eichinvarianz, denn der Vorfaktor verschwindet zwar, jedoch das dahinterstehende Integral divergiert. Somit ist dieser Ausdruck unbestimmt und der Begriff Eichinvarianz verliert deshalb seinen Sinn. Das bedeutet, daß das Integral *regularisiert* werden muss. Dann verschwindet der gesamte Ausdruck und *nur in diesem Sinne* ist der Vakuumpolarisationstensor insgesamt konvergent und eichinvariant. Der regularisierte Ausdruck entsprechend der Pauli-Villars-Regularisierung folgt zu

$$\hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{reg}}(k_1, k_2, k_3, m) = \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(k_1, k_2, k_3, m) - \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(k_1, k_2, k_3, M). \quad (2.180)$$

Dabei ist M eine große Elektronenmasse. Die Eichinvarianzbedingung des Vakuumpolarisationstensors lautet [68]

$$k_1^\mu \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{reg}}(k_1, k_2, k_3, m) = 0,$$

$$k_2^\nu \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{reg}}(k_1, k_2, k_3, m) = 0,$$

$$k_3^\sigma \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{reg}}(k_1, k_2, k_3, m) = 0. \quad (2.181)$$

Jetzt sei der renormierte Vakuumpolarisationstensor betrachtet. Der oberflächliche Divergenzgrad der Diagramme in Abbildung 2.16 ist $\omega(\Gamma) = 0$, und somit folgt aus der BPHZ-Renormierung der renormierte Ausdruck unmittelbar, indem die äußeren Impulse k_i auf die Massenschale des Photons gesetzt werden, d.h. zu

$$\hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{ren}}(k_1, k_2, k_3, m) = \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(k_1, k_2, k_3, m) - \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(0, 0, 0, m). \quad (2.182)$$

Diese Gleichung besagt, daß die divergierenden Integrale (2.179) gerade subtrahiert werden und somit im renormierten Ausdruck abermals die Eichinvarianz erfüllt ist, d.h.

$$k_1^\mu \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{ren}}(k_1, k_2, k_3, m) = 0,$$

$$k_2^\nu \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{ren}}(k_1, k_2, k_3, m) = 0,$$

$$k_3^\sigma \hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{ren}}(k_1, k_2, k_3, m) = 0. \quad (2.183)$$

Zu beachten ist aber, daß der Gegenterm *alleine* entsprechend (2.179) eine unbestimmte Größe darstellt, d.h. durchaus divergieren kann. Nur der gesamte Ausdruck (2.182) ist konvergent und eichinvariant. Das bedeutet, daß bei Rechnungen mit dem Vakuumpolarisationstensor im renormierten Ausdruck die divergierenden Integrale (2.179) *analytisch* zu subtrahieren sind. Ein anderer Weg besteht darin, im *renormierten* Ausdruck den Vakuumpolarisationstensor und den Gegenterm mit einer *beliebigen* Regularisierung zu regularisieren. Beide Wege sichern die Eichinvarianz im renormierten Ausdruck.

Für mehr Details zu dieser Problematik und dem Zusammenhang zwischen Eichinvarianz, Regularisierung und Renormierung sei auf [66] verwiesen. Schließlich sei noch kurz demonstriert, daß der Gegenterm $\hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(0, 0, 0, m)$ eine rein imaginäre Größe darstellt:

Der Gegenterm ist eine Summe von drei Tensoren (s. Gleichung (2.176)) der Gestalt:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\mu,\nu,\lambda,\sigma}^{\text{unren}}(0, 0, 0, m) &= \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left[\gamma_\mu \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\lambda \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_\sigma \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right] \\ &= \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left[\gamma_\mu (\not{q} + m) \gamma_\nu (\not{q} + m) \gamma_\lambda (\not{q} + m) \gamma_\sigma (\not{q} + m) \right] \frac{1}{(q^2 - m^2 + i\epsilon)^4} \end{aligned} \quad (2.184)$$

Alle Integrale mit ungerader Anzahl von Impulsen im Zähler verschwinden. Somit gibt es nur Integrale der Art

$$\begin{aligned} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} (1) \frac{1}{(q^2 - m^2 + i\epsilon)^4} &= i \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{m^4}, \\ \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} (q_\alpha q_\beta) \frac{1}{(q^2 - m^2 + i\epsilon)^4} &= -i \frac{\pi^2}{12} \frac{1}{m^2} g_{\alpha\beta}, \\ \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} (q_\alpha q_\beta q_\gamma q_\delta) \frac{1}{(q^2 - m^2 + i\epsilon)^4} &= i \frac{\pi^2}{24} \Gamma(0) (g_{\alpha\beta} g_{\gamma\delta} + g_{\alpha\gamma} g_{\beta\delta} + g_{\alpha\delta} g_{\beta\gamma}), \end{aligned} \quad (2.185)$$

welche offensichtlich alle rein imaginär sind. Das letzte Integral divergiert. Diese Divergenz entspricht der erwähnten logarithmischen Divergenz jedes einzelnen Tensors \hat{T} . Jedoch in der Summe aller drei Tensoren \hat{T} entsprechend (2.175) hebt sich diese Divergenz bei Verwendung einer beliebigen Regularisierung wieder gegenseitig heraus, so daß ein konvergenter Tensor entsteht und dieses Integral nicht benötigt wird. Somit ist bewiesen worden, daß der Gegenterm $\hat{\Pi}_{\mu\nu\sigma\lambda}^{\text{unren}}(0, 0, 0, m)$ rein imaginär ist. Diese Aussage wird bei der Renormierung der Selbstenergie-Vakuumpolarisation relevant sein.

3 Zwei-Photonen-Selbstenergie

Dialog zwischen dem Verstand und den Sinnen

Verstand: 'Scheinbar ist Farbe, scheinbar Süßigkeit, scheinbar Bitterkeit.
Wirklich sind nur Atome und Leeres.'

Die Sinne: 'Du armer Verstand, von uns nimmst Du deine Beweisstücke
und willst uns damit besiegen? Dein Sieg ist dein Fall.'

Demokrit (um 460 bis 371 v.u.Z.)

3.1 Gegenwärtiger Stand der Vorhersagen der Lamb-Verschiebung

3.1.1 Strahlungskorrekturen der Ordnung α

Die beiden QED-Strahlungskorrekturen der Ordnung α zur Lambverschiebung wurden aus der S-Matrixentwicklung bereits hergeleitet und sind in Abbildung 2.4 dargestellt. Die Ein-Schleifen-Selbstenergie liefert dabei gegenüber der Ein-Schleifen-Vakuumpolarisation den größten Beitrag zur Lambverschiebung für alle wasserstoffartigen Systeme. Neben diesen reinen QED-Effekten muss jedoch auch die endliche Kernausdehnung berücksichtigt werden. Jedoch selbst für atomare Systeme mit einer sehr großen Kernladungszahl Z und damit mit einer sehr großen endlichen Kernausdehnung, dominiert der Beitrag der Ein-Schleifen-Selbstenergie gegenüber dem Beitrag der endlichen Kernausdehnung und dem der Ein-Schleifen-Vakuumpolarisation VP. Zunächst sei deshalb die Ein-Schleifen-Selbstenergie betrachtet.

Der mathematische Ausdruck für die Energieverschiebung eines Zustandes $|n\rangle$ durch die Selbstenergie des gebundenen Elektrons ergibt sich mit der Gell-Mann-Low-Sucher-Formel für irreduzible Diagramme (2.78) zu

$$\begin{aligned}\Delta E_n^{\text{SE}} &= \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) \varphi_n(\mathbf{r}_2) \\ &= \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle ,\end{aligned}\quad (3.1)$$

mit dem Operator der Selbstenergie der Ordnung α

$$\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) = i 4 \pi \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \alpha^\mu S_F(E_n - E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \alpha^\nu D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) .\quad (3.2)$$

Während die Berechnung der Selbstenergie eines freien Elektrons bereits in der grundlegenden Arbeit von *Bethe* (1947) [79] erfolgte, stellte die numerische Auswertung der Ein-Schleifen-Selbstenergie eines gebundenen Elektrons über viele Jahre ein äußerst schwieriges Problem dar. Die Renormierung der Energieverschiebungen der Ordnung α und α^2 ist ziemlich komplex und soll deshalb später genauer behandelt werden. In diesem Abschnitt wird

direkt von den renormierten Ausdrücken ausgegangen. Es seien jetzt die wichtigsten Beiträge zur Auswertung der Selbstenergie und Vakuumpolarisation eines gebundenen Elektrons genannt, welche gleichzeitig die extremen Schwierigkeiten verdeutlichen, mit denen man bei solchen Berechnungen konfrontiert ist. Dabei soll insbesondere entsprechend der Zielsetzung der vorliegenden Arbeit die Selbstenergie im Mittelpunkt stehen, zumal die hier kurz dargelegten Auswertungsmethoden in leicht abgewandelter Form auch bei der Zwei-Photonen-Selbstenergie verwendet werden.

Die erste Methode zur Berechnung der Selbstenergie eines gebundenen Elektrons in allen Ordnungen in $Z\alpha$ wurde 1959 durch *Brown, Langer* und *Schäfer* vorgeschlagen [81]. Jedoch erst 1971 gelang *Desiderio* und *Johnson* die erste korrekte Berechnung der Selbstenergie in allen Ordnungen in $Z\alpha$ für einige wasserstoffartige Ionen hoher Kernladungszahl Z [80]. In der Arbeit [80] wurde die Methode von *Brown, Langer, Schäfer* korrigiert und numerisch implementiert. Die grundlegende Idee bestand dabei darin, den sogenannten *zero-potential-Term* von der unrenormierten Energie-Verschiebung zu subtrahieren und anschließend zum Gegenterm wieder zu addieren. Dies ist in der Abbildung 3.1 dargestellt. Auf diese Wei-

$$\Delta E_n^{\text{SE,ren}} = \left[\text{SE} - \text{ZP} \right] - \left[\sum^{(1)} \text{GT} - \text{ZP} \right]$$

Abbildung 3.1: Der *zero-potential-Term* ZP wurde bei der numerischen Auswertung von *Desiderio* und *Johnson* subtrahiert und wieder addiert.

se heben sich in beiden Summanden divergente Anteile gegenseitig heraus. Dennoch sind beide Summanden divergent. Deshalb wurden beide Summanden nach Partialwellen l entwickelt und zunächst für einen beliebigen, aber festen Photonenimpuls k berechnet. Danach wurden beide Summanden, welche ja zusammen einen konvergenten Ausdruck ergeben, wieder addiert und anschließend wurde über den Photonenimpuls k integriert. Die Auswertung nach diesem Schema erforderte höchste Präzession, denn die Konvergenz der einzelnen Partialwellen l verhielt sich proportional zu $1/l^2$, d.h es mussten viele einzelne Partialwellen berücksichtigt werden. Später wurde deshalb von *Mohr* (1974) [25, 82] eine sehr erfolgreiche Methode zur numerischen Auswertung der Selbstenergie der Ordnung α entwickelt. In dieser Methode wurde neben dem *zero-potential-Term* auch der *one-potential-Term* subtrahiert und zum Gegenterm wieder addiert. Diese Methode ist in der Abbildung 3.2 dargestellt. Der Vorteil besteht u.a. darin, daß nun beide Summanden sowohl konvergent als auch eichinvariant und kovariant sind. Eine spezielle Wahl der Energieintegration erlaubte zudem eine einfache mathematische Struktur des Photonpropagators und der zweite Summand konnte analytisch ausgewertet werden. Diese Methode wurde später von *Mohr, Kim* (1992) auch zur Berechnung der Selbstenergie angeregter Zustände [83] verwendet. Alle diese Berechnungen berücksichtigten jedoch noch nicht den Einfluß der endlichen Kernaussdehnung. Von *Mohr* und *Soiff* wurde die Methode von *Mohr* in leicht abgewandelter Form 1993 verwendet, um den Einfluß der endlichen Kernaussdehnung auf die Lamb-Verschiebung erstmalig zu berech-

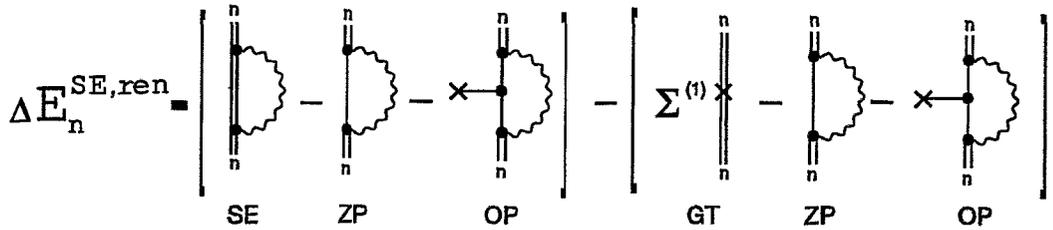


Abbildung 3.2: Der zero-potential-Term ZP und der one-potential-Term OP wurde bei der numerischen Auswertung von *Mohr* subtrahiert und wieder addiert.

nen [85]. Schließlich soll nicht unerwähnt bleiben, daß *Blundell* und *Snyderman* 1991 in der Arbeit [84] einen alternativen Ansatz zur Berechnung der Selbstenergie entwickelten. Die Idee bestand darin, die endlichen Anteile des zero- und one-potential-Terms hauptsächlich analytisch zu berechnen und den konvergenten many-potential-Term mit der basis-set Technik auszuwerten. Die Partialwellen zeigten in dieser Methode ein $1/l^3$ -Konvergenzverhalten, d.h. nach dieser Methode konnten bereits mit wenigen Partialwellen hohe Genauigkeiten erzielt werden. Die in [84] entwickelte Methode ist ebenfalls erweiterbar auf Berechnungen, welche den Einfluß der endlichen Kernaussdehnung berücksichtigen. Schließlich soll auch auf die bemerkenswerten Arbeiten [86] verwiesen werden, in denen es erst kürzlich *Jentschura*, *Mohr*, *Soff* (1999) gelang, für den extrem schwierigen Fall des Wasserstoffs die Ein-Schleifen-Selbstenergie in allen Ordnungen in $Z\alpha$ mit extrem hoher Genauigkeit auszuwerten, sowohl für den 1s-Grundzustand als auch für angeregte Zustände. Im Wasserstoffatom war es dazu notwendig, im many-potential-Term einige hunderttausend Partialwellen zu berücksichtigen. Zu den technischen Details der dabei angewendeten Methode der Konvergenzbeschleunigung sei ebenfalls auf [86] verwiesen. Solche Hochpräzisions-Rechnungen im Wasserstoffatom erlauben neben einem Test der sogenannten $Z\alpha$ -Entwicklung vor allem auch Rückschlüsse auf die genauen Werte einiger Naturkonstanten, wie z.B. der Rydberg-Konstanten. Die genaue Kenntniss der Größe der Naturkonstanten wiederum ist gegenwärtig auch im Hinblick auf eventuelle Zeitabhängigkeiten fundamentaler Konstanten von besonderer Bedeutung, welche man hofft im Experiment zu finden [87, 88, 89].

Schließlich sei auch auf den aktuellen Stand der Berechnungen der Vakuumpolarisation eingegangen. Der mathematische Ausdruck der Ein-Schleifen-Vakuumpolarisation ergibt sich mit (2.78) zu

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{VP} &= \int d^3 \mathbf{r}_1 \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \gamma_0 \hat{U}_{\text{bound}}(\mathbf{r}_1) \varphi_n(\mathbf{r}_1) \\ &= \langle n | \gamma_0 \hat{U}_{\text{bound}}(\mathbf{r}_1) | n \rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

mit dem Operator der Vakuumpolarisationsdichte der Ordnung α

$$\gamma_0 \hat{U}_{\text{bound}}(\mathbf{r}_1) = -i 4 \pi \alpha \int d^3 \mathbf{r}_2 \alpha^\mu D_{\mu\nu}(E=0, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} [\alpha^\nu S_F(E, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2)] . \quad (3.4)$$

Wie im Fall der Ein-Schleifen-Selbstenergie, so stellte auch die Berechnung der Ein-Schleifen-Vakuumpolarisation in allen Ordnungen in $Z\alpha$ über viele Jahre hinweg ein großes numerisches Problem dar. Mit Hilfe der Potentialentwicklung wird die Vakuumpolarisation in einen Uehlinganteil und einen Wichmann-Kroll-Anteil, unter Berücksichtigung des Furrytheorems, zerlegt (s. Abbildung 3.3). Auch hier seien die grundlegenden Arbeiten genannt.

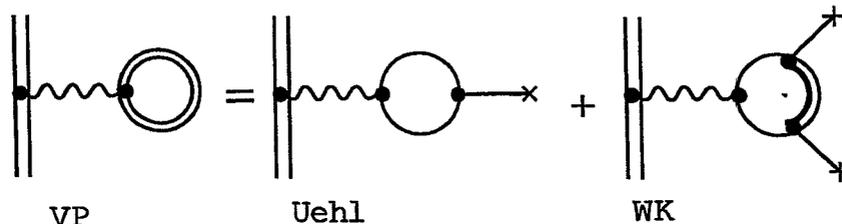


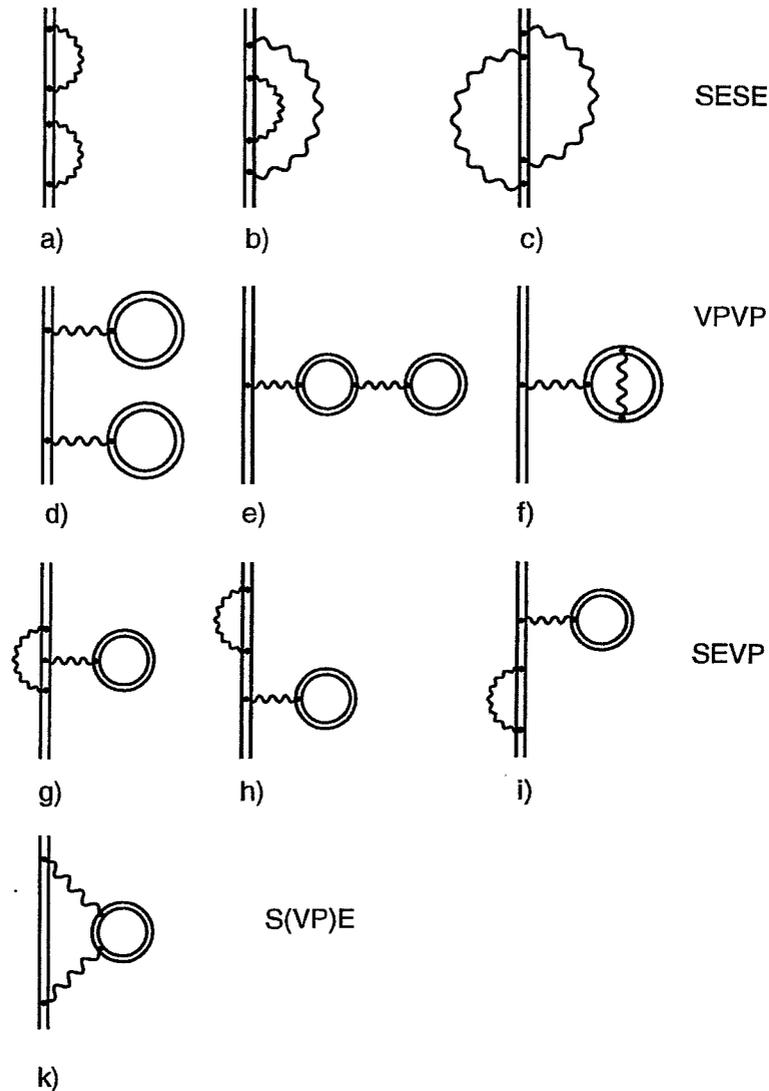
Abbildung 3.3: Die Zerlegung der Vakuumpolarisation VP in einen Uehlinganteil Uehl und einen Wichmann-Kroll-Anteil WK.

Bemerkenswert in diesem Zusammenhang ist zunächst die Rechnung von *Uehling* [6]. *Uehling* fand in dieser Arbeit bereits 1935 den renormierten Ausdruck für den nach ihm benannten Anteil der Vakuumpolarisation, obwohl zu diesem Zeitpunkt keine Renormierungstheorie existierte. Der nächste bedeutende Schritt war die Berechnung der niedrigsten Ordnung im Wichmann-Kroll-Anteil durch *Wichmann* und *Kroll* (1956) [90]. Die Berechnung des Wichmann-Kroll-Potentials der Ordnung $(Z\alpha)^3$ für punktförmige Atomkerne gelang erstmalig 1972 *Blomqvist* [91] und für endliche Atomkerne in der Näherung einer Partialwelle 1974/75 *Gyulassy* [92]. Schließlich gelang es 1988 in der Arbeit von *Soff* und *Mohr* [93] den Einfluß der Vakuumpolarisation unter Berücksichtigung der endlichen Kernaussdehnung für alle Zustände für $Z = 30 - 100$ und $Z = 170$ zu berechnen. Das in der Arbeit [93] vorgeschlagene Regularisierungs- und Renormierungsschema der Ein-Schleifen-Vakuumpolarisation diente zudem in zahlreichen nachfolgenden Rechnungen mit Vakuumpolarisation, von denen hier z.B. [94, 100, 168, 169] erwähnt sein sollen, als Grundlage für Betrachtungen der Eichinvarianz. Speziell dieser Punkt wird auch in der vorliegenden Arbeit später bei der Herleitung eines renormierten Ausdrucks der Selbstenergie-Vakuumpolarisation von zentraler Bedeutung sein.

3.1.2 Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2

In den letzten Jahren wurden sehr effiziente numerische Verfahren entwickelt, um die Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2 auswerten zu können. Dazu zählt insbesondere die B-Spline-Methode und die Partialwellen-Renormierung. Dieser Abschnitt soll einen Überblick über den gegenwärtigen Stand der Forschung verschaffen, während die erwähnten numerischen Methoden an anderer Stelle dieser Arbeit eingehender erläutert werden.

Der vollständige Satz der QED-Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2 ist in der Abbildung 3.4 dargestellt. Sie beinhalten alle topologisch möglichen Kombinationen der Selbstenergie SE und der Vakuumpolarisation VP, wenn man sich auf vier Vertizes beschränkt. Die Diagramme können, wie dargestellt, in eichinvariante Untergruppen unterteilt werden, wovon wiederum einige Diagramme schon einzeln eichinvariant sind. Jede eichinvariante Gruppe und jedes eichinvariante Diagramm kann unabhängig von den anderen Korrekturen numerisch ausgewertet werden. In diesem Abschnitt wird ein Überblick über den gegenwärtigen Stand der Forschung bei der numerischen Auswertung dieser Diagramme dargelegt (s.a [24]). Dabei wird oft der Begriff *Uehlingnäherung* verwendet, welcher in Abbildung 3.5 verdeutlicht wird. Die Uehlingnäherung enthält mit ca. 80...90% bereits den dominierenden Anteil des exakten Diagramms. Der Beitrag des gesamten Diagramms ohne Näherung wird hier als exakt bezeichnet. Betrachtet seien nun im Einzelnen die Diagramme der Ordnung α^2 .

Abbildung 3.4: Die Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2 .

Das Diagramm SESE a) kann in einen reduzierten, SESE a red), und einen irreduziblen Anteil, SESE a irred), zerlegt werden. Für die Klasse der kovarianten Eichungen, d.h. die Klasse der $(1 - \zeta)$ -Eichungen, ist der irreduzible Anteil von SESE a) eichinvariant, *Blundell* (1992) in [95]. Deshalb kann der irreduzible Anteil der Zwei-Photonen-Selbstenergie separat ausgewertet werden. Dieser Anteil der Zwei-Photonen-Selbstenergie wurde erstmalig von *Mitrushenkov, Labzowsky, Lindgren, Persson, Salomonson* (1995) in [96] für die Kernladungszahlen $Z = 70, 80, 90, 92$ ausgewertet. Für beliebige Kernladungszahl $3 \leq Z \leq 92$ erfolgte von *Mallampalli, Sapirstein* (1998) in [97] und *Goidenko, Labzowsky, Nefiodov, Plunien, Soff* (1999) in [98] ebenfalls eine Berechnung des irreduziblen Anteils. Der reduzierte Anteil von SESE a) muss zusammen mit den Diagrammen SESE b,c) berechnet werden, denn nur ihre Summe ist eichinvariant. Diese Beiträge stellen somit die schwierigste Herausforderung in der Berechnung der Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2 dar. Ein erster Versuch

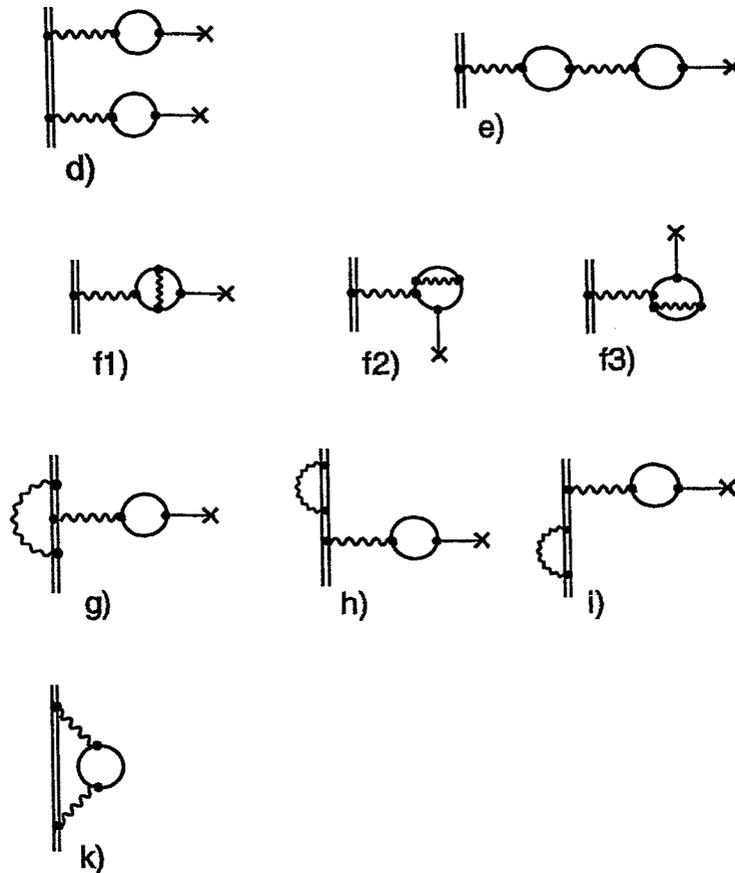


Abbildung 3.5: Die Uehlingnäherung der Diagramme VPVP d,e,f), SEVP g,h,i) und S(VP)E k). In den Elektronen-Schleifen treten jetzt also nur freie Elektronenpropagatoren auf.

solch einer Auswertung erfolgte von *Mallampalli, Sapirstein* (1998) für die Kernladungszahl $Z = 92$ in [99]. In dieser Arbeit wurde nur ein spezieller Anteil der Diagramme SESE a red) b) und c) berechnet. Jedoch ist überhaupt nicht klar, ob es sich bei diesem berechneten Anteil von *Mallampalli* und *Sapirstein* um den dominierenden Anteil des exakten Resultats handelt oder nicht. Die Berechnung der exakten Zwei-Photonen-Selbstenergie ist deshalb Hauptziel der vorliegenden Arbeit.

Betrachtet sei nun das eichinvariante Diagramm VPVP d). Der Beitrag dieses Diagramms wurde zunächst in Uehling-Approximation von *Persson, Lindgren, Salomonson* und *Sunnergren* (1993) ausgewertet in [100] und später exakt in allen Ordnungen in $Z\alpha$ von *Persson, Lindgren, Labzowsky, Plunien, Beier* und *Soff* (1996) in [101]. Eine systematische Tabellierung des exakten Beitrags dieses Diagramms wurde von *Beier, Plunien, Greiner* und *Soff* (1997) in [102] erbracht.

Das Diagramm VPVP e) wurde zusammen mit dem Diagramm VPVP f) in Uehlingnäherung für den Fall eines punktförmigen Atomkerns zuerst von *Källén* und *Sabry* (1955) [103] berechnet, weshalb diese Diagramme in Uehlingnäherung auch als *Källén-Sabry-Diagramme* bezeichnet werden. Der von *Källén* und *Sabry* gefundene renormierte Ausdruck wurde später von verschiedenen Arbeitsgruppen bestätigt [104]. Eine Berechnung dieser Strahlungskor-

rektur der *Källén-Sabry-Diagramme* für beliebige Kernladungszahl Z erfolgte von *Beier* und *Soff* (1988) in [105]. Der Fall der Uehlingnäherung von VPVP e,f) mit einem ausgedehnten Atomkern wurde in [106] untersucht. In dieser Arbeit von *Fullerton* und *Rinker* (1976) konnte eine Integraldarstellung des renormierten Anteils der Diagramme VPVP e,f) in Uehlingnäherung hergeleitet werden, welche eine beliebige Ladungsverteilung $\rho(x)$ des Atomkerns beinhaltet. Eine anschließende numerische Berechnung dieser Integraldarstellung der *Källén-Sabry-Diagramme* für endliche Kerne mit beliebiger Kernladungszahl Z erfolgte von *Schneider*, *Greiner* und *Soff* (1993) in [107]. Jedoch sind VPVP e) und VPVP f) schon einzeln eichinvariant und könnten deshalb separat ausgewertet werden. Eine exakte Berechnung des Diagramms VPVP e) und eine Berechnung des Diagramms VPVP e) in *Uehlingnäherung* wurde ausgeführt durch *Plunien*, *Beier*, *Soff* und *Persson* (1998) in [108]. Es stellte sich dabei heraus, daß der Beitrag der Uehlingnäherung dieses Diagramms 75% beträgt. Der Beitrag des Diagramms VPVP f) ist bis jetzt nur in Uehlingnäherung bekannt (s. die Arbeiten von *Beier*, *Mohr*, *Persson*, *Plunien*, *Greiner* und *Soff* (1997) in [109] und auch von *Schneider*, *Greiner*, *Soff* (1993) [107]). In der vorliegenden Arbeit konnte erstmalig ein renormierter Ausdruck des Diagramms VPVP f) hergeleitet werden.

Die Diagramme mit gemischter Selbstenergie und Vakuumpolarisation sind die drei Diagramme SEVP g,h,i). Der Beitrag dieser Diagramme wurde zunächst ebenfalls erst in Uehlingnäherung von *Lindgren*, *Persson*, *Salomonson*, *Karasiev*, *Labzowsky*, *Mitrushenkov* und *Tokman* (1993) in [110] bestimmt, ehe eine exakte Auswertung (1996) durch *Persson*, *Lindgren*, *Labzowsky*, *Plunien*, *Beier* und *Soff* [111] gelang.

Schließlich sei noch die Strahlungskorrektur S(VP)E k) betrachtet. Auch dieses Diagramm ist bisher nur in Uehlingnäherung von *Persson*, *Lindgren*, *Labzowsky*, *Plunien*, *Beier*, *Soff* (1996) [111] und ebenfalls von *Mallampalli*, *Sapirstein* (1996) [112] ausgewertet wurden. Deshalb wird dieses Diagramm ebenfalls Gegenstand der Untersuchung in dieser Arbeit sein und später ausführlicher behandelt. Im Rahmen dieser Arbeit konnte ein renormierter Ausdruck des exakten Diagramms S(VP)E k) hergeleitet werden. Ebenso wurde in diesem Zusammenhang auch das Problem der Eichinvarianz untersucht.

Zusammenfassend muss festgestellt werden, daß der irreduzible Anteil der Zwei-Photonen-Selbstenergie sich von allen Beiträgen der Ordnung α^2 als der zahlenmäßig größte Beitrag eines einzelnen Diagramms herausstellte. Zum Beispiel für wasserstoffartiges Uran betrug die Korrektur SESE a irred) -0.97 eV. Es ist deshalb auch zu erwarten, daß die Diagramme der Zwei-Photonen-Selbstenergie insgesamt, ebenso wie das Diagramm SESE a irred), den größten Beitrag der Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2 liefern werden. Die Berechnung der Zwei-Photonen-Selbstenergie ist deshalb von besonderer Bedeutung, da sie mit ca. ± 1 eV die größte Unsicherheit in den Vorhersagen der Lamb-Verschiebung der Ordnung α^2 darstellten. Es muss sogar betont werden, daß erst die Berücksichtigung des Beitrags der Zwei-Photonen-Selbstenergie alle anderen Berechnungen der Ordnung α^2 sinnvoll erscheinen läßt, denn ihre Summe beträgt ohne den Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie z.B. für Uran nur 0.24 eV und für Blei 0.2 eV.

3.2 Herleitung der mathematischen Ausdrücke der Zwei-Photonen-Selbstenergie

Im Abschnitt 2.2.1 wurden im Rahmen der Gell-Mann-Low-Sucher-Formel die Begriffe *irreduzibles Matrixelement* und *reduzibles Matrixelement* der S-Matrix definiert, (s. Gl. (2.74) und die anschließende Definition). Im Ein-Schleifen-Fall gibt es demnach nur irreduzible Diagramme. Jedoch im Zwei-Schleifen-Fall können reduzierbare Matrixelemente der S-Matrix auftreten. Dabei wurde festgestellt, daß es sich nur im Fall der dort definierten sogenannten *reinen Terme* um irreduzible Matrixelemente handeln kann, diese aber wiederum trotzdem reduzierbare Anteile enthalten können. Im Vorfeld ist es aber zunächst nicht klar, ob ein *reines Matrixelement* reduzierbare Anteile enthält oder nicht. Aus genau diesem Grund können selbst im Fall der *reinen Terme* problematische Terme auftreten, wenn die Gleichung (2.78) "blind" für irreduzibel erscheinende Matrixelemente angewandt wird. Das Loop-after-Loop-Diagramm stellt solch einen Fall dar, wie im Folgendem ersichtlich sein wird. Deshalb es ist notwendig, daß bei der Herleitung der expliziten mathematischen Ausdrücke der Energieverschiebungen größere Sorgfalt aufgewendet wird.

3.2.1 Das Loop-After-Loop-Diagramm

Das Loop-After-Loop-Diagramm ist in der Abbildung 3.6 dargestellt. Die Anwendung des

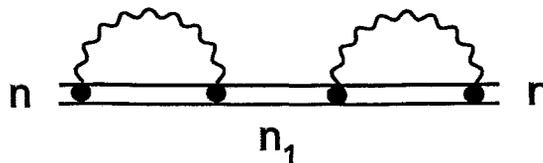


Abbildung 3.6: Das Loop-after-Loop-Diagramm SESE a.

Spezialfalls (2.78) der Gell-Mann-Low-Sucher-Formel für irreduzible Matrixelemente ist leider nicht direkt anwendbar, denn es ist im Vorfeld nicht klar, ob dieses Diagramm reduzierbare Anteile enthält. Somit müsste man die Gell-Mann-Low-Sucher-Formel (2.72) anwenden. Dieser Zugang zur Herleitung ist aber recht aufwendig. Ein einfacherer Weg kann mit der Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion von *Shabaev* eingeschlagen werden. Ein explizit berechnetes Beispiel soll die Eleganz dieser Methode verdeutlichen. Ausgangspunkt ist (2.103):

$$\Delta E_n^{(2)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE (E - E_n) \Delta g_{nn}^{(2)} - \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE (E - E_n) \Delta g_{nn}^{(1)} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \Delta g_{nn}^{(1)}. \quad (3.5)$$

Der Integrationskontur Γ in der komplexen E -Ebene umrundete dabei den Energiezustand E_n . Zunächst werden die Hilfsfunktionen $\Delta g_{nn}^{(1)}(E)$ und $\Delta g_{nn}^{(2)}(E)$ bestimmt. Für Systeme mit nur einem Elektron war die Bestimmungsgleichung durch (2.107) gegeben. Mit den Feynmanregeln ergeben sich diese Hilfsfunktionen zu

$$\Delta g_{nn}^{(1)}(E) = \frac{1}{(E - E_n(1 - i\epsilon))^2} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle, \quad (3.6)$$

und

$$\Delta g_{nn}^{(2)}(E) = \frac{1}{(E - E_n(1 - i\epsilon))^2} \sum_{n_1} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n_1 \rangle \frac{1}{E - E_{n_1}(1 - i\epsilon)} \langle n_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle, \quad (3.7)$$

wobei der Operator der Ein-Schleifen-Selbstenergie $\hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E)$ bereits in (3.2) definiert wurde. In (3.7) können zwei Fälle in der Summation über n_1 unterschieden werden:

$$n_1 \neq n \quad \text{irreduzibler Fall,}$$

$$n_1 = n \quad \text{reduzibler Fall.} \quad (3.8)$$

Es wurde schon vorweggenommen, daß es sich im 1. Fall um den irreduziblen und im 2. Fall um einen Teil des reduziblen Anteil des Diagramms handelt. Diese Terminologie wird jedoch erst in den folgenden Schritten verständlich. Im Folgenden wird die Notation $\Delta E_n^{(2)}$ in sinnvoller Weise zu $\Delta E_n^{\text{SESE a)}$ geändert, denn es ist klar, daß die Korrektur SESE a) von 2. Ordnung Störungstheorie ist.

Der irreduzible Teil

Wird (3.7) mit der Bedingung $n_1 \neq n$ in den ersten Summanden von (3.5) eingesetzt, so erhält man mit dem Residuensatz

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESE a (irred)}} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE (E - E_n) \frac{1}{(E - E_n(1 - i\epsilon))^2} \\ &\quad \times \sum_{n_1 \neq n} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n_1 \rangle \frac{1}{E - E_{n_1}(1 - i\epsilon)} \langle n_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \\ &= \sum_{n_1 \neq n} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E_n) | n_1 \rangle \frac{1}{E_n - E_{n_1}(1 - i\epsilon)} \langle n_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E_n) | n \rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Der Ausdruck ist offensichtlich keineswegs das Produkt zweier Matrixelemente in 1. Ordnung Störungstheorie, denn es erscheint in der Summe ein Faktor $[E_n - E_{n_1}(1 - i\epsilon)]^{-1}$. Somit ist dieser Teil des Diagramms SESE a) tatsächlich ein sogenannter *irreduzibler Anteil*. Dieser irreduzible Teil des Diagramms SESE a) kann separat ausgewertet werden [96, 97, 98], denn er ist, wie bereits erwähnt wurde, für die Klasse der kovarianten Eichungen invariant (s. [95]) und kann auch separat renormiert werden (d.h. insbesondere ist dieser Teil auch einzeln infrarot konvergent). Solch eine numerische Auswertung wurde, wie bereits erwähnt, 1995 in [96] durchgeführt, und in den Arbeiten [97, 98] wurden die Resultate für wasserstoffartiges Blei und Uran bestätigt. Deshalb ist der irreduzible Anteil des gesamten Diagramms SESE a) nicht Gegenstand der weiteren Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit.

Der reduzible Teil

Betrachtet sei jetzt der reduzible Anteil des Diagramms SESE a). Einsetzen von (3.6) und des Summanden $n_1 = n$ von (3.7) in die Gleichung der Energieverschiebung (3.5) liefert

$$\Delta E_n^{\text{SESEa (red)}} = \Delta E_n^{\text{SESEa (red)A}} + \Delta E_n^{\text{SESEa (red)B}} \quad (3.10)$$

mit

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEa (red)A}} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE (E - E_n) \\ &\quad \times \frac{1}{(E - E_n(1 - i\epsilon))^3} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle^2 \\ &= \frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle^2 \Big|_{E=E_n} \\ &= 2 \left[\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \right] \Big|_{E=E_n} \end{aligned} \quad (3.11)$$

und

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEa (red)B}} &= -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE (E - E_n) \\ &\quad \times \frac{1}{(E - E_n(1 - i\epsilon))^2} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \\ &\quad \times \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \frac{1}{(E - E_n(1 - i\epsilon))^2} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \\ &= - \left[\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \right] \Big|_{E=E_n}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

wobei wieder der Residuensatz für die Integration entlang der Integrationskontur Γ angewendet wurde. Addiert man also beide Beiträge (3.11) und (3.12) entsprechend (3.10) zusammen, so bekommt man schließlich den reduzierbaren Anteil des Diagramms SESE a) zu

$$\Delta E_n^{\text{SESEa (red)}} = \left[\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \right] \Big|_{E=E_n}, \quad (3.13)$$

wobei im ersten Faktor sofort $E = E_n$ gesetzt werden darf. Im zweiten Faktor kann selbstverständlich erst nach Ausführung der Differentiation $E = E_n$ gesetzt werden. Es ist offensichtlich, daß der Ausdruck (3.13) tatsächlich einen sogenannten *reduzierbaren Teil* darstellt, denn er kann als (Differentiation von einem) Produkt zweier Matrixelemente der 1. Ordnung Störungstheorie dargestellt werden. In der Abbildung 3.7 ist das erhaltene Ergebnis auch in der Sprache der Feynman-Diagramme graphisch dargestellt. Für die numerische Auswertung ist die Darstellung (3.13) nicht geeignet. Dazu muss das Matrixelement $\langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle$ umgeschrieben werden. Der Operator der Selbstenergie $\hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E_n)$ war in (3.2) angegeben worden. Hier wird jedoch der allgemeinere Fall $\hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E)$, d.h. den Selbstenergieoperator für beliebige Energie E benötigt. Er lautet

$$\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) = i 4 \pi \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \alpha^\mu S_F(E - E_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \alpha^\nu D_{\mu\nu}(E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (3.14)$$

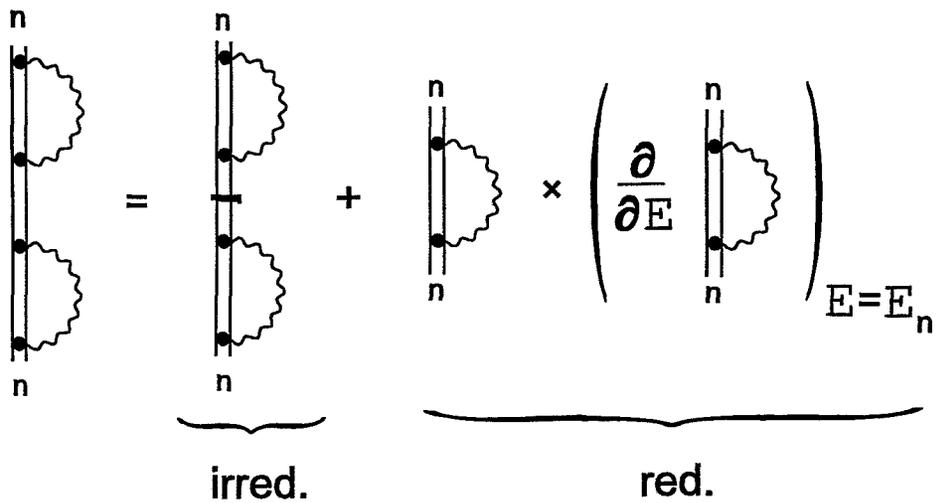


Abbildung 3.7: Das Loop-after-Loop-Diagramm SESE a wird aufgespalten in einen irreduziblen und einen reduzierten Anteil.

Wird nun in (3.14) die explizite Darstellung für den Elektronenpropagator (2.32) und die explizite Darstellung für den Photonpropagator (2.62) eingesetzt, so folgt

$$\begin{aligned}
 \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \Big|_{E=E_n} &= -i \alpha \sum_s \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \\
 &\times \frac{(\varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \alpha_\mu \varphi_s(\mathbf{r}_1)) (\varphi_s^\dagger(\mathbf{r}_2) \alpha^\mu \varphi_n(\mathbf{r}_2)) e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{E_s(1 - i\epsilon) - E + E_1} \Big|_{E=E_n} \\
 &= -i \sum_s \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\langle ns | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | sn \rangle e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} r_{12}}}{E_s(1 - i\epsilon) - E_n + E_1} r_{12}, \quad (3.15)
 \end{aligned}$$

wobei unter s wieder der vollständige Satz der drei Quantenzahlen n_s, κ_s, μ_s zu verstehen ist. Schließlich sei auch das Matrixelement $\left(\frac{\partial}{\partial E} \langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \right)_{E=E_n}$ in expliziter Form angegeben, welches nach Differentiation der vorletzten Zeile von (3.15) nach E folgt zu:

$$\left(\frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}(E) | n \rangle \right)_{E=E_n} = -i \sum_s \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\langle ns | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | sn \rangle e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} r_{12}}}{(E_s(1 - i\epsilon) - E_n + E_1)^2} \frac{r_{12}}{r_{12}}. \quad (3.16)$$

3.2.2 Das Loop-Inside-Loop-Diagramm

Das Loop-Inside-Loop-Diagramm ist in Abbildung 3.8 dargestellt. Das Loop-Inside-Loop-Diagramm der freien QED ist irreduzibel, und deshalb ist auch das entsprechende Diagramm der Bound-State-QED irreduzibel, d.h. es ist sinnvoll, die Gell-Mann-Low-Sucher-Gleichung für irreduzible Diagramme (2.78) als Ausgangspunkt zu verwenden. Da es sich in

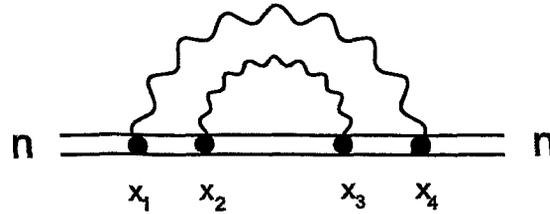


Abbildung 3.8: Das Loop-inside-Loop-Diagramm SESE b.

solchen Fällen um eine einfache Anwendung der Feynman'schen Regeln für die nichtadiabatische S-Matrix handelt, soll gleich dieser Ausdruck angegeben werden:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_n^{\text{SESEb}} &= (4\pi\alpha)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \int d^3\mathbf{r}_3 \int d^3\mathbf{r}_4 \\
 &\quad \times \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_4) \alpha^\mu S_F(E_n - E_1, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_3) \alpha^\alpha S_F(E_n - E_1 - E_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) \\
 &\quad \times \alpha^\beta S_F(E_n - E_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \alpha^\nu \varphi_n(\mathbf{r}_1) \\
 &\quad \times D_{\mu\nu}(E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) D_{\alpha\beta}(E_2, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2). \tag{3.17}
 \end{aligned}$$

In derselben Notation, welche in (3.15) definiert wurde, lautet diese Energieverschiebung nach Einsetzen der expliziten Ausdrücke für den gebundenen Elektronenpropagator und Photonpropagator:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_n^{\text{SESEb}} &= \alpha^2 \sum_{r,s,t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{14}}}{r_{14}} \frac{e^{i\sqrt{E_2^2+i\epsilon} r_{23}}}{r_{23}} \\
 &\quad \times \langle nr | \alpha_\mu(4) \alpha^\mu(1) | tn \rangle \langle ts | \alpha_\nu(3) \alpha^\nu(2) | sr \rangle \\
 &\quad \times \frac{1}{(E_t(1-i\epsilon) - E_n + E)(E_s(1-i\epsilon) - E_n + E_1 + E_2)(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)}. \tag{3.18}
 \end{aligned}$$

Wiederum bezeichnet hier jede der Quantenzahlen r, s, t den vollständigen Satz von jeweils drei Quantenzahlen, so daß in diesem Diagramm neben zwei Energieintegrationen und vier Raumintegrationen auch eine Summation/Integration über insgesamt neun Quantenzahlen auszuführen ist. Darin liegt eine der wesentlichsten Schwierigkeiten bei der Auswertung der Zwei-Photonen-Selbstenergie.

3.2.3 Das Loop-Crossed-Loop-Diagramm

Das Loop-Crossed-Loop-Diagramm ist in Abbildung 3.9 dargestellt. Ebenso wie das Loop-Inside-Loop-Diagramm handelt es sich bei dem Loop-Crossed-Loop-Graphen um ein irreduzibles Diagramm, so daß die Herleitung des expliziten mathematischen Ausdrucks mit

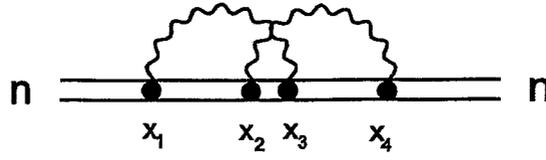


Abbildung 3.9: Das Loop-crossed-Loop-Diagramm SESE c.

Hilfe von (2.78), d.h. der nichtadiabatischen S-Matrix, erfolgen kann. Das Resultat lautet

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{\text{SESE}c} &= (4\pi\alpha)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \int d^3\mathbf{r}_3 \int d^3\mathbf{r}_4 \\
&\times \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_4) \alpha^\mu S_F(E_n - E_2, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_3) \alpha^\alpha S_F(E_n - E_1 - E_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) \\
&\times \alpha^\nu S_F(E_n - E_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \alpha^\beta \varphi_n(\mathbf{r}_1) \\
&\times D_{\mu\nu}(E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) D_{\alpha\beta}(E_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4). \tag{3.19}
\end{aligned}$$

Unter Verwendung der expliziten Darstellungen für den gebundenen Elektronenpropagator und den Photonpropagator kann die Energieverschiebung umgeschrieben werden zu:

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{\text{SESE}c} &= \alpha^2 \sum_{r,s,t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\
&\times \langle ns | \alpha_\mu(3) \alpha^\mu(1) | tr \rangle \langle tr | \alpha_\nu(4) \alpha^\nu(2) | sn \rangle \frac{e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} r_{13}}}{r_{13}} \frac{e^{i\sqrt{E_2^2 + i\epsilon} r_{24}}}{r_{24}} \\
&\times \frac{1}{(E_i(1 - i\epsilon) - E_n + E_2)(E_s(1 - i\epsilon) - E_n + E_1 + E_2)(E_r(1 - i\epsilon) - E_n + E_1)}, \tag{3.20}
\end{aligned}$$

wobei ebenso wie im Loop-Inside-Loop-Diagramm eine Summation/Integration über neun Quantenzahlen und zwei Energie- und vier Raumintegrationen auszuführen sind.

3.3 Renormierung der Zwei-Photonen-Selbstenergie

Die in dem vorhergehenden Abschnitt hergeleiteten formalen Ausdrücke der Zwei-Photonen-Selbstenergie sind divergent. Das Problem unendlicher Größen in der freien QED überträgt sich natürlich auf die QED mit äußeren Quellströmen. Die Renormierungstheorie ist zudem nur für die freie QED definiert. Die Theorie der Renormierung der Bound-State-QED kann jedoch auf die Renormierungstheorie der freien QED zurückgeführt werden. Dies geschieht mit der Potentialentwicklung des gebundene Elektronenpropagators (s. Kap. 2.3). Dadurch ist es möglich, die Divergenzen vom Bound-State-Diagramm abzuspalten und anschließen zu renormieren. Die Herleitung eines renormierten Ausdrucks der Zwei-Photonen-Selbstenergie erfolgte erstmalig in der Arbeit [113] (1996) durch *Labzowsky* und *Mitrushenkov*. Ein allgemeineres Renormierungsschema für Selbstenergien gebundener Zustände in beliebiger Ordnung Störungstheorie wurde durch *Lindgren*, *Persson*, *Salomonson* und *Sunnergren* in [114] (1998) angegeben. Dieser Abschnitt folgt weitestgehend [113], jedoch wird dabei die BPHZ-Renormierung der QED angewendet.

3.3.1 Die Selbstenergie 1. Ordnung eines gebundenen Elektrons

Betrachtet sei zuerst der einfachste Fall, nämlich die Selbstenergie 1. Ordnung eines gebundenen Elektrons, welches sich in einem Quantenzustand $|n\rangle$ befinden möge. Aufgrund des reduzierbaren Anteils des Diagramms Loop-After-Loop ist dieses Diagramm Bestandteil der Zwei-Photonen-Selbstenergie. Wird die Potentialentwicklung eines gebundenen Elektrons, d.h. (2.114) zusammen mit (2.109) (s.a. die Abbildung 2.6) direkt in die Selbstenergie eines gebundenen Elektrons eingesetzt, so ergibt sich

$$\Delta E_n^{\text{SE}} = \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E) | n \rangle \Big|_{E=E_n} = \left[\Delta E_n^{\text{SE(A)}} + \Delta E_n^{\text{SE(B)}} + \Delta E_n^{\text{SE(C)}} \right] \Big|_{E=E_n}. \quad (3.21)$$

Es ist sinnvoll, die Renormierung für zunächst beliebige Energie E zu betrachten und erst am Ende den Limes $E \rightarrow E_n$ durchzuführen. Der renormierte Ausdruck für die Selbstenergie eines gebundenen Elektrons in 1. Ordnung Störungstheorie lautet dann

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SE,ren}} &= \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE,ren}}(E) | n \rangle \Big|_{E=E_n} \\ &= \left[\Delta E_n^{\text{SE(A),ren}} + \Delta E_n^{\text{SE(B),ren}} + \Delta E_n^{\text{SE(C)}} \right] \Big|_{E=E_n}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

wobei schon beachtet wurde, daß $\Delta E_n^{\text{SE(C)}}$ konvergent ist und deshalb nicht renormiert wird. Diese Konvergenz von $\Delta E_n^{\text{SE(C)}}$ wird weiter unten diskutiert. Die Potentialentwicklung der Selbstenergie 1. Ordnung ist in Abbildung 3.10 graphisch dargestellt. Das Diagramm A wird als zero-potential-term bezeichnet und ist die bekannte Selbstenergie 1. Ordnung Störungstheorie der *freien QED*, wobei aber das Matrixelement durch den gebundenen Zustand $|n\rangle$ gebildet wird. Somit folgt im Energie-Orts-Raum

$$\Delta E_n^{\text{SE(A)}} = \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p}) | n \rangle \quad \text{mit} \quad \not{p} = \gamma_0 E - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p}. \quad (3.23)$$

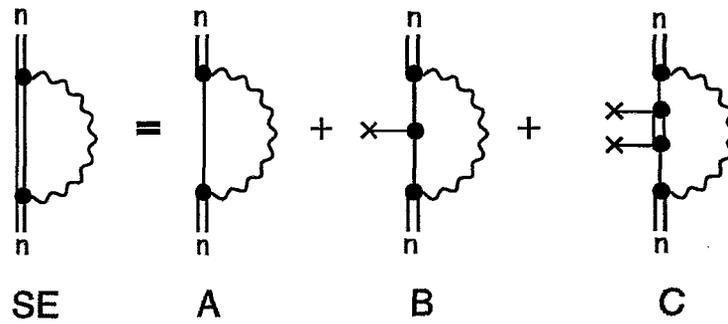


Abbildung 3.10: Die Potentialentwicklung der Selbstenergie eines gebundenen Elektrons in 1. Ordnung Störungstheorie. Die Linien mit einem Kreuz bezeichnen die Wechselwirkung mit dem Coulombfeld des Atomkerns.

Diagramm B wird als one-potential-term bezeichnet und enthält die Vertexkorrektur in 1. Ordnung Störungstheorie der *freien QED*, wobei wieder das Matrixelement des Operators als Matrixelement zwischen zwei gebundenen Zuständen $|n\rangle$ zu verstehen ist, d.h.

$$\Delta E_n^{\text{SE(B)}} = \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)}(\not{p}_1, \not{p}_2, k) | n \rangle \quad \text{mit} \quad \not{p}_1 = \gamma_0 E - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p}_1, \not{p}_2 = \gamma_0 E - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p}_2. \quad (3.24)$$

Zu beachten ist hierbei, daß der Zustand $\langle n |$ den Viererimpuls (E, \mathbf{p}_1) und der Zustand $|n\rangle$ den Viererimpuls (E, \mathbf{p}_2) (mit $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_1 - \mathbf{k}$) trägt. Gleichzeitig wurde folgende Notation vereinbart

$$\hat{V} \equiv \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k}), \quad (3.25)$$

wobei die Funktion $V(\mathbf{k})$ die Fouriertransformierte des Kernpotentials $V(\mathbf{r})$ ist, d.h., es gilt:

$$V(\mathbf{k}) = \int d^3 \mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (3.26)$$

Für Punktkerne gilt beispielsweise

$$V(\mathbf{r}) = -e \frac{1}{4\pi r} \quad \text{mit} \quad r = |\mathbf{r}| \quad \longrightarrow \quad V(\mathbf{k}) = e \frac{1}{k^2} \quad \text{mit} \quad k = |\mathbf{k}|. \quad (3.27)$$

Das Diagramm C ist der sogenannte many-potential-term. Durch eine weitere Potentialentwicklung des gebundenen Elektronenpropagators in diesem Diagramm wird klar, daß alle weiteren Diagramme einen negativen oberflächlichen Divergenzgrad ω aufweisen würden, und deshalb sind sie alle, d.h. insbesondere auch C selbst, konvergent. Für dieses Diagramm sei die naheliegende Notation

$$\Delta E_n^{\text{SE(C)}} = \langle n | \gamma_0 \hat{M} \hat{P} | n \rangle \quad (3.28)$$

vereinbart. Betrachtet sei nun die Renormierung der divergierenden Energien $\Delta E_n^{\text{SE(A)}}$ und $\Delta E_n^{\text{SE(B)}}$. Die darin auftretenden Operatoren $\hat{\Sigma}^{(1)}$ und $\hat{\Lambda}_0^{(1)}$ wurden bereits in (2.163) bzw. (2.172) renormiert, (s.a. Abbildung 2.15). Werden also die renormierten Ausdrücke (2.163) und (2.172) in (3.23) und (3.24) eingesetzt, so folgt unmittelbar

$$\Delta E_n^{\text{SE(A),ren}} = \Delta E_n^{\text{SE(A)}} - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle - \Sigma^{(1)'} \langle n | \gamma_0 (\not{p} - m) | n \rangle \quad (3.29)$$

und

$$\Delta E_n^{\text{SE(B),ren}} = \Delta E_n^{\text{SE(B)}} - \Lambda^{(1)} \langle n | \underbrace{\gamma_0 \gamma_0}_{\mathbf{1}} \hat{V} | n \rangle. \quad (3.30)$$

Eine Zusammenfassung von (3.28), (3.29) und (3.30) impliziert selbstverständlich entsprechend (3.21) auch eine Rückentwicklung der Potentialentwicklung. Insgesamt bekommt man also zunächst

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SE,ren}} &= \left[\Delta E_n^{\text{SE(A),ren}} + \Delta E_n^{\text{SE(B),ren}} + \Delta E_n^{\text{SE(C)}} \right] \Big|_{E=E_n} \\ &= \left[\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E) | n \rangle - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \right. \\ &\quad \left. - \Sigma^{(1)'} \langle n | \gamma_0 (\not{p} - m) | n \rangle - \Lambda^{(1)} \langle n | \hat{V} | n \rangle \right] \Big|_{E=E_n} \quad \text{mit } \not{p} = \gamma_0 E - \boldsymbol{\gamma} \boldsymbol{p}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Dieser Ausdruck läßt sich jedoch noch vereinfachen, wenn jetzt der Limes $E \rightarrow E_n$ vollzogen wird. Dann gilt nämlich

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SE,ren}} &= \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E_n) | n \rangle - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \\ &\quad - \Sigma^{(1)'} \langle n | \gamma_0 (\not{p} - m) | n \rangle - \Lambda^{(1)} \langle n | \hat{V} | n \rangle \quad \text{mit } \not{p} = \gamma_0 E_n - \boldsymbol{\gamma} \boldsymbol{p}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Unter Verwendung der aus der Wardidentität folgenden Beziehung $\Sigma^{(1)'} = -\Lambda^{(1)}$ (2.173) und der Diracgleichung im Impulsraum (zu beachten sei dabei die Bemerkung unmittelbar nach Gleichung (3.24) bezüglich der Impulse der Zustände $\langle n |$ und $| n \rangle$)

$$\gamma_0 (\not{p} - m) | n \rangle = \hat{V} | n \rangle \quad \text{mit } \not{p} = \gamma_0 E_n - \boldsymbol{\gamma} \boldsymbol{p}, \quad (3.33)$$

folgt unmittelbar

$$\Delta E_n^{\text{SE,ren}} = \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle. \quad (3.34)$$

Diese Gleichung stellt den renormierten Ausdruck der Selbstenergie in 1. Ordnung Störungstheorie eines gebundenen Elektrons im Zustand $| n \rangle$ dar und ist graphisch dargestellt in der Abbildung 3.11.

3.3.2 Der reduzible Anteil des Loop-After-Loop-Diagramms

Um den renormierten Ausdruck des reduzierten Anteils zu bestimmen, genügt es entsprechend (3.13), nur den Ableitungsterm zu betrachten, denn die Renormierung der 1. Ordnung Selbstenergie eines gebundenen Elektrons wurde bereits in dem vorhergehenden Abschnitt diskutiert. Der Ableitungsterm war definiert als

$$\left[\frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E) | n \rangle \right] \Big|_{E=E_n}. \quad (3.35)$$

An dieser Stelle ist jedoch etwas Sorgfalt notwendig, denn man darf nicht den renormierten Ausdruck (3.34) verwenden. Da im Ableitungsterm nach der Energie E differenziert wird,

$$\Delta E_n^{\text{SE,ren}} = \text{Diagram 1} - \text{Diagram 2}$$

SE

Abbildung 3.11: Die graphische Darstellung der renormierten Selbstenergie eines gebundenen Elektrons im Zustand $|n\rangle$.

muss der allgemeinere Fall betrachtet werden, in welchem die Energie $E \neq E_n$, d.h. vollkommen beliebig ist. Deshalb ist der Ausgangspunkt (3.31). Die Zustände $|n\rangle$ als auch die Renormierungskonstanten $\Sigma^{(1)}$, $\Sigma^{(1)'}$ und $\Lambda^{(1)}$ sind von der Energie E unabhängig. Jedoch der Viererimpuls p ist jetzt wieder gegeben durch

$$p = (E, \mathbf{p}) \quad \text{also} \quad \not{p} = \gamma_0 E - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p}. \quad (3.36)$$

Deshalb ergibt die Differentiation nach E

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial E} \Sigma^{(1)'} \langle n | \gamma_0 (\not{p} - m) | n \rangle &= \Sigma^{(1)'} \frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 (\gamma_0 E - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p} - m) | n \rangle \\ &= \Sigma^{(1)'} \underbrace{\langle n | n \rangle}_1. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Mit dieser Gleichung folgt also zusammen mit (3.34) der renormierte Ausdruck des reduzierten Anteils des Loop-After-Loop-Diagramms. Er lautet

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEa(red),ren}} &= \left(\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E_n) | n \rangle - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \right) \\ &\quad \times \left[\left(\frac{\partial}{\partial E} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E) | n \rangle \right) \Big|_{E=E_n} - \Sigma^{(1)'} \right], \end{aligned} \quad (3.38)$$

und ist graphisch dargestellt in Abbildung 3.12.

$$\Delta E_n^{\text{SESEa(red),ren}} = \left[\text{Diagram 1} - \Sigma^{(1)} \times \left[\left(\frac{\partial}{\partial E} \text{Diagram 2} \right) \Big|_{E=E_n} - \Sigma^{(1)'} \right] \right]$$

Abbildung 3.12: Die graphische Darstellung des renormierten Ausdrucks des reduzierten Anteils des Loop-After-Loop-Diagramms.

3.3.3 Das Loop-Inside-Loop-Diagramm

Um das Loop-After-Loop-Diagramm zu renormieren, muss zunächst wieder eine Potentialentwicklung durchgeführt werden. Solch eine Potentialentwicklung ist nicht eindeutig. Einzig die abgespaltenen Divergenzen und ihre Gegenterme sind eindeutig. Eine sehr zweckmäßige Potentialentwicklung ist in Abbildung 3.13 graphisch dargestellt. Der oberflächliche Di-

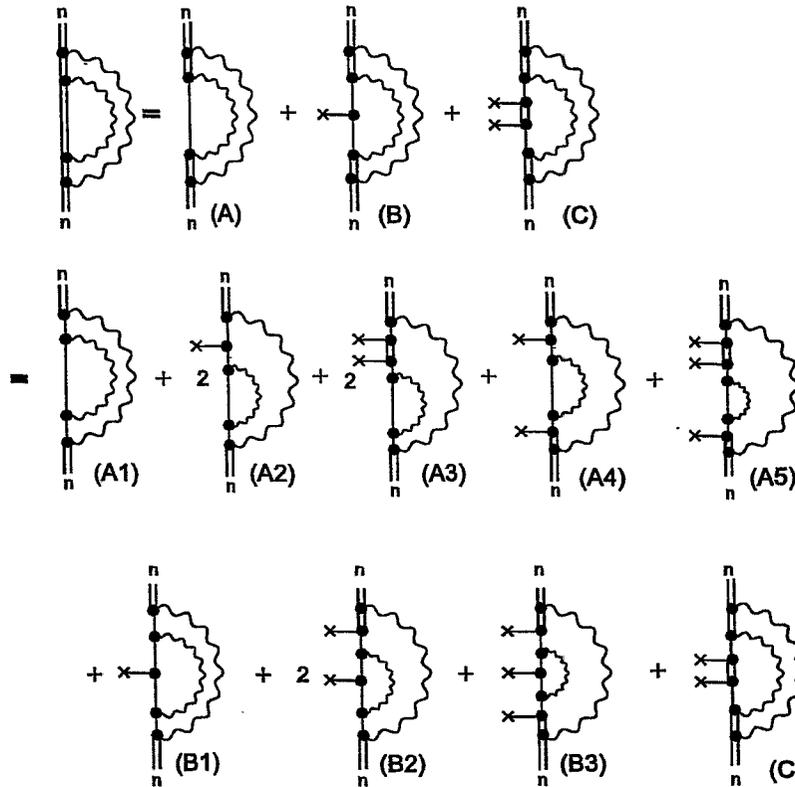


Abbildung 3.13: Die Potentialentwicklung des Loop-After-Loop-Diagramms. Die Linien mit einem Kreuz bezeichnen wieder die Wechselwirkung mit dem Coulombfeld des Atomkerns.

vergenzgrad des Diagramms C ist negativ, da eine Potentialentwicklung des vollen Elektronenpropagators Diagramme mit genau zwei äußeren fermionischen und mindestens zwei äußeren bosonischen Beinen ergeben würde. Im folgenden wird in solchen Fällen zweckmäßigerweise vereinbart, von zwei äußeren fermionischen und zwei äußeren bosonischen Beinen zu sprechen, so daß $\omega(C) = -1$ definiert wird. Es existieren in C auch keine divergenten Unterdiagramme, so daß dieses Diagramm konvergent ist.

Renormierung der Diagramme (A3), (A4), (A5), (B2) und (B3)

Die Renormierung der Diagramme (A3), (A4), (A5), (B2) und (B3) gestaltet sich einfacher, denn in diesen Diagrammen ist der oberflächliche Divergenzgrad ω negativ, so daß eine äußere Renormierung entsprechend der Bogoljubov'schen \mathcal{R} -Operation im Rahmen der BPHZ-Renormierung nicht erforderlich ist. In den Diagrammen (A3), (A4) und (A5) befindet sich das divergente Unterdiagramm der Ein-Schleifen-Selbstenergie und in den Diagrammen (B2)

und (B3) befindet sich das divergente Unterdiagramm der Ein-Schleifen-Vertexkorrektur. Somit kann die Renormierung dieser Diagramme wie in Abbildung 3.14 dargestellt werden.

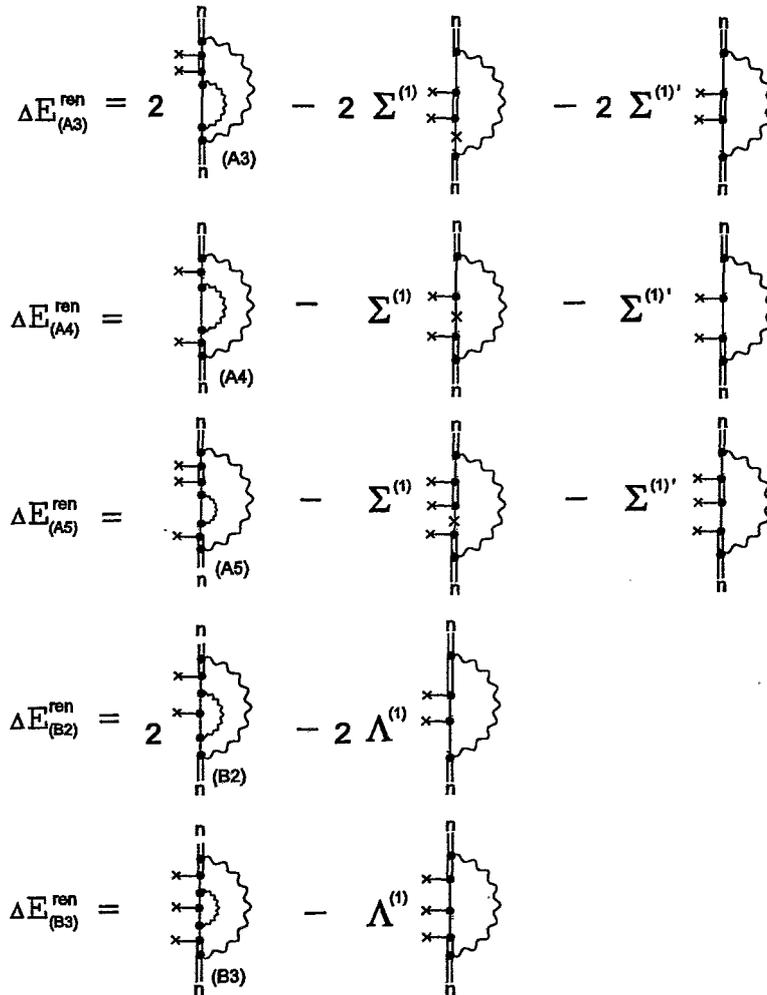


Abbildung 3.14: Die Renormierung der Diagramme (A3), (A4), (A5), (B2) und (B3). Diese Diagramme erfordern nur eine innere Renormierung.

Renormierung des Diagramms (A1)

Bei diesem Graphen muss tatsächlich eine innere und eine äußere Renormierung durchgeführt werden. Dabei wird die Methode der BPHZ-Renormierung angewendet. Die Begriffe *innere Renormierung* und *äußere Renormierung* wurden im Abschnitt 2.4.3 definiert, jedoch werden in diesem Kapitel alle Gegenterme als Gegenterme der inneren und als Gegenterme der äußeren Renormierung explizit kenntlich gemacht. Dieses Vorgehen erlaubt einen besseren Vergleich mit der in der physikalischen Literatur verwendeten Renormierungsprozedur der inneren/äußeren Renormierung. Das Diagramm (A1) ist in Abbildung 3.15 dargestellt. Das gesamte Diagramm (A1) ohne die äußeren Zustände $|n\rangle$ wurde als Γ bezeichnet und das Unterdiagramm als γ . Die unrenormierte Energieverschiebung des Diagramms (A1) läßt sich

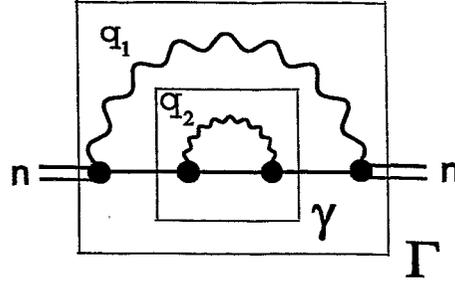


Abbildung 3.15: Das Feynman-Diagramm Γ und das Unterdiagramm γ der unrenormierten Energieverschiebung $\Delta E_n^{(A1), \text{unren}}$.

im Impulsraum ausdrücken als

$$\Delta E^{(A1), \text{unren}} = \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(A1)} | n \rangle, \quad (3.39)$$

wobei über alle Impulse p des äußeren Zustandes $|n\rangle$ integriert wird. Der mathematische Ausdruck des gesamten Feynman-Diagramms Γ ist dann eine Funktion dieser Impulse p und lautet

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}^{(A1)}(p) &= -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma(p, \not{q}_1, \not{q}_2), \\ \hat{I}_\Gamma(p, \not{q}_1, \not{q}_2) &= \gamma_\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \underbrace{\left(\gamma_\nu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon} \right)}_{\hat{I}_\gamma} \\ &\quad \times \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{q}_1^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Der äußere Impuls bezüglich \hat{I}_Γ ist p . Der renormierte Ausdruck des Diagramms (A1) ist gegeben durch

$$\hat{\Sigma}^{(A1), \text{ren}}(p) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma(p, \not{q}_1, \not{q}_2), \quad (3.41)$$

wobei die Bogoljubov'sche \mathcal{R} -Operation den Ausdruck

$$\hat{R}_\Gamma = (1 - t^\Gamma) \hat{R}_\Gamma \quad \text{mit} \quad \hat{R}_\Gamma = \hat{I}_\Gamma + \hat{I}_{\Gamma/\gamma}(-t^\Gamma) \hat{I}_\gamma$$

also

$$\hat{R}_\Gamma = \underbrace{\hat{I}_\Gamma - t^\Gamma \hat{I}_\Gamma + t^\Gamma [\hat{I}_{\Gamma/\gamma}(t^\Gamma \hat{I}_\gamma)]}_{\text{äußere Ren.}} \underbrace{- \hat{I}_{\Gamma/\gamma}(t^\Gamma \hat{I}_\gamma)}_{\text{innere Ren.}} \quad (3.42)$$

liefert. Die mathematische Darstellung der Integranden ist dabei

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\Gamma/\gamma} &= \gamma_\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{q}_1^2 + i\epsilon}, \\ &\quad \text{äußerer Impuls: } p \\ \hat{I}_\gamma &= \gamma_\nu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon} \\ &\quad \text{äußerer Impuls: } p - q_1. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Die Tayloroperatoren t^{Γ} und t^{γ} wirken beide bis einschließlich 1. Ordnung, denn die oberflächlichen Divergenzgrade sind

$$\begin{aligned}\omega(\Gamma) &= 1, \\ \omega(\gamma) &= 1.\end{aligned}\tag{3.44}$$

Dementsprechend gibt es offensichtlich genau sechs Gegenterme der *äußeren Renormierung* und auch genau zwei Gegenterme der *inneren Renormierung*. Setzt man nun die Taylorentwicklung (2.155), unter Beachtung des Begriffs *äußerer Impuls*, in (3.42) ein, so folgt der renormierte Ausdruck zu

$$\begin{aligned}\Delta E^{(A1),\text{ren}} &= \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(A1)} | n \rangle \\ &+ \langle n | \gamma_0 | n \rangle (-\Sigma^{(A1)} + \Sigma^{(1)} \tilde{\Sigma}^{(1)} + \Sigma^{(1)} \Sigma^{(1)'}) \\ &+ \langle n | \hat{V} | n \rangle (-\Sigma^{(A1)'} + \Sigma^{(1)} \tilde{\Sigma}^{(1)'} + (\Sigma^{(1)'})^2) \\ &- \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle - \Sigma^{(1)'} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle.\end{aligned}\tag{3.45}$$

Dabei wurde die Diracgleichung im Impulsraum (3.33) verwendet. Die Gegenterme in (3.45) lauten explizit:

$$\begin{aligned}\Sigma^{(A1)} &\equiv \hat{\Sigma}^{(A1)}(\not{p}) \Big|_{\not{p}=m}, \\ \gamma_{\alpha} \Sigma^{(A1)'} &\equiv \frac{\partial}{\partial p^{\alpha}} \hat{\Sigma}^{(A1)}(\not{p}) \Big|_{\not{p}=m}, \\ \tilde{\Sigma}^{(1)} &\equiv \hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p}) \Big|_{\not{p}=m}, \\ \gamma_{\alpha} \tilde{\Sigma}^{(1)'} &\equiv \frac{\partial}{\partial p^{\alpha}} \hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p}) \Big|_{\not{p}=m}.\end{aligned}\tag{3.46}$$

Die Gegenterme $\Sigma^{(1)}$ und $\Sigma^{(1)'}$ wurden bereits im Abschnitt 2.4 definiert. Der mathematische Ausdruck für $\hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p})$ kann aus $\hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p})$ erhalten werden durch die Ersetzung

$$1/(\not{p} - \not{q} - m + i\epsilon) \longrightarrow 1/(\not{p} - \not{q} - m + i\epsilon)^2\tag{3.47}$$

in $\hat{\Sigma}^{(1)}(\not{p})$, (s. $\hat{I}_{\Gamma/\gamma}$ in (3.43)).

Renormierung des Diagramms (A2)

Dieses Diagramm erfordert ebenfalls eine innere und eine äußere Renormierung. Die unrenormierte Energieverschiebung dieses Diagramms lautet im Impulsraum

$$\Delta E^{(A2),\text{unren}} = 2 \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(A2)} | n \rangle.\tag{3.48}$$

Das Diagramm (A2) ist in Abbildung 3.16 dargestellt. Das Unterdiagramm γ ist wieder die Ein-Schleifen-Selbstenergie. Wieder wird über alle äußeren Impulse p_1 integriert. Die Wechselwirkung mit dem Kernpotential \hat{V} trägt einen Impuls k weg, und deshalb ändern

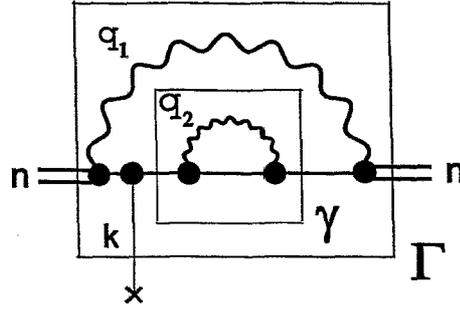


Abbildung 3.16: Das Feynman-Diagramm Γ und das Unterdiagramm γ der unrenormierten Energieverschiebung $\Delta E_n^{(A2), \text{unren}}$.

sich die Impulse p_1 zu $p_2 = p_1 - k$. Somit muss der Operator $\hat{\Lambda}_0^{(A2)}$ von zwei äußeren Impulsen p_1, p_2 abhängen und ist explizit gegeben durch

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_0^{(A2)}(p_1, p_2) &= -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma(p_1, p_2, \not{q}_1, \not{q}_2), \\ \hat{I}_\Gamma(p_1, p_2, \not{q}_1, \not{q}_2) &= \gamma^\mu \frac{1}{\not{p}_1 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^0 \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \\ &\quad \times \underbrace{\left(\gamma_\nu \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon} \right)}_{\hat{I}_\gamma} \\ &\quad \times \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{q}_1^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Die Vorgehensweise bei der Renormierung dieses Diagramms unterscheidet sich nur unwesentlich von der Renormierung des zuvor behandelten Diagramms (A1). Insbesondere ist der renormierte Operator analog definiert

$$\hat{\Lambda}_0^{(A2), \text{ren}}(p_1, p_2) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma(p_1, p_2, \not{q}_1, \not{q}_2), \quad (3.50)$$

und es gilt wieder die Formel (3.42). Für das Diagramm (A2) lauten die expliziten Ausdrücke jedoch jetzt

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\Gamma/\gamma} &= \gamma^\mu \frac{1}{\not{p}_1 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^0 \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{q}_1^2 + i\epsilon}, \\ &\quad \text{äußere Impulse: } p_1, p_2 \\ \hat{I}_\gamma &= \gamma_\nu \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon}. \\ &\quad \text{äußerer Impuls: } p_2 - q_1 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Zu beachten ist außerdem, daß die oberflächlichen Divergenzgrade gegeben sind durch

$$\begin{aligned} \omega(\Gamma) &= 0, \\ \omega(\gamma) &= 1, \end{aligned} \quad (3.52)$$

so daß der Tayloroperator t^Γ nur bis zur 0. Ordnung, aber t^γ bis zur 1. Ordnung wirkt. Somit ergeben sich durch die *äußere Renormierung* genau drei Gegenterme, und aus der *inneren Renormierung* folgen zwei Gegenterme. Insgesamt lautet der renormierte Ausdruck

$$\begin{aligned} \Delta E^{(A2), \text{ren}} &= 2\langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(A2)} | n \rangle \\ &\quad - 2\Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{\hat{}}^{(1)} | n \rangle - 2\Sigma^{(1)'} \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)} | n \rangle \\ &\quad + 2\langle n | \hat{V} | n \rangle (-\Lambda^{(A2)} + \Sigma^{(1)} \tilde{\Lambda}^{(1)} + \Sigma^{(1)'} \Lambda^{(1)}), \end{aligned} \quad (3.53)$$

wobei analog zum Diagramm (A1) der Operator $\hat{\Lambda}_0$ aus dem Operator $\hat{\Lambda}_0^{(1)}$ durch die Ersetzung

$$1/(\not{p} - \not{k} - m + i\epsilon) \rightarrow 1/(\not{p} - \not{k} - m + i\epsilon)^2 \quad (3.54)$$

erhalten werden kann. Der Gegenterm $\Lambda^{(1)}$ wurde in Abschnitt 2.4 definiert, und die anderen beiden Gegenterme lauten

$$\begin{aligned} \gamma_0 \Lambda^{(A2)} &= \hat{\Lambda}_0^{(A2)}(\not{p}_1, \not{p}_2) \Big|_{\not{p}_1 = \not{p}_2 = m}, \\ \gamma_0 \tilde{\Lambda}^{(1)} &= \hat{\Lambda}_0^{\hat{}}^{(1)}(\not{p}_1, \not{p}_2) \Big|_{\not{p}_1 = \not{p}_2 = m}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Renormierung des Diagramms (B1)

Auch bei diesem Diagramm muss eine innere und eine äußere Renormierung vorgenommen werden. Das Diagramm (B1) ist in der Abbildung 3.17 dargestellt. Die unrenormierte Ener-

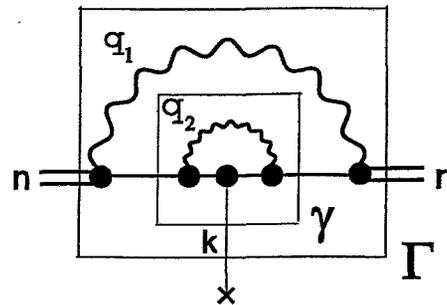


Abbildung 3.17: Das Feynman-Diagramm Γ und das Unterdiagramm γ der unrenormierten Energieverschiebung $\Delta E_n^{(B1), \text{unren}}$.

gieverschiebung dieses Diagramms lautet

$$\Delta E^{(B1) \text{ unren}} = \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(B1)} | n \rangle. \quad (3.56)$$

Der Operator $\hat{\Lambda}_0^{(B1)}$ ist wieder eine Funktion der äußeren Impulse $p_1, p_2 = p_1 - k$ und dabei wie folgt definiert

$$\hat{\Lambda}_0^{(B1)}(\not{p}_1, \not{p}_2) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma(\not{p}_1, \not{p}_2, \not{q}_1, \not{q}_2),$$

$$\begin{aligned}
\hat{I}_\Gamma(p_1, p_2, k_1, k_2) &= \gamma_\mu \frac{1}{p_1 - k_1 - m + i\epsilon} \\
&\times \underbrace{\left(\gamma_\nu \frac{1}{p_1 - k_1 - k_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{p_2 - k_1 - k_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \right)}_{\hat{I}_\gamma} \\
&\times \frac{1}{p_2 - k_1 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon}. \tag{3.57}
\end{aligned}$$

Die BPHZ-Renormierung des Diagramms (B1) erfolgt analog wie in den zuvor diskutierten Graphen. Ähnlich wie in den Betrachtungen zuvor, ist der renormierte Ausdruck gegeben durch

$$\hat{\Lambda}^{(B1),\text{ren}}(p_1, p_2) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma(p_1, p_2, k_1, k_2), \tag{3.58}$$

und es gilt auch wieder die Formel (3.42). In diesem Diagramm lauten die mathematischen Ausdrücke aber jetzt

$$\begin{aligned}
\hat{I}_{\Gamma/\gamma} &= \gamma_\mu \frac{1}{p_1 - k_1 - m + i\epsilon} \frac{1}{p_2 - k_1 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{q_1^2 + i\epsilon}, \\
&\text{äußere Impulse: } p_1, p_2, \\
\hat{I}_\gamma &= \gamma_\nu \frac{1}{p_1 - k_1 - k_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{p_2 - k_1 - k_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon}, \\
&\text{äußerer Impuls: } p_2 - q_1 \tag{3.59}
\end{aligned}$$

und die oberflächlichen Divergenzgrade sind

$$\begin{aligned}
\omega(\Gamma) &= 0, \\
\omega(\gamma) &= 0, \tag{3.60}
\end{aligned}$$

so daß die Tayloroperatoren t^Γ und t^γ nur bis zur 0. Ordnung wirken. Deshalb sind entsprechend (3.42) nur zwei Gegenterme von der äußeren Renormierung und nur ein Gegenterm von der inneren Renormierung zu erwarten. Der Ausdruck für die renormierte Energieverschiebung lautet demnach

$$\Delta E^{(B1)\text{ren}} = \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(B1)} | n \rangle - \Lambda^{(1)} \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)} | n \rangle + \langle n | \hat{V} | n \rangle \left(-\Lambda^{(B1)} + (\Lambda^{(1)})^2 \right). \tag{3.61}$$

In diesem renormierten Energieausdruck erscheint nur ein neuer Gegenterm, welcher analog zu den vorhergehenden Fällen wie folgt definiert ist:

$$\gamma_0 \Lambda^{(B1)} = \hat{\Lambda}_0^{(B1)}(p_1, p_2) \Big|_{p_1=p_2=m}. \tag{3.62}$$

Die Gleichungen (3.45), (3.53) und (3.61) bilden zusammen mit den Gegentermen in der Abbildung (3.14) den renormierten Ausdruck des Loop-Inside-Loop-Diagramms.

Zusammenfassung der Gegenterme des Loop-Inside-Loop-Diagramms

Bei der Zusammenfassung der Gegenterme des Loop-Inside-Loop-Diagramms geht man wie folgt vor:

Zuerst betrachtet man die Terme GT_A^{lii} proportional $\langle n|\hat{V}|n\rangle$, welche in (3.45), (3.53) und (3.61) erscheinen. Sie lauten

$$\begin{aligned} GT_A^{\text{lii}} &\equiv \langle n|\hat{V}|n\rangle \left(-\Sigma^{(A1)'} + \Sigma^{(1)}\tilde{\Sigma}^{(1)'} + (\Sigma^{(1)'})^2 \right) \\ &\quad + \langle n|\hat{V}|n\rangle \left(-2\Lambda^{(A2)} + 2\Sigma^{(1)}\tilde{\Lambda}^{(1)} + 2\Sigma^{(1)'}\Lambda^{(1)} \right) \\ &\quad + \langle n|\hat{V}|n\rangle \left(-\Lambda^{(B1)} + (\Lambda^{(1)})^2 \right). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Mit den aus der Ein-Schleifen- und Zwei-Schleifen-Wardidentität folgenden Relationen

$$\begin{aligned} \Sigma^{(1)'} &= -\Lambda^{(1)} \quad \text{Ein-Schleifen-Wardidentität,} \\ \Sigma^{(A1)'} &= -\Lambda^{(B1)} - 2\Lambda^{(A2)} \quad \text{Zwei-Schleifen-Wardidentität} \end{aligned} \quad (3.64)$$

und der ebenfalls durch explizites Berechnen beweisbaren Identität "Ein-Schleifen-Wardidentität"

$$\tilde{\Sigma}^{(1)'} = -2\tilde{\Lambda}^{(1)}, \quad (3.65)$$

sieht man, daß sich alle Terme in (3.63) gegenseitig wegheben. Somit existieren keine Terme, welche proportional zu $\langle n|\hat{V}|n\rangle$ wären.

Die Zusammenfassung der verbleibenden Terme ist etwas schwieriger, und es erscheint deshalb sinnvoll, auf die Feynman'sche Diagrammtechnik zurückzugreifen. Betrachtet seien zunächst die Terme GT_B^{lii} , welche proportional zu $\Sigma^{(1)'}$ und $\Lambda^{(1)}$ in (3.45), (3.53) und (3.61) sind. Sie lauten

$$\begin{aligned} GT_B^{\text{lii}} &\equiv \Sigma^{(1)'} \left(\Sigma^{(1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle - \langle n|\gamma_0\hat{\Sigma}^{(1)}|n\rangle \right) \\ &\quad - 2\Sigma^{(1)'}\langle n|\gamma_0\hat{V}\hat{\Lambda}_0^{(1)}|n\rangle \\ &\quad - \Lambda^{(1)}\langle n|\gamma_0\hat{V}\hat{\Lambda}_0^{(1)}|n\rangle \\ &= \Sigma^{(1)'} \left(\Sigma^{(1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle - \langle n|\gamma_0\hat{\Sigma}^{(1)}|n\rangle - \langle n|\gamma_0\hat{V}\hat{\Lambda}_0^{(1)}|n\rangle \right), \end{aligned} \quad (3.66)$$

wobei in der letzten Zeile wieder die Ein-Schleifen-Wardidentität aus (3.64) verwendet wurde. Die diagrammatische Darstellung der letzten beiden Summanden ist in Abbildung 3.18 (A) und (B) dargestellt. Wenn die Gegenterme in Abbildung 3.14, welche also proportional zu $\Sigma^{(1)'}$ und zu $\Lambda^{(1)}$ sind, zusammengefasst werden und ihre Potentialentwicklung rückgängig gemacht wird, so erhält man insgesamt einen Gegenterm GT_C^{lii} , welcher in Abbildung 3.18 (C) graphisch dargestellt ist. Es ist klar, daß die Summe der Diagramme (A), (B), (C) in der Abbildung 3.18 wieder den Graphen der Selbstenergie 1. Ordnung Störungstheorie ergibt (s. Abbildung 3.10). Somit lassen sich also die Terme wie folgt zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \text{Terme proportional zu } \Sigma^{(1)'} \text{ und } \Lambda^{(1)} &= -\Sigma^{(1)'} \left(\langle n|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}|n\rangle - \Sigma^{(1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle \right) \\ &= -\Sigma^{(1)'}\langle n|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1),\text{ren}}|n\rangle. \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned}
 \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle &= \text{Diagram (A)} \\
 \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)} | n \rangle &= \text{Diagram (B)} \\
 GT_C^{\text{III}} &= \text{Diagram (C)}
 \end{aligned}$$

Abbildung 3.18: Die diagrammatische Darstellung des Terms $\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle$ ist in (A) und die diagrammatische Darstellung des Terms $\langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)} | n \rangle$ ist in (B) dargestellt. Werden die Gegenterme in Abbildung 3.14, welche proportional $\Sigma^{(1)'}$ und $\Lambda^{(1)}$ sind, zusammengefasst und wird ihre Potentialentwicklung rückgängig gemacht, so verbleibt insgesamt ein Gegenterm GT_C^{III} , welcher in graphischer Notation als Diagramm (C) dargestellt werden kann.

Betrachtet seien nun die Terme, welche proportional zu $\Sigma^{(1)}$ in (3.45) und (3.53) sind. Sie lauten

$$\begin{aligned}
 GT_D^{\text{III}} \equiv & -\Sigma^{(1)} \left(\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle - \tilde{\Sigma}^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \right) \\
 & -2\Sigma^{(1)} \left(\langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)} | n \rangle \right). \quad (3.68)
 \end{aligned}$$

Der 1. Summand und der 3. Summand sind in Abbildung 3.19 (A) und (B) diagrammatisch dargestellt. Werden diese beiden Terme mit den drei Gegentermen der Abbildung 3.14 zu-

$$\begin{aligned}
 \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle &= \text{Diagram (A)} \\
 \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)} | n \rangle &= \text{Diagram (B)}
 \end{aligned}$$

Abbildung 3.19: Die diagrammatische Darstellung des Terms $\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle$ ist in (A) und die diagrammatische Darstellung des Terms $\langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(1)} | n \rangle$ ist in (B) dargestellt.

sammengefasst, welche proportional zu $\Sigma^{(1)}$ sind, dann ergibt sich ein Diagramm, welches

an die Selbstenergie 1. Ordnung Störungstheorie erinnert, jedoch mit zwei Elektronenpropagatoren (s. Abbildung 3.20). Somit lassen sich also die Terme wie folgt zusammenfassen:

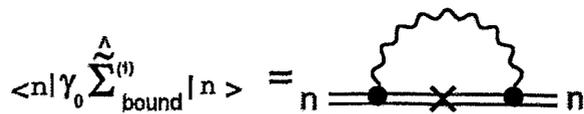


Abbildung 3.20: Die Zusammenfassung der beiden Gegenterme in Abbildung 3.19 und der drei Gegenterme in Abb. 3.14, welche proportional $\Sigma^{(1)}$ sind, ergibt ein Diagramm der Selbstenergie, jedoch mit zwei Elektronenpropagatoren. Dies soll durch das Kreuz angedeutet werden.

$$\begin{aligned} \text{Terme proportional zu } \Sigma^{(1)} &= -\Sigma^{(1)} \left(\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)} | n \rangle - \tilde{\Sigma}^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \right) \\ &= -\Sigma^{(1)} \left(\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1), \text{ren}} | n \rangle \right). \end{aligned} \tag{3.69}$$

Betrachtet man nun noch den Gegenterm $\Sigma^{(A1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$ in (3.53) zusammen mit den anderen Gegentermen, welche in (3.67) und (3.69) schon zusammengefasst wurden, so lassen sich alle Gegenterme, welche bei der Renormierung des Loop-Inside-Loop-Diagramms auftreten, wie folgt zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESE b),ren}} &= \Delta E_n^{\text{SESE b)} - \Sigma^{(A1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \\ &\quad - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1), \text{ren}}(E_n) | n \rangle - \Sigma^{(1)'} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1), \text{ren}}(E_n) | n \rangle. \end{aligned} \tag{3.70}$$

Dieser renormierte Ausdruck des Loop-Inside-Loop-Diagramms ist in der Abbildung 3.21 graphisch dargestellt.

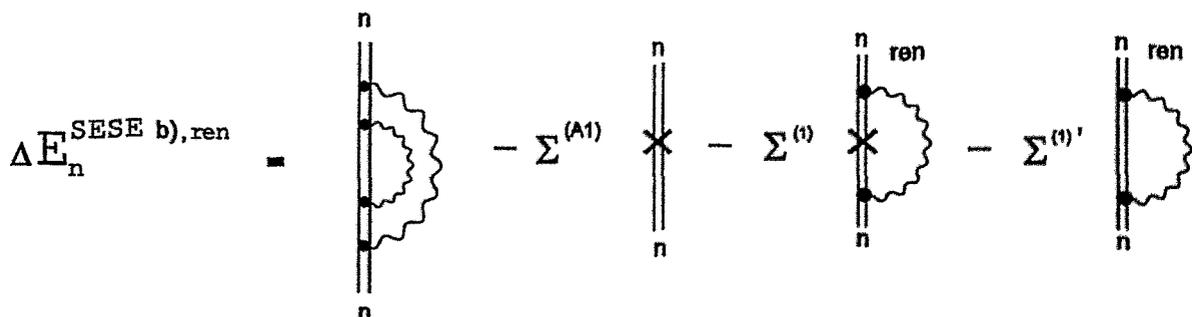


Abbildung 3.21: Der renormierte Ausdruck des Loop-Inside-Loop-Diagramms.

3.3.4 Das Loop-Crossed-Loop-Diagramm

Betrachtet sei nun die Renormierung des Diagramms Loop-Crossed-Loop. Bei der Renormierung dieses Diagramms wird der Unterschied zwischen der Methode der inneren/äußeren Renormierung und der BPHZ-Renormierung deutlich. Es wurde bereits erläutert, daß die Begriffe innere/äußere Renormierung zwar formal auch in der BPHZ-Renormierung definiert werden können, jedoch es sich bei beiden Methoden um prinzipiell verschiedenen Renormierungszugänge handelt.

In der Abbildung 3.22 ist wieder eine geeignete Potentialentwicklung dieses Diagramms dargestellt. Die Diagramme (E2) und (F) sind konvergent, denn der oberflächliche Divergenz-

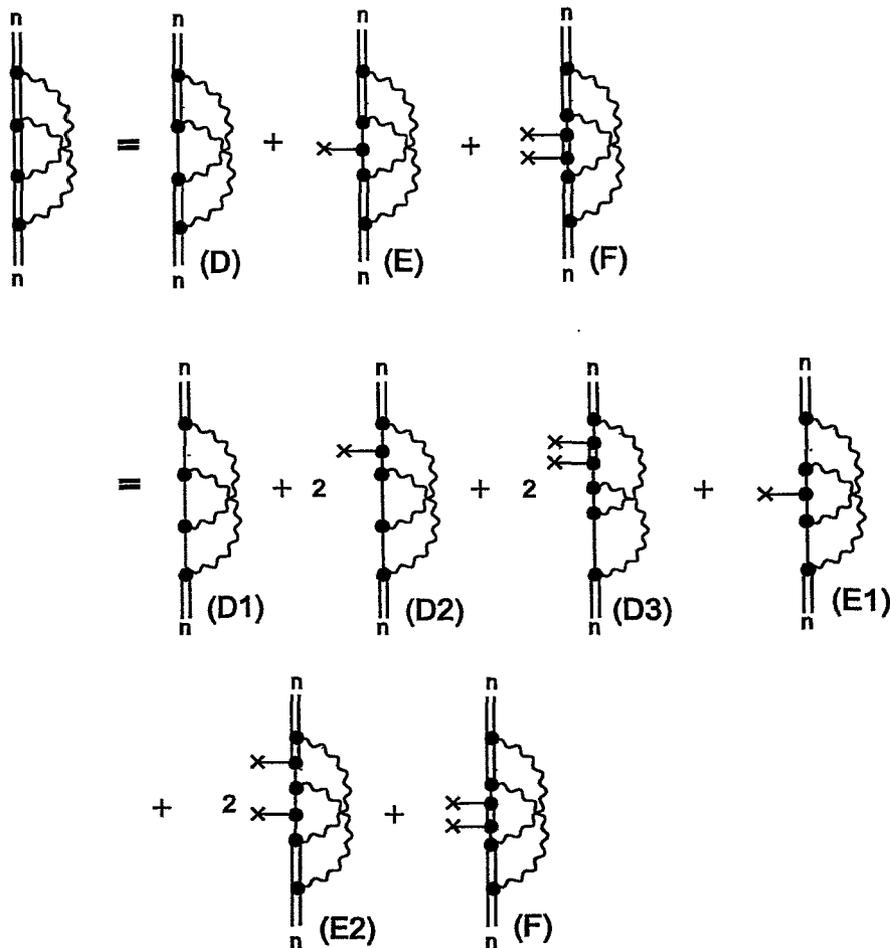


Abbildung 3.22: Die Potentialentwicklung des Diagramms Loop-Crossed-Loop. Die Kreuze bezeichnen wieder die Wechselwirkung mit dem Kernfeld.

grad ω ist negativ, und sie enthalten auch keine divergenten Unterdiagramme. Das Diagramm (D3) hat ebenfalls einen negativen oberflächlichen Divergenzgrad, $\omega = -1$, aber es enthält ein divergentes Unterdiagramm, nämlich das Diagramm einer Vertexkorrektur. Deshalb erfordert es eine innere Renormierung. Sie ist in der Abbildung 3.23 dargestellt. Die anderen Diagramme (D1), (D2) und (E1) erfordern eine innere und äußere Renormierung, denn ihr

$$\Delta E_{(D3)}^{\text{ren}} = 2 \text{ (Diagram D3)} - 2 \Lambda^{(1)} \text{ (Diagram)}.$$

Abbildung 3.23: Die Renormierung des Diagramms (D3), welches nur eine innere Renormierung erfordert.

oberflächlicher Divergenzgrad ist positiv und auch die Unterdiagramme haben positiven Divergenzgrad. Diese Diagramme werden im folgenden diskutiert.

Renormierung des Diagramms (D1)

Bei der Renormierung dieses Diagramms tritt der Fall einer sogenannten *überlappenden Divergenz* auf. Darunter versteht man Folgendes:

Wenn zwei Diagramme γ_1 und γ_2 weder disjunkt noch Teil des jeweils anderen Graphen sind, so nennt man diese Diagramme *überlappend*. Wenn beide Diagramme zudem einen positiven Divergenzgrad besitzen, $\omega(\gamma_1) > 0$, $\omega(\gamma_2) > 0$, d.h. divergent sind, dann spricht man von *überlappenden Divergenz*. Diese Art von Divergenz stellt jedoch keine neue Schwierigkeit im Rahmen der BPHZ-Renormierung dar. Dies und der Begriff selbst wird im Beispiel der Renormierung des Diagramms (D1) noch klarer werden.

Das Diagramm (D1) ist in Abbildung 3.24 dargestellt. Dieses Diagramm enthält zwei divergente Unterdiagramme, nämlich γ_1 und γ_2 . Bei beiden Unterdiagrammen handelt es sich um die Diagramme der Vertexkorrektur. Das gesamte Diagramm ohne die äußeren Zustände $|n\rangle$ wurde wieder als Γ bezeichnet. Der unrenormierte Ausdruck des gesamten Diagramms (D1) läßt sich schreiben als

$$\Delta E^{(D1), \text{unren}} = \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(D1)} | n \rangle. \quad (3.71)$$

Der mathematische Ausdruck des Feynmandiagramms Γ lautet

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}^{(D1)}(p) &= -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma(p, \not{q}_1, \not{q}_2), \\ \hat{I}_\Gamma(p, \not{q}_1, \not{q}_2) &= \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \\ &\quad \times \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{q}_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Die Integranden der Unterdiagramme γ_1, γ_2 wurden in dieser Gleichung nicht explizit angegeben, da sie weiter unten notiert werden. Der äußere Impuls bezüglich Γ ist wieder p . Der

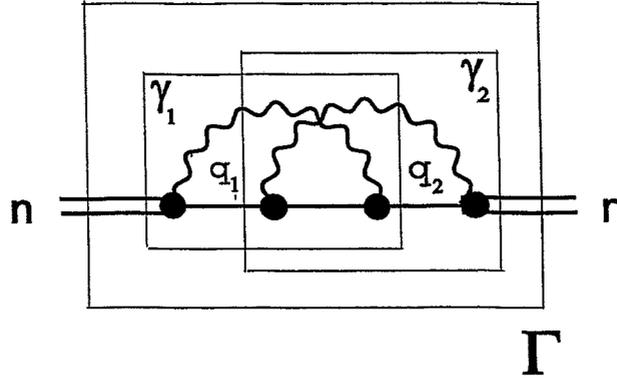


Abbildung 3.24: Das Diagramm Γ und die Unterdiagramme γ_1 und γ_2 der unrenormierten Energieverschiebung $\Delta E_n^{(D1), \text{unren}}$.

renormierte Ausdruck des Diagramms (D1) ist jetzt gegeben durch

$$\hat{\Sigma}^{(D1), \text{ren}}(p) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma(p, \not{q}_1, \not{q}_2). \quad (3.73)$$

Man muss bei diesem Diagramm beachten, daß es zwei divergente Unterdiagramme enthält, so daß die Bogoljubov'sche \mathcal{R} -Operation jetzt lautet:

$$\hat{R}_\Gamma = (1 - t^\Gamma) \hat{\bar{R}}_\Gamma \quad \text{mit} \quad \hat{\bar{R}}_\Gamma = \hat{I}_\Gamma + \hat{I}_{\Gamma/\gamma_1}(-t^{\gamma_1}) \hat{I}_{\gamma_1} + \hat{I}_{\Gamma/\gamma_2}(-t^{\gamma_2}) \hat{I}_{\gamma_2}$$

also

$$\hat{R}_\Gamma = \underbrace{\hat{I}_\Gamma - t^\Gamma \hat{I}_\Gamma + t^\Gamma \left[\hat{I}_{\Gamma/\gamma_1}(t^{\gamma_1} \hat{I}_{\gamma_1}) \right] + t^\Gamma \left[\hat{I}_{\Gamma/\gamma_2}(t^{\gamma_2} \hat{I}_{\gamma_2}) \right]}_{\text{äußere Ren.}} - \underbrace{\hat{I}_{\Gamma/\gamma_1}(t^{\gamma_1} \hat{I}_{\gamma_1}) - \hat{I}_{\Gamma/\gamma_2}(t^{\gamma_2} \hat{I}_{\gamma_2})}_{\text{innere Ren.}}. \quad (3.74)$$

Die explizite Darstellung der Integranden ist dabei gegeben durch

$$\hat{I}_{\Gamma/\gamma_1} = \frac{1}{\not{p} - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon},$$

äußerer Impuls: p

$$\hat{I}_{\Gamma/\gamma_2} = \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \frac{1}{q_1^2 + i\epsilon},$$

äußerer Impuls: p

$$\hat{I}_{\gamma_1} = \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{q_1^2 + i\epsilon},$$

äußere Impulse: $p, p - q_2, q_2$

$$\hat{I}_{\gamma_2} = \gamma^\nu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon},$$

äußere Impulse: $p - q_1, q_1, p$.

(3.75)

Dabei sind, wie z.B. auch im Fall der Ein-Schleifen-Vertexkorrektur, einige Lorentzindizes der Diracmatrizen in den Integranden vorübergehend nicht abgepaart. Diese Eigenschaft ist typisch für Graphen mit überlappender Divergenz, was aber selbstverständlich keine besonderen Schwierigkeiten in sich birgt, da bei der späteren Zusammenfassung diese Indizes wieder abgepaart werden. Die oberflächlichen Divergenzgrade ergeben sich zu

$$\begin{aligned}\omega(\Gamma) &= 1, \\ \omega(\gamma_1) &= 0, \\ \omega(\gamma_2) &= 0.\end{aligned}\tag{3.76}$$

Mit Blick auf (3.74) folgt somit unmittelbar, daß von der äußeren Renormierung sechs Gegenterme und von der inneren Renormierung zwei Gegenterme zu erwarten sind. Durch Anwendung des Tayloroperators (2.155) unter Beachtung des Begriffs *äußerer Impuls* folgt somit der renormierte Ausdruck des Diagramms (D1) zu

$$\begin{aligned}\Delta E^{(D1),\text{ren}} &= \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(D1)} | n \rangle - \Sigma^{(D1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle - \Sigma^{(D1)'} \langle n | \hat{V} | n \rangle \\ &\quad - 2\Lambda^{(1)} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}^{(1)} | n \rangle + 2\Lambda^{(1)} \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \\ &\quad + 2\Lambda^{(1)} \Sigma^{(1)'} \langle n | \hat{V} | n \rangle.\end{aligned}\tag{3.77}$$

Dabei wurde wieder von der Diracgleichung im Impulsraum (3.33) Gebrauch gemacht. Die Gegenterme $\Sigma^{(1)}$, $\Sigma^{(1)'}$ und $\Lambda^{(1)}$ wurden schon früher definiert, und die anderen beiden Gegenterme sind definiert durch

$$\begin{aligned}\Sigma^{(D1)} &\equiv \hat{\Sigma}^{(D1)}(\not{p}) \Big|_{\not{p}=m}, \\ \gamma_\alpha \Sigma^{(D1)} &\equiv \frac{\partial}{\partial p^\alpha} \Sigma^{(D1)}(\not{p}) \Big|_{\not{p}=m}.\end{aligned}\tag{3.78}$$

Erwähnenswert in diesem Zusammenhang ist der Faktor 2 in den letzten drei Termen in Gleichung (3.77). Im Rahmen der BPHZ-Renormierung erscheint dieser Term vollkommen zwanglos. Jedoch mit der Methode der inneren/äußeren Renormierung ist hier eine besondere Sorgfalt notwendig [113]. Gerade dieses Beispiel, welches typisch für Diagramme mit überlappenden Divergenzen ist, verdeutlicht den entscheidenden Vorteil der Systematik der BPHZ-Renormierung gegenüber der Methode der inneren/äußeren Renormierung.

Renormierung des Diagramms (D2)

Als nächstes sei nun das Diagramm (D2) betrachtet. Das Unterdiagramm γ_1 ist konvergent, denn es hat positiven Divergenzgrad. Das Unterdiagramm γ_2 ist die Ein-Schleifen-Selbstenergie, s. Abbildung 3.25. Die unrenormierte Energieverschiebung dieses Diagramms lautet

$$\Delta E^{(D2),\text{unren}} = 2 \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(D2)} | n \rangle.\tag{3.79}$$

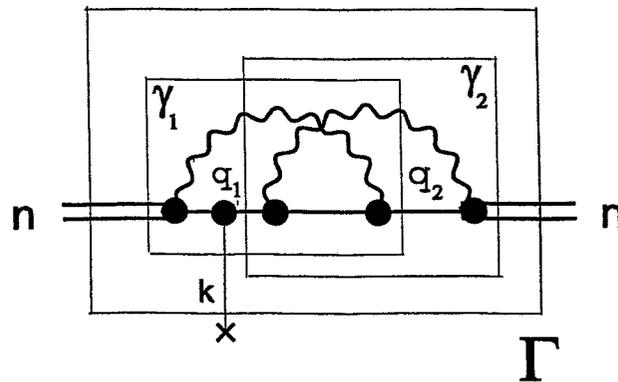


Abbildung 3.25: Das Feynman-Diagramm Γ und das Unterdiagramm γ der unrenormierten Energieverschiebung $\Delta E_n^{(D2, \text{unren})}$.

Der Operator $\hat{\Lambda}_0^{(D2)}$ ist eine Funktion der beiden äußeren Impulse p_1 , $p_2 = p_1 - k$ und ist explizit gegeben durch

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}^{(D2)}(p_1, p_2) &= -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma(p_1, p_2, \not{q}_1, \not{q}_2), \\ \hat{I}_\Gamma(p_1, p_2, \not{q}_1, \not{q}_2) &= \gamma_\mu \frac{1}{\not{p}_1 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_\nu \\ &\quad \times \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{q}_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Die BPHZ-Renormierung des Diagramms (D2) erfolgt ähnlich wie die Renormierung des Graphen (D1). Insbesondere ist der renormierte Operator wieder definiert als

$$\hat{\Lambda}^{(D2), \text{ren}}(p_1, p_2) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma(p_1, p_2, \not{q}_1, \not{q}_2). \quad (3.81)$$

Jedoch gilt nicht (3.74), denn es gibt nur ein divergentes Unterdiagramm, nämlich γ_2 . Die Bogoljubov'sche \mathcal{R} -Operation liefert deshalb

$$\hat{R}_\Gamma = (1 - t^\Gamma) \hat{\bar{R}}_\Gamma \quad \text{mit} \quad \hat{\bar{R}}_\Gamma = \hat{I}_\Gamma + \hat{I}_{\Gamma/\gamma_2}(-t^{\gamma_2}) \hat{I}_{\gamma_2},$$

also

$$\hat{R}_\Gamma = \underbrace{\hat{I}_\Gamma - t^\Gamma \hat{I}_\Gamma + t^\Gamma \left[\hat{I}_{\Gamma/\gamma_2}(t^{\gamma_2} \hat{I}_{\gamma_2}) \right]}_{\text{äußere Ren.}} \underbrace{- \hat{I}_{\Gamma/\gamma_2}(t^\gamma \hat{I}_{\gamma_2})}_{\text{innere Ren.}}, \quad (3.82)$$

wobei nun die Integranden gegeben sind durch

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\Gamma/\gamma_2} &= \gamma_\mu \frac{1}{\not{p}_1 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \frac{1}{\not{q}_1^2 + i\epsilon}, \\ &\quad \text{äußere Impulse: } p_1, p_2 \\ \hat{I}_{\gamma_2} &= \gamma_\nu \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{p}_2 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Die Tayloroperatoren t^Γ, t^{γ_2} wirken bis 0. Ordnung, denn die oberflächlichen Divergenzgrade sind

$$\begin{aligned}\omega(\Gamma) &= 0, \\ \omega(\gamma_2) &= 0.\end{aligned}\quad (3.84)$$

Deshalb folgt aus (3.82), daß für dieses Diagramm genau zwei Gegenterme der äußeren und ein Gegenterm der inneren Renormierung zugeordnet werden können. Wendet man den Tayloroperator unter Berücksichtigung der entsprechenden äußeren Impulse an, so erhält man den renormierten Ausdruck des Diagramms (D2) zu

$$\begin{aligned}\Delta E^{(D2)} &= 2\langle n|\gamma_0\hat{\Lambda}_0^{(D2)}|n\rangle - 2\Lambda^{(D2)}\langle n|\hat{V}|n\rangle \\ &\quad - 2\Lambda^{(1)}\langle n|\gamma_0\hat{V}\hat{\Lambda}_0^{(1)}|n\rangle + 2(\Lambda^{(1)})^2\langle n|\hat{V}|n\rangle.\end{aligned}\quad (3.85)$$

Dabei wurde der neue Gegenterm wie folgt definiert:

$$\Lambda^{(D2)} \equiv \hat{\Lambda}^{(D2)}(p_1, p_2) \Big|_{p_1=p_2=m}.\quad (3.86)$$

Renormierung des Diagramms (E1)

Schließlich sei noch das Diagramm (E1) betrachtet, welches in der Abbildung (3.26) dargestellt ist. Die beiden Unterdiagramme γ_1, γ_2 sind konvergent, denn ihre Divergenzgrade sind $\omega(\gamma_1) = \omega(\gamma_2) = 1$. Der mathematische Ausdruck der unrenormierten Energieverschiebung

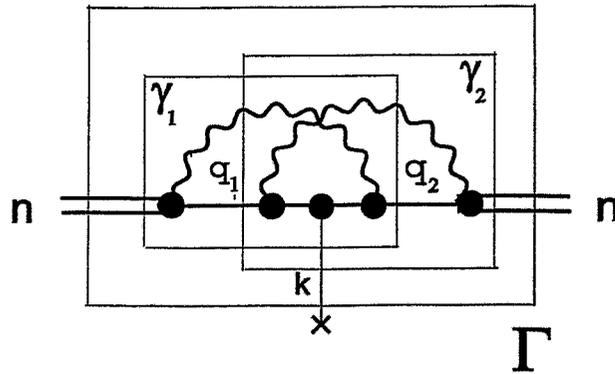


Abbildung 3.26: Das Diagramm (E1) Γ und die Unterdiagramme γ_1 und γ_2 .

dieses Diagramms lautet

$$\Delta E^{(E1),\text{unren}} = \langle n|\gamma_0\hat{V}\hat{\Lambda}_0^{(E1)}|n\rangle,\quad (3.87)$$

und der Operator ist dabei gegeben durch

$$\Lambda_0^{(E1)}(p_1, p_2) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{\Gamma}(p_1, p_2, q_1, q_2),$$

$$\hat{I}_\Gamma(p_1, p_2, \not{p}_1, \not{p}_2) = \gamma_\mu \frac{1}{\not{p}_1 - \not{p}_1 - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{p}_1 - \not{p}_1 - \not{p}_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \\ \times \frac{1}{\not{p}_2 - \not{p}_1 - \not{p}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{p}_2 - \not{p}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{q_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} . \quad (3.88)$$

Die äußeren Impulse bezüglich des gesamten Diagramms Γ sind $p_1, p_2 = p_1 - k$. Die renormierte Energieverschiebung definiert sich wieder zu

$$\hat{\Lambda}_0^{(E1),\text{ren}}(p_1, p_2) = -e^4 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma(p_1, p_2, \not{p}_1, \not{p}_2) , \quad (3.89)$$

und die \mathcal{R} -Operation lautet einfach

$$\hat{R}_\Gamma = (1 - t^\Gamma) \hat{R}_\Gamma \quad \text{mit} \quad \hat{R}_\Gamma = \hat{I}_\Gamma ,$$

also

$$\hat{R}_\Gamma = \hat{I}_\Gamma \underbrace{-t^\Gamma \hat{I}_\Gamma}_{\text{äußere Ren.}} , \quad (3.90)$$

da keine divergenten Unterdiagramme vorhanden sind. Der Tayloroperator t^Γ wirkt dabei bis zur 0. Ordnung, denn der oberflächliche Divergenzgrad des gesamten Diagramms ist

$$\omega(\Gamma) = 0 . \quad (3.91)$$

Es gibt also nur einen Gegenterm und die renormierte Energieverschiebung des Diagramms (E1) lautet dementsprechend

$$\Delta E^{(E1),\text{ren}} = \langle n | \gamma_0 \hat{V} \hat{\Lambda}_0^{(E1),\text{unren}} | n \rangle - \Lambda^{(E1)} \langle n | \hat{V} | n \rangle , \quad (3.92)$$

wobei der Gegenterm definiert wird als

$$\gamma_0 \Lambda^{(E1)} = \hat{\Lambda}_0^{(E1)}(p_1, p_2) \Big|_{\not{p}_1 = \not{p}_2 = m} . \quad (3.93)$$

Zusammenfassung der Gegenterme des Loop-Crossed-Loop-Diagramms

Bei der Zusammenfassung der Gegenterme des gesamten Loop-Crossed-Loop-Diagramms wird in analoger Weise wie im Fall des Loop-Inside-Loop-Diagramms vorgegangen. Zunächst seien also alle Terme betrachtet, welche proportional zu $\langle n | \hat{V} | n \rangle$ sind. Sie lauten entsprechend (3.77), (3.85) und (3.92)

$$GT_A^{\text{icl}} \equiv -\langle n | \hat{V} | n \rangle \left(\Sigma^{(D1)'} - 2\Lambda^{(1)} \Sigma^{(1)'} \right) - \langle n | \hat{V} | n \rangle \left(2\Lambda^{(D2)} - 2(\Lambda^{(1)})^2 \right) - \langle n | \hat{V} | n \rangle \left(\Lambda^{(E1)} \right) . \quad (3.94)$$

Unter Verwendung der Ein-Schleifen-Wardidentität und der Zwei-Schleifen-Wardidentität

$$\Sigma^{(1)'} = -\Lambda^{(1)} \quad \text{Ein-Schleifen-Wardidentität} , \\ \Sigma^{(D1)'} = -\Lambda^{(E1)} - 2\Lambda^{(D2)} \quad \text{Zwei-Schleifen-Wardidentität} \quad (3.95)$$

sieht man unmittelbar, daß sich alle Terme in (3.94) wieder gegenseitig wegheben, so daß es keine Terme proportional zu $\langle n|\hat{V}|n\rangle$ gibt. Somit gibt es nur Terme, welche proportional zu $\Lambda^{(1)}$ sind. Entsprechend (3.77) und (3.85) lauten sie:

$$GT_B^{\text{1cl}} \equiv -2\Lambda^{(1)} \left(\langle n|\gamma_0\hat{\Sigma}^{(1)}|n\rangle - \Sigma^{(1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle + \langle n|\gamma_0\hat{V}\hat{\Lambda}_0^{(1)}|n\rangle \right). \quad (3.96)$$

Außerdem muß natürlich noch der Gegenterm, welcher vom Diagramm (D3) stammt und in der Abbildung 3.23 dargestellt ist, berücksichtigt werden. Die Gegenterme $\langle n|\gamma_0\hat{\Sigma}^{(1)}|n\rangle$ und $\langle n|\gamma_0\hat{\Lambda}_0^{(1)}\hat{V}|n\rangle$ wurden bereits in der Abbildung 3.18 (A) und (B) graphisch dargestellt. Ebenso ist der Gegenterm des Diagramms (D3) identisch dem Gegenterm GT_C^{1cl} in der Abbildung 3.18. Es ist klar, daß die Summe dieser drei Gegenterme wieder die Selbstenergie in 1. Ordnung Störungstheorie ergibt (s. Abbildung 3.10). Somit lassen sich alle Terme proportional zu $\Lambda^{(1)}$ zusammen mit dem Gegenterm des Diagramms (D3) (welcher ebenfalls proportional zu $\Lambda^{(1)}$ ist und mit GT_C^{1cl} bezeichnet werden soll) wieder wie folgt zusammenfassen:

$$GT_B^{\text{1cl}} + GT_C^{\text{1cl}} = -2\Lambda^{(1)} \left(\langle n|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}|n\rangle - \Sigma^{(1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle \right) - 2\Lambda^{(1)} \left(\langle n|\hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1),\text{ren}}|n\rangle \right). \quad (3.97)$$

Mit dieser Gleichung folgt also, daß sich alle Gegenterme des Loop-Crossed-Loop-Diagramms wie folgt zusammenfassen lassen:

$$\Delta E_n^{\text{SESEc),ren}} = -\Sigma^{(D1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle - \Delta E_n^{\text{SESEc}} - 2\Lambda^{(1)}\langle n|\hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1),\text{ren}}|n\rangle. \quad (3.98)$$

In der Abbildung 3.27 ist dieser renormierte Ausdruck des Loop-Crossed-Loop-Diagramms graphisch dargestellt.

$$\Delta E_n^{\text{SESEc),ren}} = \text{Diagram 1} - \Sigma^{(D1)} \text{Diagram 2} - 2\Lambda^{(1)} \text{Diagram 3}$$

Abbildung 3.27: Der renormierte Ausdruck des Loop-Crossed-Loop-Diagramms.

$$\begin{aligned}
& \times \langle nr | \alpha_\mu(4) \alpha^\mu(1) | tn \rangle \langle ts | \alpha_\nu(3) \alpha^\nu(2) | sr \rangle \\
& \times \frac{1}{(E_t(1-i\epsilon) - E_n + E_1)(E_s(1-i\epsilon) - E_n + E_1 + E_2)(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)}, \tag{3.102}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{\text{SESE } c)} &= \alpha^2 \sum_{r,s,t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\
& \times \langle ns | \alpha_\mu(3) \alpha^\mu(1) | tr \rangle \langle tr | \alpha_\nu(4) \alpha^\nu(2) | sn \rangle \frac{e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{13}}}{r_{13}} \frac{e^{i\sqrt{E_2^2+i\epsilon} r_{24}}}{r_{24}} \\
& \times \frac{1}{(E_t(1-i\epsilon) - E_n + E_2)(E_s(1-i\epsilon) - E_n + E_1 + E_2)(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)}, \tag{3.103}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E) | n \rangle \Big|_{E=E_n} &= i\alpha \sum_{r,s} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | sn \rangle \langle s | \gamma_0 | r \rangle}{(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)(E_s(1-i\epsilon) - E_n + E_1)} \\
& \times \frac{e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{12}}}{r_{12}}. \tag{3.104}
\end{aligned}$$

Die mathematischen Ausdrücke der Gegenterme sind Bestandteil des nachfolgenden Abschnitts und werden dort explizit notiert.

3.4 Betrachtung der Infrarot-Divergenzen

3.4.1 Einleitung in die Problematik der Infrarot-Divergenzen

In allen Quantenfeldtheorien mit masselosen Eichbosonen erscheint das Problem der *Infrarot-Divergenz* (IR-Divergenz). Während das Problem der Ultraviolett-Divergenzen durch die Renormierungstheorien sowohl für abelsche, als auch für nichtabelsche Quantenfeldtheorien allgemein gelöst werden konnte, ist jedoch die Problematik infraroter Divergenzen in den Quantenfeldtheorien keineswegs vollständig gelöst und ist deshalb bis heute Gegenstand intensiver Forschung. Für die Quantenchromodynamik (QCD) beispielsweise existieren bis heute keine allgemeinen Theoreme über die IR-Divergenzen und ihr eindeutiges gegenseitiges Wegheben in allen Ordnungen der Störungstheorie. Das *Kinoshita-Lee-Nauenberg-Theorem* [115], welches Aussagen über das gegenseitige Wegheben von IR-Singularitäten ganz allgemein für Theorien mit Kopplungen zwischen masselosen Teilchen trifft, löst nur einen Teilaspekt dieser Problematiken der QCD. Im Glashow-Salam-Weinberg-Modell (Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung) hingegen treten wegen der massiven Natur der Vektorbosonen keine IR-Divergenzen auf, solange keine Prozesse mit Photonen betrachtet werden. In der QED existiert nur ein masseloses Feld, das Photonenfeld, welches zudem keine Ladung trägt, d.h. nicht direkt mit sich selbst wechselwirkt. Deshalb ist die IR-Problematik in der QED prinzipiell einfacher als beispielsweise in der QCD oder anderen nichtabelschen Theorien mit masselosen Quantenfeldern. Dennoch werden wir feststellen, daß die vorhandenen Theoreme bezüglich der IR-Singularitäten nicht von solch einer allgemeinen Natur sind, um die gesamte Problematik innerhalb der QED zu lösen. Unter den IR-Divergenzen der QED sind die folgenden Fälle zu unterscheiden:

1. IR-Divergenzen in Streuprozessen
2. IR-Divergenzen in gebundenen Zuständen

Die folgenden Aussagen sind immer bezüglich der UV-renormierten Ausdrücke zu verstehen. Es ist zweckmäßig, sich zunächst mit den vorhandenen Theoremen bezüglich des 1. Problemkreises vertraut zu machen, welche eventuell Rückschlüsse auf den 2. Problemkreis erlauben. Der 1. Fall betrifft beliebige Streuprozesse der QED, einschließlich der entsprechenden radiativen Schleifen-Korrekturen. Beliebige Streuprozesse sind immer mit der Emission langwelliger Photonen verbunden. Da diese Photonen masselos sind, können theoretisch unendlich viele Photonen beliebig kleiner Energie von den Elektronen emittiert werden und darin besteht die IR-Divergenz. Beispiele für das Auftreten solcher IR-Divergenzen sind der Compton-Effekt (Elektron-Photon-Streuung), die Elektron-Elektron-Streuung und die Bremsstrahlung (Streuung eines Elektrons am Coulomb-Potential). Die im letztgenannten Beispiel auftretende IR-Divergenz wurde früher als die *Infrarotkatastrophe der QED* bezeichnet. Diese historische Begriffsbildung unterstreicht die Schwierigkeiten, welche IR-Divergenzen in Quantenfeldtheorien implizieren. Die IR-Problematik der Bremsstrahlung wurde zuerst von *Bloch und Nordsieck* (1937) [116] vollständig gelöst. Dies ist umso bemerkenswerter, da damals der Begriff der S-Matrix, d.h. der Begriff einer Störungsreihe in der QED noch nicht existierte. In der genannten Arbeit konnte (in moderner Sprache: "in beliebiger Ordnung Störungstheorie") gezeigt werden, daß sich die IR-Divergenzen im *physikalischen Wirkungsquerschnitt* gegenseitig wegheben. Unter physikalischem Wirkungsquerschnitt ist dabei der Ausdruck

$$\sigma_{\text{phys}} = \sigma_{\text{inelastisch}} + \sigma_{\text{elastisch}} \quad (3.105)$$

zu verstehen. Entsprechend dieser Gleichung muss also berücksichtigt werden, daß die von dem gestreuten Elektron emittierten, langwelligen Photonen mit Frequenzen unterhalb einer vom Detektor abhängigen minimalen Grenzfrequenz ω_{\min} im Detektor nicht mehr nachgewiesen werden können. Deshalb müssen auch die Diagramme der elastischen Elektronenstreuung (d.h.: keine Photonenemission) zum gesamten Wirkungsquerschnitt hinzuaddiert werden, da diese Prozesse experimentell nicht von dem Prozess der inelastischen Elektronenstreuung unter Emission langwelliger Photonen mit Frequenzen $\omega \leq \omega_{\min}$ unterschieden werden können. Der aus dieser Überlegung resultierende Ausdruck (3.105) ist IR-konvergent. Einen Beweis dieses nach *Bloch* und *Nordsieck* benannten Theorems in der modernen Sprache der Störungstheorie und für beliebige Streuprozesse der freien QED findet man in [117, 118]. Die zentrale Aussage dieses *verallgemeinerten Bloch-Nordsieck-Theorems* lautet also:

Alle IR-Divergenzen für beliebige Streuprozesse der QED heben sich in allen Ordnungen Störungstheorie gegenseitig weg, wenn zu den jeweils betrachteten Diagrammen mit reeller Photonenemission auch die Diagramme ohne Photonenemission berücksichtigt werden.

Der so entstandene Wirkungsquerschnitt wird dann als *physikalischer Wirkungsquerschnitt* bezeichnet.

Es sollte auch bemerkt werden, daß zwischen Eichinvarianz und IR-Divergenzen der freien QED durchaus tiefere Zusammenhänge bestehen. Nach einem allgemeinem Theorem von *Yennie, Frautschi* und *Suura* [117] heben sich z.B. in einer *eichinvarianten Untergruppe von Diagrammen* alle sogenannten überlappenden IR-Divergenzen gegenseitig weg. Unter überlappenden IR-Divergenzen versteht man dabei Divergenzen, welche durch das gleichzeitige Auftreten zweier langwelliger Photonen entstehen.

Der 2. Problemkreis beinhaltet die IR-Divergenzen in Strahlungskorrekturen gebundener Zustände. Wie oben bereits angedeutet wurde, existieren bis heute keine allgemeinen Theoreme über diese IR-Divergenzen und ihr gegenseitiges Wegheben in der Bound-State-QED. Mit Blick auf die Potentialentwicklung des gebundenen Elektronenpropagators, welche eine Verbindung zwischen den Diagrammen der Bound-State-QED und der freien QED herstellt, scheint es möglich, einige Aussagen des *allgemeinen Bloch-Nordsieck-Theorems* der freien QED auf die Bound-State-QED anzuwenden. Jedoch muss im Auge behalten werden, daß die Potentialentwicklung unendlich viele Diagramme der freien QED erzeugt und es schon deshalb problematisch ist, Aussagen über IR-Divergenzen der freien QED "blind" auf die Bound-State-QED zu übertragen. Dennoch wird allgemein angenommen, daß sich die IR-Divergenzen in den renormierten Schleifen-Diagrammen der Bound-State-QED und insbesondere speziell der Lamb-Verschiebung in einer bestimmten Ordnung Störungstheorie jeweils gegenseitig wegheben. Diese Diagramme entsprechen direkt physikalisch messbaren Energie-Verschiebungen und demzufolge sollten sie, *analog zum physikalischen Wirkungsquerschnitt in den Streuproblemen der freien QED*, konvergent sein. Mit Blick auf die Nichtexistenz entsprechender Theoreme ist es aber trotzdem notwendig, die IR-Konvergenz in der jeweils betrachteten Ordnung Störungstheorie im Einzelnen zu beweisen. Dabei könnte es sich herausstellen, daß eichinvariante Untergruppen einer bestimmten Ordnung Störungstheorie bereits IR-konvergent sind. Der diesbezüglich wichtige Fall der IR-Konvergenz der Selbstenergie eines gebundenen Elektrons in 1. Ordnung Störungstheorie ist beispielsweise explizit in [57] betrachtet worden. Einen weiteren Fall von IR-Konvergenz einer eichinvarianten Untergruppe stellen die Diagramme der Zwei-Photonen-Selbstenergie dar. Diese Untersuchungen sind im folgenden Hauptgegenstand dieses Kapitels.

3.4.2 Die Infrarot-Divergenzen der Gegenterme

Durch die on-shell-Renormierung werden die Gegenterme berechnet, indem die äußeren Impulse auf die Massenschale gesetzt werden. Im Limes kleiner Schleifenimpulse, d.h. im infraroten Limes, divergieren jedoch diese Integrale. Deshalb erfordert diese IR-Divergenz der einzelnen Gegenterme in der renormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie eine IR-Regularisierung dieser Integrale. Solch eine Regularisierung muss Lorentz-invariant sein und wird durch die Einführung einer kleinen Photonenmasse μ erreicht (s.a. Abschnitt 2.2.3), d.h. es wird ein Term

$$\Delta \mathcal{L}_{\text{Photonenmasse}} = -\frac{1}{2} \mu^2 \hat{A}_\nu(x) \hat{A}^\nu(x) \quad (3.106)$$

zur QED-Lagrangedichte (2.1) hinzuaddiert. Es wird oft argumentiert, daß nach Abschluss aller Berechnungen wieder der Limes $\mu \rightarrow 0$ auszuführen ist, um die Eichinvarianz der Theorie zu gewährleisten. Jedoch muss aufgrund des vorübergehenden Verlustes der Eichinvarianz untersucht werden, ob die so erhaltenen Ergebnisse tatsächlich unabhängig von dem Eichparameter ζ bleiben. Solch ein Beweis wurde von *Pauli* und *Villars* (1949) [54] geführt, denn das mit der Einführung einer kleinen Photonenmasse μ verbundene Problem des vorübergehenden Verlustes der Eichinvarianz ist dieselbe Problematik, welcher man bei der Einführung einer großen Photonenmasse Λ in der Pauli-Villars-Regularisierung begegnet. Der Photonpropagator lautet nach der Einführung einer kleinen Photonenmasse μ

$$D_{\mu\nu}(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -g_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{-i[E(t_1-t_2)-\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)]}}{E^2 - \mathbf{k}^2 - \mu^2 + i\epsilon}. \quad (3.107)$$

Da, wie bereits oben erwähnt, leider keine allgemeinen Theoreme über eine IR-Konvergenz von eichinvarianten Unterdiagrammen in der Bound-State-QED existieren, ist es notwendig, immer im Einzelnen zu untersuchen, ob die zu berechnenden Diagramme unabhängig von der kleinen Photonenmasse μ , d.h. IR-konvergent sind. Im Fall der Zwei-Photonen-Selbstenergie ist es dazu notwendig, die Gegenterme $\Sigma^{(1)}$, $\tilde{\Sigma}^{(1)}$, $\Sigma^{(A1)}$ und $\Sigma^{(D1)}$ unter Verwendung des Photonpropagators (3.107) zu berechnen. Dabei werden die UV-Divergenzen dieser Gegenterme durch die Methode von *Pauli* und *Villars* regularisiert (s. Kap. 2.3). Es wird also ein bosonisches Hilfsfeld der Masse Λ subtrahiert, so daß der obige Photonpropagator ersetzt werden muss durch

$$D_{\mu\nu}(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -g_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i[E(t_1-t_2)-\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)]} \times \left(\frac{1}{E^2 - \mathbf{k}^2 - \mu^2 + i\epsilon} - \frac{1}{E^2 - \mathbf{k}^2 - \Lambda^2 + i\epsilon} \right). \quad (3.108)$$

Die Gegenterme werden demnach i.a. Funktionen von Λ und μ sein. Die analytische Berechnung dieser Gegenterme ist etwas aufwendiger und wurde erstmalig durch *Labzowsky*, *Mitruschenkov*, *Shelyuto* und *Soff* (1998) in [119] durchgeführt. Der Autor dieser Arbeit führte ebenfalls solch eine analytische Berechnung der Gegenterme durch und konnte somit die Ergebnisse in [119] bestätigen. Hier sollen nur die Resultate zusammengestellt werden. Der Gegenterm $\Sigma^{(1)}$ ist in vielen Standardlehrbüchern (z.B. [68]) zu finden und auch in

(2.164) explizit angegeben. Er ist IR-konvergent, denn mit (2.157) und (2.163) lautet er (alle Integrale sind hier als Pauli-Villars-regularisierte Integrale anzusehen)

$$\begin{aligned}\Sigma^{(1)} &= -i4\pi\alpha \int \frac{d^4q}{(2\pi)^2} \gamma_\mu \frac{1}{\not{p} + \not{q} - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{q^2 + i\epsilon} \Big|_{\not{p}=m} \\ &= m \frac{\alpha}{4\pi} \left(3 \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + \frac{3}{2} \right).\end{aligned}\quad (3.109)$$

Der Gegenterm $\tilde{\Sigma}^{(1)}$ (er sollte nicht verwechselt werden mit dem Gegenterm $\Sigma^{(1)'}!$) lautet

$$\begin{aligned}\tilde{\Sigma}^{(1)} &= -i4\pi\alpha \int \frac{d^4q}{(2\pi)^2} \gamma_\mu \frac{1}{(\not{p} + \not{q} - m + i\epsilon)^2} \gamma^\mu \frac{1}{q^2 + i\epsilon} \Big|_{\not{p}=m} \\ &= \frac{\alpha}{4\pi} \left(4 \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + 2 \ln \left(\frac{\mu^2}{m^2} \right) \right).\end{aligned}\quad (3.110)$$

Dieser Gegenterm ist also offensichtlich IR-divergent, da er im Limes $\mu \rightarrow 0$ divergiert. Betrachtet sei als nächstes der Gegenterm $\Sigma^{(A1)}$. Mit (3.40) folgt er zu

$$\begin{aligned}\Sigma^{(A1)}(\not{p}) &= (-i4\pi\alpha)^2 \int \frac{d^4q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4q_2}{(2\pi)^4} \frac{1}{q_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \\ &\quad \times \gamma_\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \Big|_{\not{p}=m} \\ &= m \left(\frac{\alpha}{4\pi} \right)^2 \left[\frac{9}{2} \ln^2 \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + 3 \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + 6 \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) \ln \left(\frac{\mu^2}{m^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + 3 \ln \left(\frac{\mu^2}{m^2} \right) - \frac{\pi^2}{2} + \frac{17}{4} \right].\end{aligned}\quad (3.111)$$

Auch dieser Gegenterm ist IR-divergent. Dabei ist es jedoch entscheidend, daß sich in der renormierten Selbstenergie die IR-Divergenzen der Gegenterme $\tilde{\Sigma}^{(1)}$ und $\Sigma^{(A1)}$ gegenseitig wegheben, denn sie kommen entsprechend (3.99) in der Kombination

$$\begin{aligned}&(-\Sigma^{(A1)} + \Sigma^{(1)}\tilde{\Sigma}^{(1)}) \langle n|\gamma_0|n \rangle \\ &= \left(\frac{\alpha}{4\pi} \right)^2 m \left(\frac{15}{2} \ln^2 \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + 3 \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + \frac{\pi^2}{2} - \frac{17}{4} \right) \langle n|\gamma_0|n \rangle\end{aligned}\quad (3.112)$$

vor. Somit ist (3.112) von der kleinen Photonenmasse μ unabhängig, d.h. IR-konvergent. Schließlich sei noch der Gegenterm $\Sigma^{(D1)}$ betrachtet. Er lautet

$$\begin{aligned}\Sigma^{(D1)}(\not{p}) &= (-i4\pi\alpha)^2 \int \frac{d^4q_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4q_2}{(2\pi)^4} \frac{1}{q_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \\ &\quad \times \gamma_\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_\nu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\nu \Big|_{\not{p}=m} \\ &= m \left(\frac{\alpha}{4\pi} \right)^2 \left[3 \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) - \frac{11}{3} \pi^2 + \frac{5}{2} + A_1 + A_2 \right]\end{aligned}\quad (3.113)$$

mit den Konstanten $A_1 \approx -33.71$ und $A_2 \approx 49.55$. Diese Konstanten sind numerische Lösungen zweier Integrale, welche in [119] zu finden sind. Dieser Gegenterm ist also von der kleinen Photonemasse μ unabhängig, d.h. IR-konvergent. Mit den Gleichungen (3.109), (3.112) und (3.113) ist die μ -Unabhängigkeit, d.h. die IR-Konvergenz des renormierten Ausdrucks der Zwei-Photonen-Selbstenergie bezüglich aller Gegenterme demonstriert worden. Es muss jedoch noch gezeigt werden, inwiefern die unrenormierten Energieverschiebungen, welche natürlich ebenfalls Bestandteil der renormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie sind, IR-konvergent sind. Dies soll im folgenden Abschnitt untersucht werden.

3.4.3 Die Energieintegrationen und die Referenz-State-Divergenz

Die renormierte Zwei-Photonen-Selbstenergie setzt sich zusammen aus den Diagrammen der unrenormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie und aus den Gegentermen. Nachdem klar geworden ist, daß die Summe aller Gegenterme der renormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie IR-konvergent ist, müssen nun die Terme der unrenormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie auf IR-Konvergenz untersucht werden. Die räumlichen Integrale sind sowohl im Limes $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$ als auch im Limes $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rightarrow 0$ konvergent, wie man sich unter Verwendung der expliziten Lösungen der Diracgleichung leicht überzeugen kann. Somit sind nur die Energieintegrale in den Ausdrücken (3.100) bis (3.104) Gegenstand der Untersuchung. Die Energieintegrale lauten:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{12}}}{E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1}, \quad (3.114)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{12}}}{(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)^2}, \quad (3.115)$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{14}} e^{i\sqrt{E_2^2+i\epsilon} r_{23}} \\ \times \frac{1}{(E_t(1-i\epsilon) - E_n + E_1)(E_s(1-i\epsilon) - E_n + E_1 + E_2)(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)}, \quad (3.116)$$

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{13}} e^{i\sqrt{E_2^2+i\epsilon} r_{24}} \\ \times \frac{1}{(E_t(1-i\epsilon) - E_n + E_2)(E_s(1-i\epsilon) - E_n + E_1 + E_2)(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)}, \quad (3.117)$$

$$I_5 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{E_1^2+i\epsilon} r_{12}}}{(E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1)(E_s(1-i\epsilon) - E_n + E_1)}. \quad (3.118)$$

Natürlich könnte prinzipiell ein Photonpropagator mit kleiner Masse μ verwendet werden, um die IR-Divergenzen zu regularisieren. Das Problem in solch einem Zugang besteht jedoch darin, daß die obigen Energieintegrale im Zwei-Schleifen-Fall nicht analytisch berechnet werden können. Deshalb muß die Diskussion der IR-Problematik auf anderem Weg erfolgen.

Im Gegensatz zu den UV-Divergenzen, welche bei großen Schleifenimpulsen auftreten, liegen IR-Divergenzen immer im endlichen Bereich des Integrationsgebietes. Deshalb könnte zunächst jeder Pol der obigen Integranden Quelle einer IR-Divergenz sein. Es kann jedoch allgemein gezeigt werden, daß tatsächlich nur die Summanden $r, s, t = n$ für beliebige äußere Zustände n Quelle einer IR-Divergenz sein können. Betrachtet sei dazu die typische Form des Nenners eines Energieintegrals in der komplexen Ebene E :

$$\frac{1}{E_r - E_n - E - i\epsilon \operatorname{sign}(E_r)} \equiv \frac{1}{\Delta - E - i\epsilon \operatorname{sign}(E_r)} \quad (3.119)$$

Es gibt zwei unterschiedlich geartete Pole:

1. Pole bei $E \neq 0$, d.h. $\Delta \neq 0$,
2. Pol bei $E = 0$, d.h. $\Delta = 0$.

In der Abbildung 3.29 wird klar, warum der Integrationskontur im Fall $\Delta \neq 0$ verformt werden kann und warum solch eine Verformung des Integrationskonturs im Fall $\Delta = 0$ nicht durchgeführt werden kann. Deshalb stellen die Pole des obigen Integranden bei $E \neq 0$ keine Quelle von IR-Divergenzen dar, und nur Pole bei $E = 0$ können Ursache von IR-Divergenzen sein. Der wichtige Fall, wenn der äußere Zustand der Grundzustand ist, d.h. $n = 1s_{1/2}$, soll genauer betrachtet werden. Dazu ist es sehr zweckmäßig, die obigen Integrale in eine Form umzuschreiben, welche später bei der numerischen Auswertung ebenfalls benötigt wird. Diese Umschreibung der Integrale wird im Anhang für das Grundintegral I_1 explizit vorgeführt. Die anderen Integrale I_3, I_4, I_5 können durch Partialbruchzerlegung auf dieses Grundintegral reduziert werden. Das Integral I_2 kann durch Differentiation ebenfalls auf das Grundintegral I_1 zurückgeführt werden. Die Ergebnisse lauten demnach für den $n = 1s_{1/2}$ -Grundzustand ($n = 1s_{1/2}$):

$$I_1 = 2i \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{E_r - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_r)} \quad (3.120)$$

$$I_2 = 2i \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{(E_r - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_r))^2} \quad (3.121)$$

$$I_3 = (2i)^2 \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \sin(E_1 r_{14}) \sin(E_2 r_{23}) [1 + S^{\text{in}}(E_1, E_2)] \\ \times \frac{1}{[E_t - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_t)][E_s - E_n + (E_1 + E_2) \operatorname{sign}(E_s)][E_r - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_r)]} \quad (3.122)$$

$$I_4 = (2i)^2 \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \sin(E_1 r_{13}) \sin(E_2 r_{24}) [1 + S^{\text{cr}}(E_1, E_2)] \\ \times \frac{1}{[E_t - E_n + E_2 \operatorname{sign}(E_t)][E_s - E_n + (E_1 + E_2) \operatorname{sign}(E_s)][E_r - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_r)]} \quad (3.123)$$

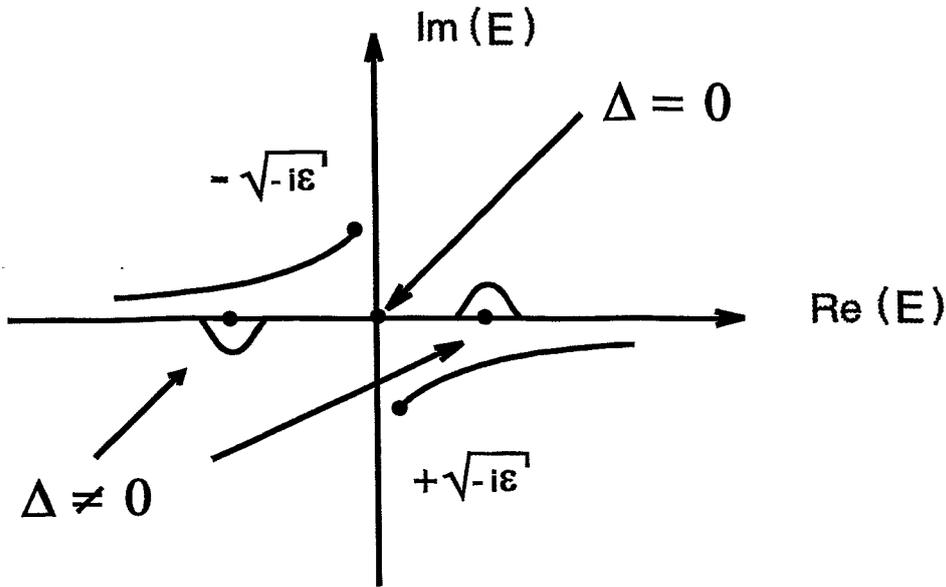


Abbildung 3.29: Die Schnitte des Photonpropagators können immer so gewählt werden, daß sie auch im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ nicht mit den Polen bei $E = E_r - E_n \neq 0$ des Integranden zusammenfallen. Deshalb ist es immer möglich, den Integrationsweg der Energieintegration so zu verformen, daß die Pole bei $E = E_r - E_n \neq 0$ umlaufen werden. Das bedeutet, daß diese Pole keine Quelle von IR-Divergenzen sein können. Jedoch liegen die Verzweigungspunkte des Photonpropagators im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ genau bei dem Koordinatenursprung der komplexen E -Ebene. Deshalb fallen sie im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ auch genau mit dem Pol bei $E = 0$ zusammen. Der Integrationskontur kann deshalb für diesen Pol nicht verformt werden. Wenn dieser Pol bei $E = 0$ keine hebbare Singularität des gesamten Integranden ist, sind deshalb IR-Divergenzen an diesen Stellen im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ zu erwarten.

$$I_5 = 2i \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{[E_r - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_r)][E_s - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_s)]} (1 + S^{\text{ac}}(E_1)) . \quad (3.124)$$

Die Funktionen $S^{\text{in}}(E_1, E_2)$, $S^{\text{cr}}(E_1, E_2)$, $S^{\text{ac}}(E_1)$ sind etwas umfangreicher und wurden deshalb im Anhang aufgenommen. Die Vorteile dieser zunächst vielleicht etwas umständlich erscheinenden Schreibweise der Integrale sind:

1. Es konnten die $i\epsilon$ -Vorschriften zum Umlaufen der Pole in der komplexen E_1, E_2 -Ebene fallengelassen werden, denn es existieren keine Polstrukturen, solange E_1, E_2 nicht gegen 0 geht. Dies stellt selbstverständlich eine wesentliche Vereinfachung in der späteren numerischen Auswertung der Energieintegrale dar, jedoch gilt diese Aussage über das Verschwinden der Pole nur für den Grundzustand, d.h. $n = 1s_{1/2}$.
2. Es ist nun klar, daß Polstrukturen nur im Limes $E_1, E_2 \rightarrow 0$ auftreten und wenn $r, s, t = n$ gilt.
3. Die umgeschriebenen Energieintegrale erlauben die wichtige Näherung $S^{\text{in}}(E_1, E_2) \rightarrow$

0 , $S^{\text{cr}}(E_1, E_2) \rightarrow 0$, $S^{\text{ac}}(E_1) \rightarrow 0$, welche sich numerisch überprüfen läßt. Dieser Punkt wird im Abschnitt *Numerische Auswertung* genauer behandelt.

Es werden jetzt die Energieintegrale auf IR-Divergenz hin untersucht. Die soeben erwähnte Näherung $S^{\text{in}}, S^{\text{cr}}, S^{\text{ac}} \rightarrow 0$ wird dabei jedoch *nicht verwendet*. Der nun folgende Beweis der IR-Konvergenz gilt also allgemein ohne Verwendung irgendwelcher Näherungen für den Grundzustand der Zwei-Photonen-Selbstenergie.

Eine Divergenz kann auftreten, wenn der Nenner 0 wird. Dies ist aber nur in jenen Summanden der Fall, in denen $r, s, t = n$ gilt und der Limes $E_1, E_2 \rightarrow 0$ betrachtet wird.

I_1 : Für den Summanden $r = n$ lautet das Integral

$$I_1(r = n) = 2i \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{E_1}. \quad (3.125)$$

Wegen $\sin(E_1 r_{12}) \rightarrow E_1 r_{12}$ für $E_1 \rightarrow 0$ ist das Integral (3.125) offensichtlich IR-konvergent.

I_2 : Für den Summanden $r = n$ lautet das Integral

$$I_2(r = n) = 2i \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{E_1^2}. \quad (3.126)$$

Dieses Integral ist im Limes $E_1 \rightarrow 0$ IR-divergent.

I_3 : Der Summand $r, t = n$ lautet (man beachte, daß die anderen Terme von I_3 sich gegenseitig wegheben, wenn $r, t = n$ gesetzt wird)

$$I_3(r, t = n) = (2i)^2 \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{14}) \sin(E_2 r_{23})}{E_1^2 (E_s - E_n + (E_1 + E_2) \text{sign}(E_s))}. \quad (3.127)$$

Dieses Integral divergiert im Limes $E_1 \rightarrow 0$, also sogar schon für den Fall $r, t = n$, d.h. jeder Summand über s divergiert im IR-Limes.

I_4 : Der Summand $r, s, t = n$ lautet

$$I_4(r, s, t = n) = (2i)^2 \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{13}) \sin(E_2 r_{24})}{E_2 (E_1 + E_2) E_1}. \quad (3.128)$$

Dieses Integral ist IR-konvergent, denn im Limes $E_1, E_2 \rightarrow 0$ geht mit $\sin(E_1 r_{13}) \rightarrow E_1 r_{13}$ und $\sin(E_2 r_{24}) \rightarrow E_2 r_{24}$ der Integrand in $1/(E_1 + E_2)$ über. Solch ein Integrand ist aber IR-konvergent, wie sich leicht nachprüfen läßt.

I_5 : Der Summand $r, s = n$ lautet

$$I_5(r, s = n) = 2i \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{E_1^2}. \quad (3.129)$$

Es ist klar, daß dieses Integral wie (3.126) IR-divergent ist.

(Die Terme $S^{\text{in}}(E_1, E_2)$, $S^{\text{cr}}(E_1, E_2)$, $S^{\text{ac}}(E_1)$ verschwinden in diesen hier betrachteten Fällen zur Untersuchung der IR-Divergenz!) Wie bereits oben erwähnt wurde, ist zu erwarten, daß sich die IR-Divergenzen gegenseitig wegheben werden. Dies ist auch tatsächlich der Fall. Um dies zu sehen, muß die Summe aus den IR-divergenten Integralen I_2 , I_3 und I_5 betrachtet werden, jedoch mit den richtigen Koeffizienten, wie sie in der renormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie auftreten. Dabei ist auch zu beachten, daß das Integral I_3 für jedes s IR-divergent ist, so daß die Summe über s betrachtet werden muß. Die Kombination entsprechend der renormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie (3.99) lautet also

$$\begin{aligned}
& (\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E_n) | n \rangle - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle) (-i\alpha) I_2(r = n) \frac{1}{r_{12}} \langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | nn \rangle \\
& + \alpha^2 \sum_s I_3(r, t = n) \frac{1}{r_{14}} \frac{1}{r_{23}} \langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | nn \rangle \langle ns | \alpha_\nu \alpha^\nu | sn \rangle \\
& - i \Sigma^{(1)} \alpha I_5(r, s = n) \frac{1}{r_{12}} \langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | n \rangle \langle n | \gamma_0 | n \rangle \\
= & -i\alpha \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E_n) | n \rangle I_2(r = n) \frac{1}{r_{12}} \langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | nn \rangle \\
& + \alpha^2 \sum_s I_3(r, t = n) \frac{1}{r_{14}} \frac{1}{r_{23}} \langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | nn \rangle \langle ns | \alpha_\nu \alpha^\nu | sn \rangle \\
= & \left(-i\alpha \frac{1}{r_{14}} I_2(r = n) \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E_n) | n \rangle \right. \\
& \left. + \alpha^2 \frac{1}{r_{14}} \frac{1}{r_{23}} \sum_s \langle ns | \alpha_\nu \alpha^\nu | sn \rangle I_3(r, t = n) \right) \langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | nn \rangle \\
\equiv & (\mathcal{IR}) \langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | nn \rangle, \tag{3.130}
\end{aligned}$$

wobei in der 2. Zeile $I_2(r = n) = I_5(r, s = n)$ verwendet wurde. Zudem wurde auch die Bezeichnung der Integrationsvariable r_{12} im 1. Summanden der 3. Zeile verändert, d.h. $r_{12} \rightarrow r_{14}$. Der Faktor (\mathcal{IR}) ist jedoch IR-konvergent, denn mit (3.100), (3.114) und (3.120) folgt zunächst

$$\begin{aligned}
\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E_n) | n \rangle & = -i\alpha \frac{1}{r_{23}} \sum_s I_1 \langle ns | \alpha_\mu \alpha^\mu | sn \rangle \\
& = (-i\alpha)(2i) \frac{1}{r_{23}} \sum_s \langle ns | \alpha_\mu \alpha^\mu | sn \rangle \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\sin(E_2 r_{23})}{E_s - E_n + E_2 \text{sign}(E_s)}. \tag{3.131}
\end{aligned}$$

Wird diese Gleichung in (3.130) eingesetzt, so folgt

$$(\mathcal{IR}) = \sum_s \frac{\langle ns | \alpha_\mu \alpha^\mu | sn \rangle}{r_{14} r_{23}} \left((-i\alpha)(-i\alpha)(2i) I_2(r = n) \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\sin(E_2 r_{23})}{E_s - E_n + E_2 \text{sign}(E_s)} \right)$$

$$\begin{aligned}
& +\alpha^2 I_3(r, t = n) \Big) \\
& = -\alpha^2 (2i)^2 \sum_s \frac{\langle ns | \alpha_\mu \alpha^\mu | sn \rangle}{r_{14} r_{23}} \left[\int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{14})}{E_1^2} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\sin(E_2 r_{23})}{E_s - E_n + E_2 \operatorname{sign}(E_s)} \right. \\
& \quad \left. - \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{14}) \sin(E_2 r_{23})}{E_1^2 (E_s - E_n + (E_1 + E_2) \operatorname{sign}(E_s))} \right] \\
& = -\alpha^2 (2i)^2 \sum_s \frac{\langle ns | \alpha_\mu \alpha^\mu | sn \rangle}{r_{14} r_{23}} \left(\int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \sin(E_1 r_{14}) \sin(E_2 r_{23}) \right. \\
& \quad \left. \times \frac{1}{E_1^2 (E_s - E_n + E_2 \operatorname{sign}(E_s)) (E_s - E_n + (E_1 + E_2) \operatorname{sign}(E_s))} \right). \quad (3.132)
\end{aligned}$$

Dieses Integral hat jedoch sowohl für den Fall $E_s - E_n \equiv \Delta > 0$ als auch für den Fall $E_s - E_n \equiv \Delta < 0$ keine Pole. Wird schließlich auch der Fall $E_s = E_n = \Delta = 0$, d.h. $s = n$, betrachtet, so folgt für den obigen Ausdruck

$$\begin{aligned}
(\mathcal{IR}) & = -\alpha^2 (2i)^2 \frac{\langle nn | \alpha_\mu \alpha^\mu | nn \rangle}{r_{14} r_{23}} \\
& \quad \times \left(\int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \sin(E_1 r_{14}) \sin(E_2 r_{23}) \frac{1}{E_1} \frac{1}{E_2} \frac{1}{E_1 + E_2} \right). \quad (3.133)
\end{aligned}$$

Dieses Integral ist aber offensichtlich im Limes $E_1, E_2 \rightarrow 0$ konvergent. Somit ist bewiesen worden, daß sich tatsächlich alle IR-Divergenzen in der unrenormierten und renormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie für den wichtigen Fall des Grundzustandes $n = 1s_{1/2}$ gegenseitig wegheben. Dadurch wird eine Auswertung der eichinvarianten Untergruppe $\text{SESE}^{\text{a,red,b),c)}$ vom physikalischen Standpunkt aus überhaupt erst möglich.

4 Numerische Auswertung

Ich hätte viele Dinge begriffen, hätte man sie mir nicht erklärt.
Stanislaw Jerzy (1909 – 1966)

4.1 Die Methode der Partialwellen–Renormierung

In der numerischen Auswertung der Zwei–Photonen–Selbstenergie wurde die Methode der Partialwellen–Renormierung (PWR) verwendet, welche in den letzten Jahren zur Berechnung von Strahlungskorrekturen durch *Persson, Lindgren, Salomonson, Ynnerman* (1993) [120] und *Quiney, Grant* (1993) [121] unabhängig voneinander entwickelt wurde. Die grundlegende Idee ist dabei, die unrenormierten Energieverschiebungen und die entsprechenden Gegenterme nach einzelnen Partialwellen zu entwickeln. Dabei treten drei Aspekte auf:

1. Partialwellenentwicklung des unrenormierten Ausdrucks der Energieverschiebung
2. Umschreiben der Gegenterme in eine Struktur, welche sehr ähnlich der unrenormierten Energieverschiebung ist, d.h. insbesondere Photonenpropagatoren enthalten
3. Partialwellenentwicklung der Gegenterme

In diesem Kapitel wird dieser alternative Renormierungszugang im Einzelnen erläutert.

4.1.1 PWR der Selbstenergie in Störungstheorie erster Ordnung

Zunächst soll die PWR der Selbstenergie in 1. Ordnung Störungstheorie betrachtet werden. Einerseits ist es sinnvoll, die Methode der PWR an einem einfacheren Fall zu erläutern, andererseits ist die Selbstenergie der Ordnung α auch Bestandteil der Zwei–Photonen–Selbstenergie. Der renormierte Ausdruck der Selbstenergie der Ordnung α wurde in (3.34) angegeben und soll hier noch einmal notiert werden:

$$\begin{aligned}\Delta E_n^{\text{SE,ren}} &= \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle - \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \\ &= \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) \varphi_n(\mathbf{r}_2) \\ &\quad - \Sigma^{(1)} \int d^3 \mathbf{r}_1 \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \gamma_0 \varphi_n(\mathbf{r}_1) .\end{aligned}\tag{4.1}$$

Dabei war der Selbstenergieoperator, welcher im Energie–Orts–Raum eine Funktion der Energie und der Koordinaten $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ ist, definiert als

$$\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) = i 4 \pi \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \alpha^\mu S_F(E_n - E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \alpha^\nu D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) .\tag{4.2}$$

Das Einsetzen der expliziten Darstellung des Elektronenpropagators und der expliziten Form des Photonpropagators führt somit für die unrenormierte Energieverschiebung auf:

$$\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle = -i\alpha \sum_r \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{\langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | rn \rangle e^{\sqrt{E^2 + i\epsilon} r_{12}}}{E_r(1 - i\epsilon) - E_n + E} \frac{1}{r_{12}}. \quad (4.3)$$

Die Kontur der Energieintegration ist in Abbildung 4.1 ersichtlich. Durch diese eindeuti-

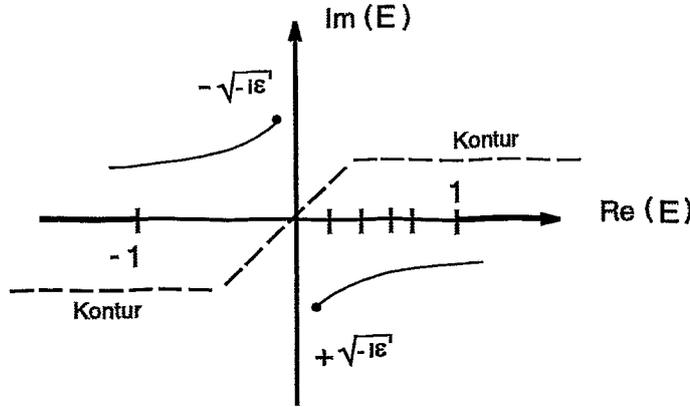


Abbildung 4.1: Der Integrationsweg in der komplexen E -Ebene.

ge Festlegung des Integrationsweges in der komplexen E -Ebene kann die $i\epsilon$ -Vorschrift im Photonpropagator fallengelassen werden. Wie bereits erwähnt wurde, kann obiges Energieintegral in der komplexen Ebene umgeschrieben werden, so daß man

$$\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle = -i\alpha(2i) \int_0^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{\langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | rn \rangle \sin(Er_{12})}{E_r - E_n + E \operatorname{sign}(Er)} \frac{1}{r_{12}} \quad (4.4)$$

erhält. In diesem Ausdruck wird entlang der reellen E -Achse integriert. Der Massenterm in der Pauli-Villars-Regularisierung war gegeben durch (im on-shell-Renormierungsschema)

$$\Sigma^{(1)} = m \frac{3\alpha}{4\pi} \left(\ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + \frac{3}{2} \right). \quad (4.5)$$

In der Abbildung 4.2 ist der renormierte Ausdruck der Selbstenergie in 1. Ordnung Störungstheorie noch einmal dargestellt. Die Gleichung (4.1) ist die Basis für die Methode der Partialwellenrenormierung. In diesem Zugang ist es nicht erforderlich, eine Regularisierung (z.B. dimensionale oder Pauli-Villars-Regularisierung) der divergierenden Integrale in (4.1) durchzuführen. Dazu wird eine Entwicklung des Photonpropagators nach Partialwellen in der renormierten Energieverschiebung in (4.1) vorgenommen. Zunächst sei die Partialwellenentwicklung des Photonpropagators in der unrenormierten Energieverschiebung (4.4) betrachtet:

$$\begin{aligned} \frac{\sin(Er_{12})}{r_{12}} &= E \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) j_L(Er_1) j_L(Er_2) \left[\frac{4\pi}{2L+1} \sum_{M=-L}^L Y_{LM}(\theta_1, \varphi_1) Y_{LM}^*(\theta_2, \varphi_2) \right] \\ &= E \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) C^L(1) C^L(2) j_L(Er_1) j_L(Er_2), \end{aligned} \quad (4.6)$$

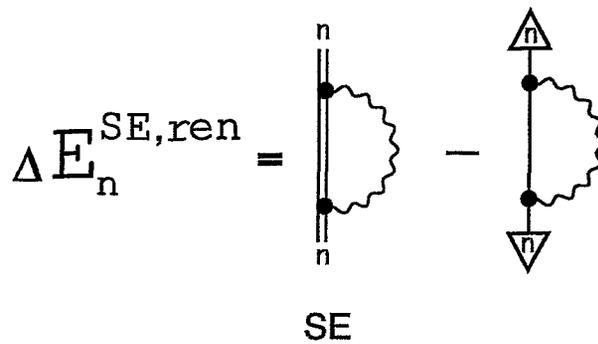


Abbildung 4.2: Die diagrammatische Darstellung der renormierten Selbstenergie eines gebundenen Elektrons im Zustand $|n\rangle$.

wobei $r \equiv |\mathbf{r}|$ definiert wurde und $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ die Kugelfunktionen sowie $j_L(Er)$ die sphärischen Besselfunktionen sind [122]. Ebenso wurde in (4.6) der sphärische Winkeltensor \mathbf{C}^L definiert. Mit dieser Entwicklung läßt sich die unrenormierte Energieverschiebung (4.4) offenbar als Summe über einzelne Partialwellen schreiben:

$$\begin{aligned}
 \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle &= \sum_{L=0}^{\infty} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}(L)}(E_n) | n \rangle \\
 &= -i\alpha(2i) \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \int_0^{\infty} \frac{dE}{2\pi} E \\
 &\quad \times \frac{\langle nr | \alpha_{\mu}(1) \alpha^{\mu}(2) \mathbf{C}^L(1) \mathbf{C}^L(2) j_L(Er_1) j_L(Er_2) | rn \rangle}{E_r - E_n + E \text{ sign}(E_r)}. \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

Der Vorteil solch eines Zugangs zur Berechnung der Selbstenergie eines gebundenen Elektrons besteht in der UV- und IR-Konvergenz jedes einzelnen Summanden der unrenormierten Selbstenergie. Nur die Summe über alle Summanden der unrenormierten Selbstenergie ist wieder UV-divergent. Das nächste Ziel ist es deshalb, solch eine Entwicklung nach Partialwellen auch im Massengegenterm zu erreichen. Der Grundgedanke ist dabei der folgende: Um solch eine PWR auch im Massengegenterm zu ermöglichen, muß der Gegenterm offenbar in solch eine Form umgeschrieben werden, welche der Struktur der unrenormierten Selbstenergie eines gebundenen Elektrons ähnlich ist und insbesondere einen Photonpropagator enthält. Dies kann unter Verwendung des Selbstenergieoperators eines freien Elektrons

$$\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1}) = i4\pi\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \alpha^{\mu} S_F^0(E_{p_1} - E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \alpha^{\nu} D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (4.8)$$

tatsächlich erreicht werden. Dieser Operator ist jedoch nur für freie Elektronenzustände definiert. Deshalb müssen die gebundenen Zustände $|n\rangle$ nach freien Elektronenzuständen entwickelt werden. Der freie Elektronenzustand $|p_1\rangle$ ist Lösung der freien Diracgleichung in sphärischen Koordinaten. Der äußere Zustand $|n\rangle$ bzw. $\langle n|$ wird also nach diesen freien Zuständen entwickelt

$$\langle n | = \varphi_n^{\dagger}(\mathbf{r}_1) = \int d^3\mathbf{p}_1 \varphi_n^{\dagger}(\mathbf{p}_1) e^{-i\mathbf{p}_1\mathbf{r}_1},$$

$$|n\rangle = \varphi_n(\mathbf{r}_2) = \int d^3\mathbf{p}_2 \varphi_n(\mathbf{p}_2) e^{i\mathbf{p}_2\mathbf{r}_2}. \quad (4.9)$$

Anschließend wird über das Impulsspektrum der ebenen Wellen integriert. Die mathematische Umsetzung dieser Gedanken ist das Kernstück der PWR-Methode. Das Resultat lautet

$$\begin{aligned} \Sigma^{(1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle &= \int d^3\mathbf{p}_1 \int d^3\mathbf{p}_2 \langle n|\mathbf{p}_1\rangle \langle \mathbf{p}_1|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1})|\mathbf{p}_2\rangle \langle \mathbf{p}_2|n\rangle \\ &= \int d^3\mathbf{p}_1 \langle n|\mathbf{p}_1\rangle \langle \mathbf{p}_1|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1})|\mathbf{p}_1\rangle \langle \mathbf{p}_1|n\rangle. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Dabei wurde in der 2. Zeile berücksichtigt, daß das Matrixelement der freien Selbstenergie wegen der Translationsinvarianz dieses Operators nur eine Funktion der Ortsdifferenz $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ist. Im Impulsraum bedeutet dies, daß das Matrixelement der freien Selbstenergie diagonal in den Impulsen $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ ist, d.h. es gilt $\langle \mathbf{p}_1|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1})|\mathbf{p}_2\rangle \sim \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$. Das Matrixelement der freien Selbstenergie ist in der Energie-Orts-Darstellung gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_1|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1})|\mathbf{p}_1\rangle &= -i\alpha \int d^3\mathbf{q} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{\langle \mathbf{p}_1\mathbf{q}|\alpha_\mu(1)\alpha^\mu(2)|\mathbf{q}\mathbf{p}_1\rangle e^{\sqrt{E^2+i\epsilon} r_{12}}}{E_q(1-i\epsilon) - E_{p_1} + E} \frac{1}{r_{12}} \\ &= -i\alpha(2i) \int d^3\mathbf{q} \int_0^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{\langle \mathbf{p}_1\mathbf{q}|\alpha_\mu(1)\alpha^\mu(2)|\mathbf{q}\mathbf{p}_1\rangle}{E_q - E_{p_1} + E \text{sign}(E_q) - i\epsilon \text{sign}(E_q)} \frac{\sin(Er_{12})}{r_{12}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Die Integrale über die Impulse verlaufen über das gesamte Impulsspektrum, d.h. sie schließen dabei eine Summation über die positiven und negativen Energien und die entsprechenden freien Elektronenzustände ein. Eine gute Beweisführung dieser Relationen kann z.B. in [126] und [127] gefunden werden. Die Äquivalenz (4.10) zusammen mit (4.11) ist die zentrale Aussage der Methode der Partialwellen-Renormierung in 1. Ordnung Störungstheorie. Entsprechend diesen Gleichungen kann also der Massengegenterm tatsächlich als eine Selbstenergie 1. Ordnung Störungstheorie eines freien Elektrons interpretiert werden, dessen ein- und auslaufender Impuls durch \mathbf{p}_1 gegeben ist. Mit (4.11) und der Entwicklung (4.6) kann deshalb der Massengegenterm ebenfalls als Summe über unendlich viele Partialwellen ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \Sigma^{(1)}\langle n|\gamma_0|n\rangle &= \sum_{L=0}^{\infty} \int d^3\mathbf{p}_1 \langle n|\mathbf{p}_1\rangle \langle \mathbf{p}_1|\gamma_0\hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)(L)}(E_{p_1})|\mathbf{p}_1\rangle \langle \mathbf{p}_1|n\rangle \\ &= -i\alpha(2i) \sum_{L=0}^{\infty} \int d^3\mathbf{p}_1 \int d^3\mathbf{q} \int_0^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{E}{E_{q,n_1} - E_{p_1,n_2} + E \text{sign}(E_{q,n_1}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q,n_1})} \sum_{n_1=1}^2 \sum_{n_2=1}^2 \\ &\quad \times \langle n|\mathbf{p}_1\rangle \frac{\langle \mathbf{p}_1\mathbf{q}|\alpha_\mu(1)\alpha^\mu(2)C^L(1)C^L(2)j_L(Er_1)j_L(Er_2)|\mathbf{q}\mathbf{p}_1\rangle}{E_{q,n_1} - E_{p_1,n_2} + E \text{sign}(E_{q,n_1}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q,n_1})} \langle \mathbf{p}_1|n\rangle. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Ebenso wie für die unrenormierte Selbstenergie ist auch für den Massengegenterm jeder einzelne Summand UV-konvergent und natürlich auch IR-konvergent. Die Entwicklung nach Partialwellen entspricht deshalb einer Regularisierung, so daß es nicht notwendig ist, eine Pauli-Villars-Regularisierung oder dimensionale Regularisierung in (4.1) vorzunehmen. Mit

den grundlegenden Gleichungen (4.7) und (4.12) kann somit die renormierte Energieverschiebung (4.1) als Summe über unendlich viele Partialwellen geschrieben werden. Sie lautet

$$\begin{aligned}\Delta E_n^{\text{SE,ren}} &= \sum_{L=0}^{\infty} \Delta E_n^{\text{SE,ren}(L)} \\ &= \sum_{L=0}^{\infty} \left(\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}(L)}(E_n) | n \rangle \right. \\ &\quad \left. - \int d^3 \mathbf{p}_1 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)(L)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle \right). \end{aligned} \quad (4.13)$$

In diesem Ausdruck ist nun jeder Summand konvergent, und die Summe ist selbstverständlich auch konvergent. In realen Rechnungen können selbstverständlich nur endlich viele Partialwellen berechnet werden, so daß die Summe über die Partialwelle L immer nur bis zu einem gewissen Maximalwert $L = L_{\text{max}}$ ausgeführt werden kann. Die gesuchte renormierte Energieverschiebung ergibt sich dann als Mittelwert der beiden höchsten berechneten Partialwellen, d.h.

$$\Delta E_n^{\text{SE,ren}} = \frac{\Delta E_n^{\text{SE,ren}(L_{\text{max}}-1)} + \Delta E_n^{\text{SE,ren}(L_{\text{max}})}}{2}. \quad (4.14)$$

Eine diagrammatische Darstellung dieser neuartigen Renormierungstechnik ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Auf numerische Berechnungen von Strahlungskorrekturen der Ordnung α un-

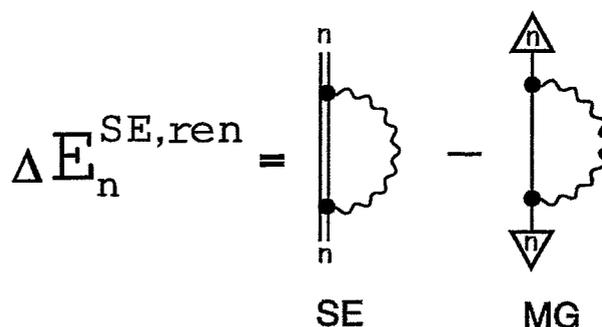


Abbildung 4.3: Die diagrammatische Darstellung der Partialwellen–Renormierung für die Selbstenergie eines gebundenen Elektrons in 1. Ordnung Störungstheorie. SE bezeichnet die unrenormierte Energieverschiebung und MG bezeichnet den Massengegenterm.

ter Verwendung dieser Methode sei auf [120, 121, 123] verwiesen. Bei diesen Berechnungen konnte festgestellt werden, daß der Beitrag der einzelnen Partialwellen umgekehrt proportional zur 3. Potenz der Partialwelle L abnahm, d.h.

$$\text{Konvergenz der Partialwellen: } \sim \frac{1}{L^3}. \quad (4.15)$$

Dieses sehr gute Konvergenzverhalten der PWR–Reihe zeigte sich in allen Ein–Schleifen–Rechnungen der Selbstenergie gebundener Elektronen [120, 121, 122, 123, 124, 125] und impliziert, daß bereits die Berücksichtigung der Summe der ersten wenigen Partialwellen genügt, um eine ausreichende Genauigkeit zu erzielen. Für die Ein–Schleifen–Selbstenergie

liegen z.B. typische Werte bei ca. 10 Partialwellen, um eine 10%-ige Genauigkeit für wasserstoffartige hochgeladene Systeme beliebiger Kernladungszahl ($Z = 10, \dots, 100$) zu erzielen. Die Genauigkeit der PWR steigt mit wachsender Kernladungszahl. Der Grund dafür liegt jedoch in der B-Spline-Methode zur Berechnung der radialen Komponenten des vollen Elektronenpropagators. In dieser später zu behandelnden Methode wird das betrachtete Atom in eine kugelförmige Box mit Radius R eingeschlossen. Die Randeffekte werden dann wesentlich, wenn das Elektron sich weiter vom Kern befindet. Dies ist aber gerade für Systeme mit kleinerer Kernladungszahl Z der Fall. Die folgende Tabelle verdeutlicht die Verbesserung der Genauigkeit am Beispiel des wasserstoffartigen Urans, denn es genügen bereits sehr wenige Partialwellen, um eine 0.2%-ige Genauigkeit zu erzielen. Dennoch ist selbst diese sehr gu-

L	$\Delta E_n^{\text{SE,ren}}(L)$
L=0	270.38 eV
L=1	376.80 eV
L=2	344.05 eV
$\frac{(\Delta E_n^{\text{SE,ren}}(1) + \Delta E_n^{\text{SE,ren}}(2))}{2}$	360.42 eV
exakt	359.50 eV

Tabelle 4.1: Für hochgeladene Systeme wie z.B. Uran ($Z = 92$) genügen bereits drei Partialwellen, um eine relativ hohe Genauigkeit zu erreichen.

te Genauigkeit für Systeme mit hoher Kernladungszahl Z für die spätere Auswertung der Zwei-Photonen-Selbstenergie nicht ausreichend. Eine Verbesserung kann wie folgt erreicht werden:

Der Term der Selbstenergie $\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}(L)} | n \rangle$ in (4.13) wird mit der später zu behandelnden *B-Spline-Methode* berechnet. Jedoch in dem Massengegenterm können alle Raumintegrale der Matrixelemente analytisch ausgewertet werden. Setzt man nämlich in den Ausdruck (4.12) die freien Elektronenzustände (2.45) mit den radialen Komponenten (2.47) ein, so sieht man, daß sich immer Raumintegrale über drei sphärische Besselfunktionen ergeben. Solche Integrale lassen sich jedoch analytisch lösen. Deshalb werden im Massengegenterm nur die Impulsintegrale numerisch berechnet, und man bezeichnet dies als *semianalytische Auswertung*. Diese analytische Integration über drei sphärische Besselfunktion wird später genauer diskutiert (s. Abschnitt Semianalytische Berechnung der Gegenterme). Diese beiden unterschiedlichen Methoden, *B-Spline-Methode* in der unrenormierten Selbstenergie und *semianalytische Auswertung* im Massengegenterm, implizieren unterschiedlich geartete numerische Ungenauigkeiten, welche sich nur schlecht gegenseitig wegheben, wenn eine direkte PWR (4.15) angewendet wird. Eine wesentliche Verbesserung der numerischen Genauigkeit kann aber durch eine leichte Modifikation von (4.13) erzielt werden, indem der zero-potential-Term ZP subtrahiert und wieder hinzuaddiert wird, d.h. (4.13) durch

$$\Delta E_n^{\text{SE,ren}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{L=0}^{\infty} \left(\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}(L)}(E_n) | n \rangle - \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}, Z=\epsilon}^{\text{SE}(L)}(E_n) | n \rangle \right) - \left(\int d^3 \mathbf{p}_1 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)(L)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle - \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}, Z=\epsilon}^{\text{SE}(L)}(E_n) | n \rangle \right) \quad (4.16)$$

ersetzt wird. Eine diagrammatische Darstellung wird in der Abbildung 4.4 gegeben. Dieser

$$\Delta E_n^{\text{SE,ren}} = \left[\text{SE} - \text{ZP} - \text{MG} - \text{ZP} \right]$$

Abbildung 4.4: Die diagrammatische Darstellung der Partialwellen–Renormierung entsprechend Gleichung (4.16). SE bezeichnet wieder die unrenormierte Energieverschiebung und MG den Massengegenterm. ZP ist der zero–potential–Term.

Zugang wurde im Rahmen der Partialwellen–Renormierung erstmalig von *Persson* in [126] vorgeschlagen, um in der Auswertung der Selbstenergie die erwähnten Schwierigkeiten besser zu kontrollieren, s.a. [125]. Es sei bemerkt, daß der zero–potential–Term ZP und der Massengegenterm MG natürlich nicht identisch sind. Beide Terme unterscheiden sich im Zähler, d.h. der zero–potential–Term kann aus dem Massengegenterm erhalten werden, indem im Zähler in (4.12) die Energie E_q durch die Energie E_n des äußeren Zustandes $|n\rangle$ ersetzt wird. Der Vorteil des obigen Zugangs besteht darin, daß sich eventuelle numerische Ungenauigkeiten jetzt gegenseitig wegheben werden, da der in der 1. Zeile subtrahierte Term $\langle n|\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}, Z=\epsilon}^{\text{SE}(L)}(E_n)|n\rangle$ ebenfalls mit der *B–Spline–Methode* berechnet wird. Der gleiche Term wird in der 3. Zeile wieder addiert, jedoch wird er nun wie der Massenterm *semianalytisch* ausgewertet. Die mit (4.16) erzielte Genauigkeit beträgt nun z.B. für $Z = 10$ etwa 0.1% und z.B. für $Z = 92$ etwa 0.001% [125]. Erst diese sehr hohe Genauigkeit insbesondere für Systeme mit großer Kernladungszahl erlaubt eine Berechnung der Zwei–Photonen–Selbstenergie mit der Methode der Partialwellen–Renormierung.

4.1.2 PWR der Zwei–Photonen–Selbstenergie

Der renormierte Ausdruck der Zwei–Photonen–Selbstenergie wurde in (3.99) zusammengefaßt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sei er hier noch einmal aufgeführt:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEa)red,b,c) ren}} &= \langle n|\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n)|n\rangle \\ &\quad \times \frac{\partial}{\partial E} \left([\langle n|\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E)|n\rangle]_{E=E_n} - \Sigma^{(1)} \langle n|\gamma_0|n\rangle \right) \\ &+ \left(\Delta E_{\text{bound}}^{\text{SESEb)} - \Sigma^{(A1)} \langle n|\gamma_0|n\rangle \right) + \left(\Delta E_{\text{bound}}^{\text{SESEc)} - \Sigma^{(D1)} \langle n|\gamma_0|n\rangle \right) \\ &- \Sigma^{(1)} \left(\langle n|\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{(1)}(E_n)|n\rangle - \tilde{\Sigma}^{(1)} \langle n|\gamma_0|n\rangle \right). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Partialwellenentwicklung der unrenormierten Energieverschiebung

Aus Gründen der Übersichtlichkeit soll zunächst wieder die Partialwellenentwicklung der unrenormierten Energieverschiebungen und anschließend die Partialwellenentwicklung der Massengegenterme betrachtet werden. Mit den umgeschriebenen Energieintegralen (3.120)

bis (3.124) lauten die unrenormierten Energieverschiebungen (3.100) bis (3.104) jetzt (die Terme $S^{\text{in}}(E_1, E_2)$, $S^{\text{cr}}(E_1, E_2)$, $S^{\text{ac}}(E_1)$ sind im Anhang angegeben):

$$\langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle = -i\alpha(2i) \sum_r \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | rn \rangle}{E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{r_{12}}, \quad (4.18)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial E} \langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E) | n \rangle \right) \Big|_{E=E_n} = i\alpha(2i) \sum_r \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | rn \rangle}{(E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r))^2} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{r_{12}}, \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEb})} &= \alpha^2(2i)^2 \sum_{r,s,t} \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{14})}{r_{14}} \frac{\sin(E_2 r_{23})}{r_{23}} \\ &\times (1 + S^{\text{in}}(E_1, E_2)) \langle nr | \alpha_\mu(4) \alpha^\mu(1) | tn \rangle \langle ts | \alpha_\nu(3) \alpha^\nu(2) | sr \rangle \\ &\times \frac{1}{[E_t - E_n + E_1 \text{sign}(E_t)][E_s - E_n + (E_1 + E_2) \text{sign}(E_s)][E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)]}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEc})} &= \alpha^2(2i)^2 \sum_{r,s,t} \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dE_2}{2\pi} \\ &\times (1 + S^{\text{cr}}(E_1, E_2)) \langle ns | \alpha_\mu(3) \alpha^\mu(1) | tr \rangle \langle tr | \alpha_\nu(4) \alpha^\nu(2) | sn \rangle \frac{\sin(E_1 r_{13})}{r_{13}} \frac{\sin(E_2 r_{24})}{r_{24}} \\ &\times \frac{1}{[E_t - E_n + E_2 \text{sign}(E_t)][E_s - E_n + (E_1 + E_2) \text{sign}(E_s)][E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)]}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle &= i\alpha(2i) \sum_{r,s} \int_0^\infty \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{r_{12}} \langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | sn \rangle \langle s | \gamma_0 | r \rangle \\ &\times \frac{1}{[E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)][E_s - E_n + E_1 \text{sign}(E_s)]} (1 + S^{\text{ac}}(E_1)). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Die Energieintegrationen werden entlang der reellen E_1, E_2 -Achse ausgeführt.

Mit der Entwicklung (4.6) folgt unmittelbar die Partialwellenentwicklung der unrenormierten Energieverschiebungen zu:

$$\begin{aligned}
\langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle &= \sum_{L_1=0}^{\infty} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}(L_1)}(E_n) | n \rangle \\
&= -i\alpha(2i) \sum_{L_1=0}^{\infty} (2L_1 + 1) \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} E_1 \\
&\quad \times \frac{\langle nr | \alpha_{\mu}(1) \alpha^{\mu}(2) \mathbf{C}^{L_1}(1) \mathbf{C}^{L_1}(2) j_{L_1}(E_1 r_1) j_{L_1}(E_1 r_2) | rn \rangle}{E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)}, \quad (4.23)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial E} \langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E) | n \rangle \right) \Big|_{E=E_n} &= \sum_{L_1=0}^{\infty} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}(L_1)}(E_n) | n \rangle \\
&= i\alpha(2i) \sum_{L_1=0}^{\infty} (2L_1 + 1) \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} E_1 \\
&\quad \times \frac{\langle nr | \alpha_{\mu}(1) \alpha^{\mu}(2) \mathbf{C}^{L_1}(1) \mathbf{C}^{L_1}(2) j_{L_1}(E_1 r_1) j_{L_1}(E_1 r_2) | rn \rangle}{(E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r))^2}, \quad (4.24)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{\text{SESEb})} &= \sum_{L_1=0}^{\infty} \sum_{L_2=0}^{\infty} \Delta E_n^{\text{SESEb})(L_1, L_2)} \\
&= \alpha^2(2i)^2 \sum_{L_1, L_2=0}^{\infty} (2L_1 + 1) (2L_2 + 1) \sum_{r, s, t_0} \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} E_1 \int_0^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} E_2 (1 + S^{\text{in}}(E_1, E_2)) \\
&\quad \times \langle nr | \alpha_{\mu}(4) \alpha^{\mu}(1) \mathbf{C}^{L_1}(4) \mathbf{C}^{L_1}(1) j_{L_1}(E_1 r_1) j_{L_1}(E_1 r_4) | tn \rangle \\
&\quad \times \langle ts | \alpha_{\nu}(3) \alpha^{\nu}(2) \mathbf{C}^{L_2}(3) \mathbf{C}^{L_2}(2) j_{L_2}(E_2 r_2) j_{L_2}(E_2 r_3) | sr \rangle \\
&\quad \times \frac{1}{[E_t - E_n + E_1 \text{sign}(E_t)][E_s - E_n + (E_1 + E_2) \text{sign}(E_s)][E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)]}, \quad (4.25)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{\text{SESEc})} &= \sum_{L_1=0}^{\infty} \sum_{L_2=0}^{\infty} \Delta E_n^{\text{SESEc})(L_1, L_2)} \\
&= \alpha^2(2i)^2 \sum_{L_1, L_2=0}^{\infty} (2L_1 + 1) (2L_2 + 1) \sum_{r, s, t_0} \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} E_1 \int_0^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} E_2 (1 + S^{\text{cr}}(E_1, E_2)) \\
&\quad \times \langle ns | \alpha_{\mu}(3) \alpha^{\mu}(1) \mathbf{C}^{L_1}(3) \mathbf{C}^{L_1}(1) j_{L_1}(E_1 r_1) j_{L_1}(E_1 r_3) | tr \rangle \\
&\quad \times \langle tr | \alpha_{\nu}(4) \alpha^{\nu}(2) \mathbf{C}^{L_2}(4) \mathbf{C}^{L_2}(2) j_{L_2}(E_2 r_2) j_{L_2}(E_2 r_4) | sn \rangle
\end{aligned}$$

$$\times \frac{1}{[E_t - E_n + E_2 \operatorname{sign}(E_t)][E_s - E_n + (E_1 + E_2) \operatorname{sign}(E_s)][E_r - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_r)]}, \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}}(E_n) | n \rangle &= \sum_{L=0}^{\infty} \langle n | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{bound}}^{\text{SE}(L_1)}(E_n) | n \rangle \\ &= i\alpha(2i) \sum_{L_1=0}^{\infty} \sum_{r,s} \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} E_1 \langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) C^{L_1}(1) C^{L_1}(2) j_{L_1}(E_1 r_1) j_{L_1}(E_1 r_2) | sn \rangle \langle s | \gamma_0 | r \rangle \\ &\times \frac{1}{[E_r - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_r)][E_s - E_n + E_1 \operatorname{sign}(E_s)]} (1 + S^{\text{ac}}(E_1)). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Diese Gleichungen stellen die Partialwellenentwicklung der unrenormierten Energieverschiebungen dar.

Partialwellenentwicklung der Gegenterme

Wie im Fall der Ein-Schleifen-Selbstenergie müssen nun auch die Gegenterme als Summe über Partialwellen ausgedrückt werden. Die PWE des Gegenterms $\Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$, welcher auch im Fall der Zwei-Photonen-Selbstenergie auftritt, wurde bereits im Ein-Schleifen-Fall eingehend behandelt, s. (4.10) und (4.12). Allerdings besteht in der renormierten Zwei-Photonen-Selbstenergie eine Besonderheit. Der Gegenterm $\Sigma^{(1)}$ erscheint nämlich einmal ohne den Faktor $\langle n | \gamma_0 | n \rangle$ und es ist deshalb zunächst unklar, wie eine PWE dieses Terms aussehen könnte. Das Virialtheorem der QED [128, 129, 130] im speziellen Fall relativistischer wasserstoffartiger Systeme liefert die Beziehung

$$E_n = \langle n | \gamma_0 | n \rangle + \underbrace{\langle n | V_{\text{Coulomb}} | n \rangle + \langle n | r \frac{\partial}{\partial r} V_{\text{Coulomb}} | n \rangle}_{=0 \text{ im Fall punktförmiger Atomkerne}}, \quad (4.28)$$

mit der Elektronmasse m und der Dirac-Energie E_n des Zustandes $|n\rangle$. Mit Hilfe dieser Gleichung kann also für den Term folgende Beziehung festgestellt werden

$$\Sigma^{(1)} = \Sigma^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle \frac{1}{E_n}. \quad (4.29)$$

Somit ist nun eine PWE auch für den Faktor $\Sigma^{(1)}$ in gewohnter Weise durchführbar. Dies ist in der Abbildung 4.5 noch einmal graphisch dargestellt. Jetzt sollen die neuen Gegenterme $\Sigma^{(A1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$, $\Sigma^{(D1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$ und $\hat{\Sigma}^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$ der Zwei-Photonen-Selbstenergie und ihre Entwicklung nach Partialwellen betrachtet werden.

In Analogie zum Massengegenterm im Ein-Schleifen-Fall (s. Gl. (4.10)) kann der Massengegenterm $\Sigma^{(A1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$ durch den Operator der freien Selbstenergie $\hat{\Sigma}^{(A1)}$ dargestellt werden. Der äußere Zustand $|n\rangle$ muß dabei wieder nach freien Elektronenzuständen entwickelt werden, zwischen denen der Operator der Selbstenergie $\hat{\Sigma}^{(A1)}$ wirkt:

$$\begin{aligned} \Sigma^{(A1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle &= \int d^3 \mathbf{p}_1 \int d^3 \mathbf{p}_2 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(A1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_2 \rangle \langle \mathbf{p}_2 | n \rangle \\ &= \int d^3 \mathbf{p}_1 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(A1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle, \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\Sigma^{(1)} = \frac{1}{E_n} \text{Diagram}$$

Abbildung 4.5: Die diagrammatische Darstellung der Partialwellen-Renormierung für den Faktor $\Sigma^{(1)}$.

wobei wieder wie im Ein-Schleifen-Fall die Eigenschaft $\langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(A1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_2 \rangle \sim \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$, d.h. die Diagonalität $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2$, verwendet wurde. Der Selbstenergieoperator ist durch

$$\begin{aligned} \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(A1)}(E_{p_1}) &= (i 4 \pi \alpha)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} D_{\mu\nu}(E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) D_{\rho\sigma}(E_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \\ &\times \alpha^\mu S_F^0(E_{p_1} - E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \alpha^\rho S_F^0(E_{p_1} - E_1 - E_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \alpha^\sigma S_F^0(E_{p_1} - E_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \alpha^\nu \end{aligned} \quad (4.31)$$

definiert. Einsetzen der freien Elektronenpropagatoren und Photonpropagatoren liefert unmittelbar

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(A1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle &= \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} r_{14}}}{r_{14}} \frac{e^{i\sqrt{E_2^2 + i\epsilon} r_{23}}}{r_{23}} \\ &\times \int d^3\mathbf{q}_1 d^3\mathbf{q}_2 d^3\mathbf{q}_3 \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_3 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(4) | \mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 | \alpha_\nu(2) \alpha^\nu(3) | \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 \rangle \\ &\times \frac{1}{[E_{q_1}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E_1][E_{q_2}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E_1 + E_2][E_{q_3}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E_1]} \end{aligned} \quad (4.32)$$

Wieder sind die Impulsintegrale über das gesamte Impulsspektrum zu führen, d.h. sie schließen immer eine Summation über die positiven und negativen Energiezustände ein. Das Energieintegral wird nun ebenso wie im Fall der unrenormierten Energieverschiebung umgeschrieben. Es ergibt sich zu

$$\begin{aligned} I'_3 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} r_{14}} e^{i\sqrt{E_2^2 + i\epsilon} r_{23}} \frac{1}{[E_{q_1}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E_1]} \\ &\times \frac{1}{[E_{q_2}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E_1 + E_2][E_{q_3}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E_1]} \\ &= (2i)^2 \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \sin(E_1 r_{14}) \sin(E_2 r_{23}) [1 + S^{\sin}(E_1, E_2)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \frac{1}{[E_{q_1} - E_{p_1} + E_1 \operatorname{sign}(E_{q_1}) - i\epsilon \operatorname{sign}(E_{q_1})]} \\
& \times \frac{1}{[E_{q_2} - E_{p_1} + (E_1 + E_2) \operatorname{sign}(E_{q_2}) - i\epsilon \operatorname{sign}(E_{q_2})]} \\
& \times \frac{1}{[E_{q_3} - E_{p_1} + E_1 \operatorname{sign}(E_{q_3}) - i\epsilon \operatorname{sign}(E_{q_3})]} . \tag{4.33}
\end{aligned}$$

Dabei ist zu beachten, daß hier die $i\epsilon$ -Vorschrift beibehalten werden muss, da natürlich jetzt Pole im Nenner auftreten können. Der Term $S^{\text{in}}(E_1, E_2)$ ergibt sich in einfacher Weise aus dem entsprechenden Term der umgeschriebenen Energieintegrale der unrenormierten Selbstenergie, indem die Energien der gebundenen Zustände, E_r, E_s, E_t durch die Energien der freien Zustände $E_{q_1}, E_{q_2}, E_{q_3}$ ersetzt werden. Es sollte dabei jedoch auch festgehalten werden, daß in $S^{\text{in}}(E_1, E_2)$ keine Pole entstehen können, so daß eine $i\epsilon$ -Vorschrift in diesem Term nicht notwendig ist. Das Einsetzen des umgeschriebenen Energieintegrals und der Entwicklung (4.6) in den obigen Ausdruck ergibt die Partialwellenentwicklung des Massengegenterms zu:

$$\begin{aligned}
\Sigma^{(A1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle &= \alpha^2 (2i)^2 \sum_{L_1=0}^{\infty} (2L_1 + 1) \sum_{L_2=0}^{\infty} (2L_2 + 1) \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} E_1 \int_0^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} E_2 \int d^3 \mathbf{p}_1 \\
& \times \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle \int d^3 \mathbf{q}_1 \int d^3 \mathbf{q}_2 \int d^3 \mathbf{q}_3 \\
& \times \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_3 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(4) C^{L_1}(1) C^{L_1}(4) j_{L_1}(E_1 r_1) j_{L_1}(E_1 r_4) | \mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1 \rangle \\
& \times \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 | \alpha_\nu(2) \alpha^\nu(3) C^{L_2}(2) C^{L_2}(3) j_{L_2}(E_2 r_2) j_{L_2}(E_2 r_3) | \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 \rangle \\
& \times \frac{(1 + S^{\text{in}}(E_1, E_2))}{[E_{q_1} - E_{p_1} + E_1 \operatorname{sign}(E_{q_1}) - i\epsilon \operatorname{sign}(E_{q_1})]} \\
& \times \frac{1}{[E_{q_2} - E_{p_1} + (E_1 + E_2) \operatorname{sign}(E_{q_2}) - i\epsilon \operatorname{sign}(E_{q_2})]} \\
& \times \frac{1}{[E_{q_3} - E_{p_1} + E_1 \operatorname{sign}(E_{q_3}) - i\epsilon \operatorname{sign}(E_{q_3})]} . \tag{4.34}
\end{aligned}$$

Als nächstes soll die Partialwellenentwicklung des Gegenterms $\Sigma^{(D1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$ betrachtet werden. Wieder werden die äußeren Zustände $|n\rangle$ nach freien Elektronenzuständen entwickelt zwischen denen der Operator $\hat{\Sigma}^{(D1)}$ wirkt:

$$\begin{aligned}
\Sigma^{(D1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle &= \int d^3 \mathbf{p}_1 \int d^3 \mathbf{p}_2 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(D1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_2 \rangle \langle \mathbf{p}_2 | n \rangle \\
&= \int d^3 \mathbf{p}_1 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(D1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle . \tag{4.35}
\end{aligned}$$

Die Diagonalität des Matrixelements dieses Operators in den Impulsen folgt ebenso aus der Translationsinvarianz dieses Operators im Energie-Orts-Raum. Dieser Selbstenergieoperator

ist durch

$$\begin{aligned} \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(D1)}(E_{p_1}) &= (i4\pi\alpha)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} D_{\mu\nu}(E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) D_{\rho\sigma}(E_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4) \\ &\quad \times \alpha^\mu S_F^0(E_{p_1} - E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \alpha^\rho S_F^0(E_{p_1} - E_1 - E_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \alpha^\nu S_F^0(E_{p_1} - E_2, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \alpha^\sigma \end{aligned} \quad (4.36)$$

definiert. Einsetzen der freien Elektronenpropagatoren und Photonenpropagatoren liefert unmittelbar

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(D1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle &= \alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} r_{13}}}{r_{13}} \frac{e^{i\sqrt{E_2^2 + i\epsilon} r_{24}}}{r_{24}} \\ &\quad \times \int d^3\mathbf{q}_1 d^3\mathbf{q}_2 d^3\mathbf{q}_3 \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_2 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(3) | \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3 \rangle \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3 | \alpha_\nu(2) \alpha^\nu(4) | \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_1 \rangle \\ &\quad \times \frac{1}{[E_{q_1}(1-i\epsilon) - E_{p_1} + E_1][E_{q_2}(1-i\epsilon) - E_{p_1} + E_1 + E_2][E_{q_3}(1-i\epsilon) - E_{p_1} + E_2]} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Das Energieintegral wird nun ebenso wie im Fall der unrenormierten Energieverschiebung umgeschrieben. Es ergibt sich zu

$$\begin{aligned} I'_4 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} e^{i\sqrt{E_1^2 + i\epsilon} r_{13}} e^{i\sqrt{E_2^2 + i\epsilon} r_{24}} \frac{1}{[E_{q_1}(1-i\epsilon) - E_{p_1} + E_1]} \\ &\quad \times \frac{1}{[E_{q_2}(1-i\epsilon) - E_{p_1} + E_1 + E_2][E_{q_3}(1-i\epsilon) - E_{p_1} + E_2]} \\ &= (2i)^2 \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \sin(E_1 r_{13}) \sin(E_2 r_{24}) [1 + S^{\text{cr}}(E_1, E_2)] \\ &\quad \times \frac{1}{[E_{q_1} - E_{p_1} + E_1 \text{sign}(E_{q_1}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q_1})]} \\ &\quad \times \frac{1}{[E_{q_2} - E_{p_1} + (E_1 + E_2) \text{sign}(E_{q_2}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q_2})]} \\ &\quad \times \frac{1}{[E_{q_3} - E_{p_1} + E_2 \text{sign}(E_{q_3}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q_3})]} \end{aligned} \quad (4.38)$$

Wieder wurde die $i\epsilon$ -Vorschrift beibehalten. Der Term $S^{\text{cr}}(E_1, E_2)$ ergibt sich ebenso aus dem entsprechenden Term des umgeschriebenen Energieintegrals der unrenormierten Energieverschiebung, indem die Energien der gebundenen Zustände, E_r, E_s, E_t abermals durch die Energien der freien Zustände $E_{q_1}, E_{q_2}, E_{q_3}$ ersetzt werden. In $S^{\text{cr}}(E_1, E_2)$ treten keine Pole auf, und so können wieder die $i\epsilon$ -Vorschriften in diesem Term fallen gelassen werden. Einsetzen des umgeschriebenen Energieintegrals und der Entwicklung (4.6) in den obigen Ausdruck ergibt die Partialwellenentwicklung des Massengegenterms zu:

$$\Sigma^{(D1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle = \alpha^2 (2i)^2 \sum_{L_1, L_2=0}^{\infty} (2L_1 + 1) (2L_2 + 1) \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} E_1 \int_0^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} E_2$$

$$\begin{aligned}
& \times \int d^3 \mathbf{p}_1 d^3 \mathbf{q}_1 d^3 \mathbf{q}_2 d^3 \mathbf{q}_3 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle \\
& \times \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_2 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(3) C^{L_1}(1) C^{L_1}(3) j_{L_1}(E_1 r_1) j_{L_1}(E_1 r_3) | \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3 \rangle \\
& \times \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3 | \alpha_\nu(2) \alpha^\nu(4) C^{L_2}(2) C^{L_2}(4) j_{L_2}(E_2 r_2) j_{L_2}(E_2 r_4) | \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_1 \rangle \\
& \times \frac{(1 + S^{\text{cr}}(E_1, E_2))}{[E_{q_1} - E_{p_1} + E_1 \text{sign}(E_{q_1}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q_1})]} \\
& \times \frac{1}{[E_{q_2} - E_{p_1} + (E_1 + E_2) \text{sign}(E_{q_2}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q_2})]} \\
& \times \frac{1}{[E_{q_3} - E_{p_1} + E_2 \text{sign}(E_{q_3}) - i\epsilon \text{sign}(E_{q_3})]} . \tag{4.39}
\end{aligned}$$

Schließlich sei der Massengegenterm $\tilde{\Sigma}^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle$ und seine entsprechende Partialwellenentwicklung betrachtet. Wie für den Massengegenterm im Ein-Schleifen-Fall (4.10) gilt die folgende Äquivalenz

$$\tilde{\Sigma}^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle = \int d^3 \mathbf{p}_1 \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle , \tag{4.40}$$

wobei der Operator $\hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}$ definiert ist durch:

$$\begin{aligned}
\gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1}) &= i 4 \pi \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \alpha^\mu S_F^0(E_{p_1} - E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \gamma_0 S_F^0(E_{p_1} - E, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \alpha^\nu \\
&\times D_{\mu\nu}(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) . \tag{4.41}
\end{aligned}$$

Wird wieder die explizite Form der Elektronenpropagatoren und des Photonpropagators in diese Gleichung eingesetzt, so folgt

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{p}_1 | \gamma_0 \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)}(E_{p_1}) | \mathbf{p}_1 \rangle &= i \alpha \int d^3 \mathbf{q}_1 \int d^3 \mathbf{q}_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \\
&\times \frac{\langle \mathbf{p}_1 \mathbf{q}_2 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(3) | \mathbf{q}_1 \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{q}_1 | \gamma_0 | \mathbf{q}_2 \rangle}{[E_{q_1}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E][E_{q_2}(1 - i\epsilon) - E_{p_1} + E]} \frac{e^{\sqrt{E^2 + i\epsilon} r_{13}}}{r_{13}} \\
&= i \alpha (2i) \int d^3 \mathbf{q}_1 \int d^3 \mathbf{q}_2 \int_0^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{\sin(E r_{13})}{r_{13}} \\
&\times \frac{\langle \mathbf{p}_1 \mathbf{q}_2 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(3) | \mathbf{q}_1 \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{q}_1 | \gamma_0 | \mathbf{q}_2 \rangle}{[E_{q_1} - E_{p_1} + E \text{sign}(E_{q_1})][E_{q_2} - E_{p_1} + E \text{sign}(E_{q_2})]} \\
&\times (1 + S^{\text{ac}}(E)) \frac{\sin(E r_{13})}{r_{13}} . \tag{4.42}
\end{aligned}$$

Dabei wurde bereits das umgeschriebene Energieintegral eingesetzt. Unter Verwendung der Reihendarstellung (4.6) folgt somit die Partialwellenentwicklung dieses Massengegenterms zu

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_{\text{free}}^{(1)} \langle n | \gamma_0 | n \rangle &= i\alpha(2i) \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \int d^3 \mathbf{p}_1 \int d^3 \mathbf{q}_1 \int d^3 \mathbf{q}_2 \int_0^{\infty} \frac{dE}{2\pi} E \\ &\times \langle n | \mathbf{p}_1 \rangle \frac{\langle \mathbf{p}_1 \mathbf{q}_2 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(3) C^L(1) C^L(3) j_L(Er_1) j_L(Er_3) | \mathbf{q}_1 \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{q}_1 | \gamma_0 | \mathbf{q}_2 \rangle}{[E_{q_1} - E_{p_1} + E \operatorname{sign}(E_{q_1})][E_{q_2} - E_{p_1} + E \operatorname{sign}(E_{q_2})]} \\ &\times (1 + S^{\text{ac}}(E)) \frac{\sin(Er_{13})}{r_{13}} \langle \mathbf{p}_1 | n \rangle. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Mit der hier dargelegten Methode der Partialwellenentwicklung können also alle Terme der renormierten Zwei–Photonen–Selbstenergie (4.17) als Doppelsumme über zwei Partialwellen dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}} &= \Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) unren}} - \delta m \\ &= \sum_{L_1=0}^{\infty} \sum_{L_2=0}^{\infty} \left(\Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) unren}}(L_1, L_2) - \delta m^{(L_1, L_2)} \right) \\ &= \sum_{L_1=0}^{\infty} \sum_{L_2=0}^{\infty} \Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}}(L_1, L_2). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Hier bezeichnet δm die Summe aller Massengegenterme. Jede einzelne Partialwelle ist IR– als auch UV–konvergent. Darin besteht auch der entscheidende Vorteil dieser Methode. Jede einzelne Partialwelle der Massengegenterme $\delta m^{(L_1, L_2)}$ subtrahiert von jeder einzelnen Partialwelle der unrenormierten Energieverschiebung $\Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) unren}}(L_1, L_2)$ den physikalisch irrelevanten Anteil. Somit verbleibt in jeder einzelnen Partialwelle $\Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}}(L_1, L_2)$ der physikalisch relevante, d.h. renormierte Anteil. Deshalb wird diese Methode als Partialwellenrenormierung (PWE) bezeichnet. Wie zuvor schon im Ein–Schleifen–Fall bemerkt wurde, erstreckt sich die Summe über die Partialwellen in realen Rechnungen selbstverständlich auch im Zwei–Schleifen–Fall nur bis zu einem Maximalwert $L_1 = L_{1 \text{ max}}$ und $L_2 = L_{2 \text{ max}}$. Um aus den einzelnen Partialwellen die Energieverschiebung zu ermitteln, wird zunächst die akkumulative Summe

$$\Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}(L) = \sum_{L_1, L_2} \Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}(L_1, L_2) \quad \text{mit } L_1 + L_2 = L \quad (4.45)$$

gebildet. Die gesuchte Energieverschiebung ergibt sich dann analog zum Ein–Schleifen–Fall (vergl. mit (4.14)) aus

$$\Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}} = \frac{\Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}(L_{\text{max}-1}) + \Delta E_n^{\text{SESEa,red,b,c) ren}(L_{\text{max}})}{2}. \quad (4.46)$$

Zur Konvergenz in einer doppelten Partialwellenentwicklung sei bemerkt, daß es keineswegs notwendig ist, solch eine Konvergenz in beiden Richtungen L_1 und L_2 festzustellen, um insgesamt eine Konvergenz der gesamten Summe zu erhalten, denn diese einzelnen Werte haben physikalisch keine Bedeutung. Wesentlich ist jedoch selbstverständlich eine Konvergenz der Energieverschiebung in der Gleichung (4.46), d.h. die Differenz zweier Energiewerte sollte mit

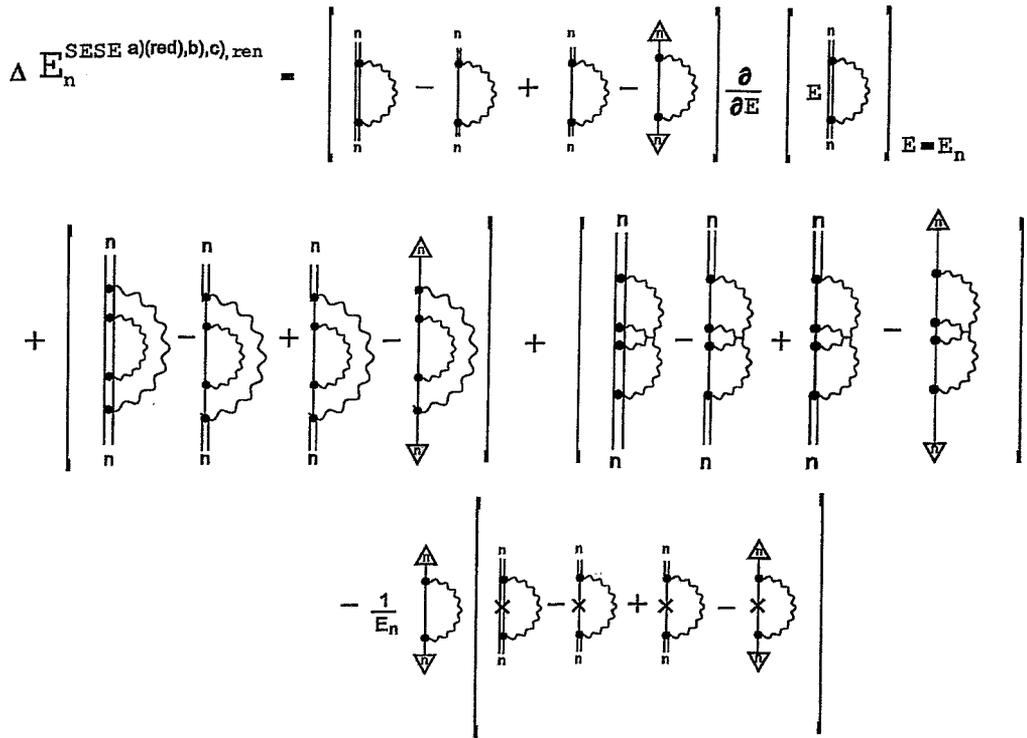


Abbildung 4.7: Die diagrammatische Darstellung der Partialwellen-Renormierung für die Zwei-Photonen-Selbstenergie eines gebundenen Elektrons. Um die numerische Genauigkeit und Stabilität zu erhöhen, wird der zero-potential-term eines jeden Diagramms addiert und wieder subtrahiert. Der subtrahierte zero-potential-term wird mit der B-Spline-Methode berechnet und der subtrahierte zero-potential-term wird semianalytisch ausgewertet.

jedoch ihre Summe, d.h. die Reihe selbst divergiert wieder. Ebenso wird der Massengegen-term δm in solch eine divergierende Reihe entwickelt, deren einzelne Summanden konvergent sind. Es wird nun Partialwelle für Partialwelle addiert, so daß ein endlicher, renormierter Ausdruck entsteht. Somit ergibt sich folgende allgemeine Gleichung für den renormierten Ausdruck der Selbstenergie in 1. Ordnung Störungstheorie:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_n^{\text{bound, ren}} &= \Delta E_n^{\text{bound, unren}} - \delta m \\
 &= \sum_{L=0}^{\infty} \Delta E_{n,L}^{\text{bound, unren}} - \sum_{L=0}^{\infty} \delta m_L \\
 &= \sum_{L=0}^{\infty} (\Delta E_{n,L}^{\text{bound, unren}} - \delta m_L) .
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

In divergierenden Reihen ist jedoch gerade solch eine Umordnung der einzelnen Summanden beider Reihen zunächst nicht erlaubt, wie sie in der letzten Zeile von (4.47) vorgenommen wurde, denn das Endergebnis kann, wie zahlreiche Beispiele aus der Mathematik zeigen, im allgemeinen Fall von solch einer Umgruppierung der einzelnen Summanden abhängen. Zudem werden die Divergenzen der unrenormierten Energieverschiebung nichtkovariant abgespalten,

denn die Regularisierung der divergenten Terme mittels Partialwellen ist nicht lorentzinvariant. Dieses Problem der PWR bezeichnet man als *Nichtkovariante Regularisierung* der Partialwellen–Renormierung, obwohl es sich bei der Partialwellenentwicklung um eine identische Umformung aller Terme handelt. Über die Verbindung zwischen Nichtkovarianz der Methode der PWR und einer kovarianten Regularisierung sei auf die ursprünglichen Arbeiten [120, 121] verwiesen. Hier sollen nur für die Berechnung der Zwei–Photonen–Selbstenergie relevanten Untersuchungen und der derzeitige Erkenntnisstand zusammenfassend dargelegt werden.

Um die Auswirkungen der Nichtkovarianz auf die Resultate der Lambverschiebung zu untersuchen, ist es notwendig, die PWR–Resultate der Lambverschiebung in 1. Ordnung Störungstheorie mit Ergebnissen zu vergleichen, welche mit einer kovarianten Renormierungsmethode, z.B. in [83], erzielt wurden. Für die Selbstenergie wurde solch ein Vergleich z.B. in [120, 121] und [125] durchgeführt. Wie bereits erwähnt, wurde dabei eine exzellente Übereinstimmung zwischen PWR und kovarianter Renormierung festgestellt. Ein anderer Weg zur Untersuchung dieser Problematik besteht in einer analytischen Untersuchung durch Verwendung der eichinvarianten und kovarianten Pauli–Villars–Regularisierung der unrenormierten Selbstenergie und des Massengegenterms. Durch die Ersetzung des Photonpropagators entsprechend (2.121) sowohl in der unrenormierten Selbstenergie als auch im Massengegenterm ändert sich dann die obige Gleichung zu

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{bound, ren}} &= \sum_{L=0}^{\infty} \left(\Delta E_{n,L}^{\text{bound, unren}} - \Delta E_{n,L,\Lambda}^{\text{bound, unren}} \right) - \sum_{L=0}^{\infty} (\delta m_L - \delta_{m,\Lambda}) \\ &= \sum_{L=0}^{\infty} \left(\Delta E_{n,L}^{\text{bound, unren}} - \delta m_L \right) - \sum_{L=0}^{\infty} \left(\Delta E_{n,L,\Lambda}^{\text{bound, unren}} - \delta_{m,\Lambda} \right). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Die Umgruppierung der Terme in der letzten Zeile ist jetzt zulässig, denn durch die Regularisierung sind die einzelnen Summen der 1. und 2. Zeile endlich. Die 1. Summe ist identisch mit (4.47), d.h. mit der Methode der Partialwellen–Renormierung, während die 2. Summe einen spuriosen Term darstellen und deshalb eine Art ungewollten Korrekturterm implizieren würde. Die Frage ist deshalb, ob diese 2. Summe der 2. Zeile im Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ generell, d.h. für beliebige Feynman–Diagramme der Bound–State–QED verschwindet. Damit wäre der Beweis der Zulässigkeit der PWR erbracht. Solch ein rigoroser und allgemein gültiger Beweis kann jedoch analytisch nicht geführt werden. Jedoch konnte für die Selbstenergie eines gebundenen Elektrons in 1. Ordnung Störungstheorie in [132] das Verschwinden dieses Terms analytisch demonstriert werden. Dies steht selbstverständlich in voller Übereinstimmung mit den oben erwähnten numerischen Untersuchungen.

Auch der Fall der Selbstenergie 1. Ordnung Störungstheorie eines Elektrons, welches sich in einem Atom befindet, welches wiederum einem äußeren elektrischen Coulomb–Feld ausgesetzt ist, ist untersucht worden. Man bezeichnet das entsprechende Feynman–Diagramm als *Coulomb screened self energy* (s. Abbildung 4.8). Dieser Fall ist deshalb von Bedeutung, da das Diagramm bereits zwei volle Elektronenpropagatoren enthält und demzufolge eine Verbindung zu den wichtigen Zwei–Schleifen–Rechnungen darstellt, in welchen zwei bzw. drei volle Elektronenpropagatoren auftreten. Zudem kann die Vakuumpolarisation in den Diagrammen der Selbstenergie–Vakuumpolarisation SEVP h),i) als äußeres sphärisch symmetrisches Potential angesehen werden [131]. In der oben erwähnten Arbeit [132] wurde gezeigt, daß auch in diesem Fall der spuriose Korrekturterm insgesamt verschwindet. Allerdings ist in [132] auch festgestellt worden, daß ein spurioser Term in dem divergenten zero–potential–Term ZP auftritt. Derselbe spuriose Term tritt auch im divergenten one–potential–Term OP

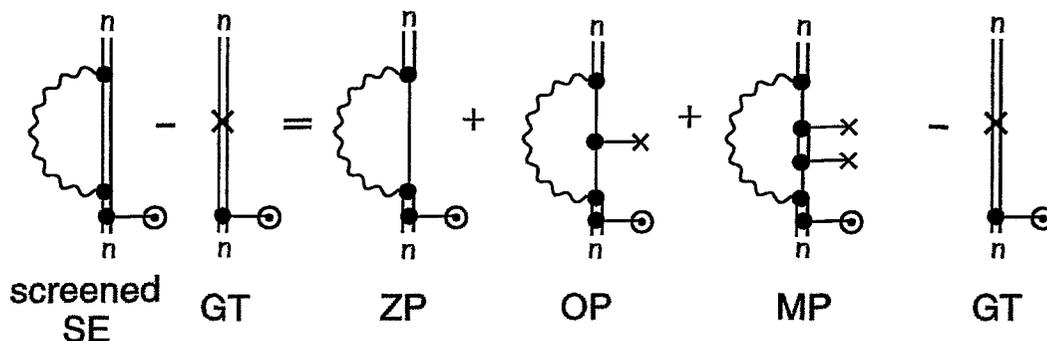


Abbildung 4.8: Die diagrammatische Darstellung der Selbstenergie eines gebundenen Elektrons, welches sich in einem äußeren Coulombfeld befindet. Hier bezeichnet screened SE die unrenormierte Selbstenergie des Elektrons, GT ist der Massengegenterm und ZP, OP und MP bezeichnet dabei wieder den zero-potential-, one-potential- und many-potential-Term.

auf, allerdings mit dem umgekehrten Vorzeichen, so daß sich beide spuriosen Terme gegenseitig wegheben. Insgesamt ist deshalb auch in diesem wichtigen Fall die PWR für beliebige Kernladungszahl Z anwendbar. Es sei jedoch ebenso erwähnt, daß in [133] u.a. auch vom Autor dieser Arbeit die analytischen Resultate von [132] einer Kritik unterworfen wurden. Unter Anwendung des Theorems von *Weierstrass* konnte ein rigoroser mathematischer Beweis geführt werden, daß sogar für die einzelnen Terme ZP und OP der in [132] hergeleitete spuriose Term nicht auftritt und deshalb ein gegenseitiges Wegheben dieser Terme gar nicht notwendig ist. Somit sind die wichtigsten Klassen von Ein-Schleifen-Diagrammen untersucht wurden, in denen die Partialwellenrenormierung anwendbar ist. Die genannten Arbeiten [132] und [133] sind die einzigen dem Autor bekannten analytischen Untersuchungen zur Anwendbarkeit der PWR.

Schließlich soll noch auf den wichtigen Fall einer Untersuchung in 2. Ordnung Störungstheorie hingewiesen werden. Der irreduzible Anteil des Loop-After-Loop-Diagramms wurde für hohe Kernladungszahl Z ($Z=92$) mittels kovarianter Regularisierung/Renormierung [96, 97] und mittels PWR berechnet [98]. Die Übereinstimmung der in diesen Arbeiten erzielten Resultate für den wichtigen Fall des wasserstoffartigen Urans ($Z = 92$) und Blei ($Z = 82$) war ebenso exzellent. Die Resultate stimmten mit einer Genauigkeit von mehr als 1% überein. Für Berechnungen dieser Korrektur in Systemen mit kleinen Kernladungszahlen und ihren Zusammenhang mit der $Z\alpha$ -Entwicklung sei ebenso auf die interessanten Untersuchungen mittels Techniken der Renormierungsgruppe der QED in [134] und die darin enthaltenen Referenzen verwiesen.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß zumindest für Systeme mit hoher Kernladungszahl Z die PWR eine kraftvolle Methode darstellt, um eichinvariante Diagramme der Bound-State-QED in 2. Ordnung Störungstheorie und insbesondere die Selbstenergie-Korrekturen zur Lamb-Verschiebung auszuwerten. Diese Aussage ist deshalb von Bedeutung, da eine numerische Auswertung der Zwei-Photonen-Selbstenergie unter Anwendung einer kovarianten Regularisierung/Renormierung wegen eines zu hohen numerischen Rechenaufwands zur Zeit nicht durchführbar scheint.

4.2 Die Winkelintegration der Matrixelemente

Die Integrale über die Winkel können analytisch ausgeführt werden. Dies soll in diesem Abschnitt dargelegt werden. Eine sehr gute Darstellung der benötigten Winkelintegrationen findet sich z.B. in [135]. Zunächst seien aber die grundlegenden Größen definiert. In einem ersten Unterabschnitt werden die Clebsch–Gordan–Koeffizienten und Wignerschen $3j$ -Symbole definiert und in einem zweiten Abschnitt die Kugelfunktionen und vektoriellen Kugelfunktionen. Schließlich wird im dritten Unterabschnitt die Winkelintegration eines allgemeinen Matrixelements behandelt.

Clebsch–Gordan–Koeffizienten und die Wigner $3j$ -Symbole

Zwei Drehimpulse mit vertauschbaren Operatoren $\hat{J}(1), \hat{J}(2)$ bilden ein quantenmechanisches System, welches durch das Produkt der beiden Einzelwellenfunktionen $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ beschrieben wird. Die Eigenfunktion zum Gesamtdrehimpulsoperator $\hat{J} = \hat{J}(1) + \hat{J}(2)$ kann als Linearkombination

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1, m_1, j_2, m_2}^{j, m} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (4.49)$$

der Einzeldrehimpulse dargestellt werden. Die dabei auftretenden Koeffizienten werden als *Clebsch–Gordan–Koeffizienten* bezeichnet. Neben Rekursionsrelationen, welche es erlauben, weitere Koeffizienten zu bestimmen, wenn ein Koeffizient bereits bekannt ist, existieren jedoch auch geschlossene Bildungsvorschriften. Eine allgemeine Bildungsvorschrift wurde z.B. von *Wigner* und unabhängig davon in etwas anderer Schreibweise auch von *Racah* angegeben [137]. Die Clebsch–Gordan–Koeffizienten sind außerdem in vielen Standardlehrbüchern tabelliert [136] und sind nur dann von 0 verschieden, wenn die *Dreiecksbedingung*

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (4.50)$$

und die Relationen

$$j + j_1 + j_2 \text{ ist eine gerade Zahl} \quad (4.51)$$

und

$$m = m_1 + m_2 \quad (4.52)$$

erfüllt sind. Neben diesen wichtigen Bedingungen gibt es weitere Einschränkungen und zahlreiche Symmetrien zwischen diesen Koeffizienten. Hier sei dabei ebenfalls auf die Literatur verwiesen.

Von Bedeutung sind auch die sogenannten *Wigner $3j$ -Symbole*, welche mit den Clebsch–Gordan–Koeffizienten über die Relation

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{j+m+2j_1} \frac{1}{\sqrt{2j+1}} C_{j_1, -m_1, j_2, -m_2}^{j, m} \quad (4.53)$$

verknüpft sind. Die inverse Relation ist

$$C_{j_1, m_1, j_2, m_2}^{j, m} = (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}. \quad (4.54)$$

Diese Symbole erfüllen etwas einfachere Symmetrierelationen als die oben definierten Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Es ist klar, daß sich die Einschränkungen (4.50, 4.51, 4.52) auf die $3j$ -Symbole übertragen.

Im folgenden wird oft zwischen den Quantenzahlen κ, j und l gewechselt, und deshalb sei noch einmal der Zusammenhang zwischen ihnen angegeben:

$$\kappa = \pm(j + 1/2) \quad \text{wenn} \quad j = l \mp 1/2 \quad (4.55)$$

Kugelfunktionen und vektorielle Kugelfunktionen

Die Kugelfunktionen sind Eigenfunktionen des Quadrats des Drehimpulsoperators und der z -Projektion des Drehimpulsoperators, d.h.:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) &= l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi), \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) &= m Y_{lm}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (4.56)$$

Ihre explizite Struktur kann z.B. in [136] nachgeschlagen werden. Wichtig ist an dieser Stelle ihre Normierung:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}^*(\theta, \phi) &= \delta_{l_1, l_2} \delta_{m_1, m_2}, \\ \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) &= (-1)^{m_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{-m_1, m_2}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Ebenso werden auch die *vektoriellen Kugelfunktionen* benötigt. Die vektoriellen Kugelfunktionen sind als eine Summe über Kugelfunktionen in der folgenden Weise definiert:

$$\mathbf{Y}_{J,L,M}(\theta, \phi) = \sum_m \sum_{q=-1,0,1} C_{L,m,1,q}^{J,M} Y_{Lm}(\theta, \phi) \mathbf{e}_q. \quad (4.58)$$

Die Koeffizienten $C_{L,m,1,q}^{J,M}$ sind wieder die Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Der Einheitsvektor \mathbf{e}_q ist dabei durch

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.59)$$

gegeben. Mit diesem mathematischen Werkzeug können nun die Winkelintegrationen der Zwei-Photonen-Selbstenergie berechnet werden.

Die Winkelintegration

Die Winkelabhängigkeit wird sowohl für die gebundenen Elektronenzustände als auch für die freien Elektronenzustände durch die zweikomponentige Spinwinkelfunktion (2.12) beschrieben. Deshalb ist es nicht notwendig, beide Zustände bezüglich der Winkelintegration zu unterscheiden. Es wird also nur die Winkelintegration eines allgemeinen Matrixelements zwischen gebundenen Zuständen betrachtet. Die Winkelintegration zwischen freien Elektronenzuständen erfolgt demzufolge analog.

Im Ein-Schleifen-Fall als auch im Zwei-Schleifen-Fall lautet die allgemeine Struktur eines Matrixelements zwischen gebundenen Zuständen

$$\begin{aligned}
& \langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) C^L(1) C^L(2) j_L(Er_1) j_L(Er_2) | st \rangle \\
&= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 j_L(Er_1) \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^\pi d\theta_1 \sin \theta_1 \varphi_{n_n, \kappa_n, \mu_n}^\dagger(\mathbf{r}_1) \alpha_\mu(1) C^L(\theta_1, \phi_1) \varphi_{n_s, \kappa_s, \mu_s}(\mathbf{r}_1) \\
&\times \int_0^\infty dr_2 r_2^2 j_L(Er_2) \int_0^{2\pi} d\phi_2 \int_0^\pi d\theta_2 \sin \theta_2 \varphi_{n_r, \kappa_r, \mu_r}^\dagger(\mathbf{r}_2) \alpha^\mu(2) C^L(\theta_2, \phi_2) \varphi_{n_t, \kappa_t, \mu_t}(\mathbf{r}_2). \quad (4.60)
\end{aligned}$$

Aus diesem allgemeinen Matrixelement und der zweikomponentigen Spinwinkelfunktion χ_κ^μ (2.12) folgt unmittelbar, daß sich alle möglichen Winkelintegrale in der Zwei-Photonen-Selbstenergie auf ein Integral über drei Kugelfunktionen reduzieren. In diesem Unterabschnitt werden die grundlegenden Beziehungen zur Berechnung der Winkelintegrale zusammengefaßt [136, 138]. Zunächst folgt aus der Relation

$$\alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) = \mathbb{1} - \alpha(1) \alpha(2) \quad \text{mit} \quad \alpha(1) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma(1) \\ \sigma(1) & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha(2) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma(2) \\ \sigma(2) & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.61)$$

daß sich die Winkelintegrationen der ersten Zeile des obigen Matrixelements in ein skalares

$$I_{\text{skalar}} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \chi_{\kappa_1}^{\mu_1 \dagger}(\theta, \phi) \chi_{\kappa_2}^{\mu_2}(\theta, \phi) Y_{LM}(\theta, \phi) \quad (4.62)$$

und ein vektorielles Winkelintegral

$$I_{\text{vektor}} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \chi_{\kappa_1}^{\mu_1 \dagger}(\theta, \phi) \chi_{\kappa_1}^{\mu_1 \dagger}(\theta, \phi) \sigma \chi_{\kappa_2}^{\mu_2}(\theta, \phi) Y_{LM}(\theta, \phi) \quad (4.63)$$

zerlegen lassen. Die Winkelintegration der zweiten Zeile des obigen allgemeinen Matrixelements unterscheidet sich von der Winkelintegration der ersten Zeile nur darin, daß für die Kugelfunktion $Y_{LM}(\theta, \phi)$ die komplex konjugierte Kugelfunktion $Y_{LM}^*(\theta, \phi)$ in den Integralen (4.62), (4.63) einzusetzen ist. Dieser Fall kann völlig analog zur folgenden Diskussion behandelt werden. Für den skalaren Anteil folgt nach Ausführung der Winkelintegration

$$I_{\text{skalar}} = \chi_{\kappa_1}^{\mu_1 \dagger}(\theta, \phi) \chi_{\kappa_2}^{\mu_2}(\theta, \phi) = s_{L,M}^{1,2} C_L(\kappa_1, \kappa_2), \quad (4.64)$$

wobei die Koeffizienten gegeben sind durch

$$s_{L,M}^{1,2} = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} (-1)^{j_1 - \mu_1} \begin{pmatrix} j_1 & L & j_2 \\ -\mu_1 & M & \mu_2 \end{pmatrix} \quad (4.65)$$

und

$$C_L(\kappa_1, \kappa_2) = (-1)^{j_1 + 1/2} \sqrt{(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)} \begin{pmatrix} j_2 & L & j_1 \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \delta_{l_1 + l_2 + L, 2 * g}. \quad (4.66)$$

Hierbei ist g eine beliebige natürliche Zahl.

Um die Winkelintegration des vektoriellen Anteils auszuführen, ist es sehr zweckmäßig, den Integranden nach den vektoriellen Kugelfunktionen zu entwickeln, d.h die Entwicklung [136, 137]

$$\chi_{\kappa_1}^{\mu_1 \dagger}(\theta, \phi) \sigma \chi_{\kappa_2}^{\mu_2}(\theta, \phi) = \sum_{J'=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{L'=J'-1}^{J'+1} \sum_{M'=-L'}^{L'} s_{J',M'}^{2,1} S_{J',L'}(\kappa_1, \kappa_2) \mathbf{Y}_{J',L',M'}(\theta, \phi) \quad (4.67)$$

zu verwenden. Der Koeffizient $s_{J',M'}^{2,1}$ wurde bereits oben angegeben, und der Koeffizient $S_{J',L'}(\kappa_1, \kappa_2)$ ist ungleich 0 nur wenn $L' = J', J' \pm 1$ gilt. Für den Fall $J \neq 0$ ist er definiert als

$$\begin{aligned} S_{J',J'+1}(\kappa_2, \kappa_1) &= \sqrt{\frac{J'+1}{2J'+1}} \left(1 + \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{J'+1}\right) C_{J'}(-\kappa_1, \kappa_2), \\ S_{J',J'}(\kappa_2, \kappa_1) &= \frac{\kappa_2 - \kappa_1}{\sqrt{J'(J'+1)}} C_{J'}(\kappa_1, \kappa_2), \\ S_{J',J'-1}(\kappa_2, \kappa_1) &= \sqrt{\frac{J'}{2J'+1}} \left(-1 + \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{J'}\right) C_{J'}(-\kappa_1, \kappa_2), \end{aligned} \quad (4.68)$$

und für den Fall $J' = 0$ gilt

$$S_{0,1}(\kappa_2, \kappa_1) = C_0(-\kappa_1, \kappa_2). \quad (4.69)$$

Die Koeffizienten $C_{J'}$ wurden ebenfalls oben bereits angegeben. Mit den Gleichungen (4.67), (4.58) und dem Integral (4.57) folgt also das Winkelintegral über den vektoriellen Anteil:

$$\begin{aligned} I_{\text{vektor}} &= \sum_{J'=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{L'=J'-1}^{J'+1} \sum_{M'=-L'}^{L'} s_{J',M'}^{2,1} S_{J',L'}(\kappa_1, \kappa_2) \sum_m \sum_{q=-1}^1 C_{L',m,1,q}^{J',M'} \delta_{L',L} \delta_{m,M} \mathbf{e}_q \\ &= \sum_{J'=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M'=-L}^L s_{J',M'}^{2,1} S_{J',L}(\kappa_1, \kappa_2) \sum_{q=-1}^1 C_{L,M,1,q}^{J',M'} \delta_{L',L} \mathbf{e}_q. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Schließlich sei noch bemerkt, daß die durch die Einheitsvektoren (4.59) implizierte Vektorstruktur in der Lösung (4.70) selbstverständlich vektoriell multipliziert werden muss mit der entsprechenden Vektorstruktur der zweiten Zeile des allgemeinen Matrixelements (4.60), so daß insgesamt wieder eine skalare Größe entsteht.

4.3 Semianalytische Berechnung der Gegenterme

Neben den Winkelintegrationen lassen sich für die Gegenterme auch die radialen RauminTEGRATIONEN analytisch auswerten. Betrachtet sei dazu ein allgemeines Matrixelement eines beliebigen Gegenterms:

$$\begin{aligned} &\langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) \mathbf{C}^L(1) \mathbf{C}^L(2) j_L(Er_1) j_L(Er_2) | \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4 \rangle \\ &= \langle \mathbf{q}_1 | \alpha_\mu(1) \mathbf{C}^L(1) j_L(Er_1) | \mathbf{q}_3 \rangle \langle \mathbf{q}_2 | \alpha_\mu(2) \mathbf{C}^L(2) j_L(Er_2) | \mathbf{q}_4 \rangle. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Das Einsetzen der expliziten Form der sphärischen Wellenfunktionen für freie Elektronen liefert Integrale über drei sphärische Besselfunktionen, d.h. allgemein Integrale der Form

$$\int_0^{\infty} r^2 dr j_{l_1}(p_1 r) j_L(Er) j_{l_2}(p_2 r) . \quad (4.72)$$

Die Argumente der drei sphärischen Besselfunktionen sind positiv. Eine sorgfältige analytische Untersuchung dieses Integrals wurde in [140] vorgenommen. Eine allgemeine analytische Lösung des Integrals führt auf die hypergeometrischen Funktionen [122], welche jedoch keine numerische Vereinfachung implizieren [139]. Es ist deshalb sinnvoll nur die für die Auswertung der Zwei-Photonen-Selbstenergie relevanten Fälle zu untersuchen. Die im vorhergehenden Abschnitt diskutierte Winkelintegration, insbesondere die Dreiecksrelation (4.50) der Clebsch-Gordan-Koeffizienten, liefert Beschränkungen bezüglich der möglichen Kombinationen der Quantenzahlen j_1, L, j_2 des obigen Matrixelements. Konkret folgt für das skalare Winkelintegral die Beschränkung ($j = l \pm 1/2$):

$$|j_1 - j_2| \leq L \leq j_1 + j_2 \quad \text{und} \quad j_1 + j_2 + L = \text{gerade Zahl} , \quad (4.73)$$

und für den vektoriellen Anteil folgt die Einschränkung

$$|j_1 - j_2| - 1 \leq L \leq j_1 + j_2 + 1 \quad \text{und} \quad j_1 + j_2 \pm 1 + L = \text{gerade Zahl} . \quad (4.74)$$

Aus diesen Bedingungen folgt unmittelbar, daß für die ersten vier Partialwellen (d.h. $L=0,1,2,3$) nur die folgenden Integrale relevant sind:

$$\begin{aligned} I_1(l, l) &= \int_0^{\infty} r^2 dr j_0(Er) j_l(p_1 r) j_l(p_2 r) , \\ I_2(l, l \pm 1) &= \int_0^{\infty} r^2 dr j_1(Er) j_l(p_1 r) j_{l \pm 1}(p_2 r) , \\ I_3(l, l) &= \int_0^{\infty} r^2 dr j_2(Er) j_l(p_1 r) j_l(p_2 r) , \\ I_4(l, l \pm 2) &= \int_0^{\infty} r^2 dr j_2(Er) j_l(p_1 r) j_{l \pm 2}(p_2 r) , \\ I_5(l, l \pm 1) &= \int_0^{\infty} r^2 dr j_3(Er) j_l(p_1 r) j_{l \pm 1}(p_2 r) , \\ I_6(l, l \pm 3) &= \int_0^{\infty} r^2 dr j_3(Er) j_l(p_1 r) j_{l \pm 3}(p_2 r) . \end{aligned} \quad (4.75)$$

Zur analytischen Berechnung dieser Integrale wurde in [139, 140, 141] ein Schema angegeben, welches auf der Rekursionsrelation für die sphärischen Besselfunktionen

$$j_{l+1}(x) = \frac{2l+1}{x} j_l(x) - j_{l-1}(x) \quad (4.76)$$

und dem Integral [122]

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^{\infty} dr r^{2-l} j_l(Er) j_l(p_1 r) j_l(p_2 r) \\
 &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{\pi}{4E p_1 p_2} \left(\frac{p_1 p_2}{E} \right)^l (\sin \theta_1)^l P_l^{-l}(\cos \theta_1) \quad \text{wenn } |E - p_2| \leq p_1 \leq |E + p_2| \\ 0 \quad \text{sonst} \end{array} \right\} \\
 \text{mit } \cos \theta_1 &= \frac{p_1^2 + p_2^2 - E^2}{2p_1 p_2} \tag{4.77}
 \end{aligned}$$

basiert. Die Funktionen $P_l^m(\cos \theta_1)$ sind dabei die *zugeordneten Legendre'schen Polynome der 1. Art*, welche sich aus der Bildungsvorschrift

$$P_l^m(\cos \theta_1) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)! 2^l l!} \sin^{-m} \theta_1 \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta_1)^{l-m}} (\cos^2 \theta_1 - 1)^l, \tag{4.78}$$

ergeben, aber auch in Standardlehrbüchern, z.B. [136, 122], ausführlich tabelliert sind. Betrachtet sei zunächst das Integral $I_1(l, l)$. Die direkte Anwendung von (4.77) liefert sofort

$$I_1(l, l) = \frac{\pi}{4E p_1 p_2} P_l^0(\cos \theta_1). \tag{4.79}$$

Unter Anwendung der Rekursionsrelation (4.76) folgt für das Integral $I_2(l, l+1)$

$$\begin{aligned}
 I_2(l, l+1) &= \frac{2l+1}{p_2} \int_0^{\infty} r dr j_1(Er) j_1(p_1 r) j_1(p_2 r) - I_2(l, l-1) \\
 &= \frac{\pi(2l+1)}{4E^2 p_2} \sin \theta_1 P_l^{-1}(\cos \theta_1) - I_2(l, l-1). \tag{4.80}
 \end{aligned}$$

In analoger Weise folgt ebenso

$$I_2(l+1, l) = \frac{\pi(2l+1)}{4E^2 p_1} \sin \theta_1 P_l^{-1}(\cos \theta_1) - I_2(l-1, l). \tag{4.81}$$

Setzt man nun den Startwert

$$I_2(0, 1) = \frac{\pi}{4E p_1 p_2} P_1^0(\cos \theta_1) \tag{4.82}$$

welcher sich als Spezialfall von (4.79) ergibt, in (4.81) ein, so folgen abwechselnd aus (4.80) und (4.81) alle benötigten Integrale $I_2(l, l \pm 1)$ für beliebige Werte von l . Dieses Schema kann ebenso für die anderen Integrale in (4.75) verallgemeinert und mit einer numerischen Prozedur auch für beliebig hohe Partialwellen L implementiert werden. Für die Gegenterme können also die radialen Raumintegrale der Matrixelemente *analytisch* ausgewertet werden. Die verbleibenden Integrale über die Impulse \mathbf{q}_i werden jedoch mittels Gauß-Quadratur *numerisch* berechnet. Diese Vorgehensweise wird als *semianalytisch* bezeichnet.

4.4 B-Spline-Methode

Das Hauptproblem in numerischen Berechnungen der Bound-State-QED besteht in der Konstruktion des exakten Elektronenpropagators, d.h. der radialen Komponenten der Wellenfunktion eines gebundenen Elektrons. Bei der numerischen Auswertung der Zwei-Photonen-Selbstenergie kam die B-Spline-Methode [146] zur Anwendung, um diese radialen Komponenten der Lösungen der Diracgleichung zu berechnen. In diesem Abschnitt soll diese kraftvolle numerische Methode erläutert werden. Um dabei in Übereinstimmung mit der Notation in der grundlegenden Literatur [146] zu sein, ist es sehr zweckmäßig, die Notation der radialen Komponenten etwas zu verändern.

Die Lösungen der Diracgleichung mit Coulombpotential lauten

$$\varphi_{n\kappa\mu}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} F_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \\ iG_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \end{bmatrix} \equiv \frac{1}{r} \begin{bmatrix} iP_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \\ Q_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (4.83)$$

wobei $P_{n\kappa}(r)$ und $Q_{n\kappa}(r)$ die große und kleine Komponente der Lösung der radialen Diracgleichung

$$\begin{bmatrix} V(r) & \frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \\ -\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} & -2 + V(r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{\kappa}(r) \\ Q_{\kappa}(r) \end{bmatrix} = \epsilon_{\kappa} \begin{bmatrix} P_{\kappa}(r) \\ Q_{\kappa}(r) \end{bmatrix}, \quad (4.84)$$

sind. In der radialen Diracgleichung (4.84) wurde die Energie E_{κ} ersetzt durch $\epsilon_{\kappa} \equiv E_{\kappa} - 1$, so daß später ein besserer Vergleich mit den Lösungen im nichtrelativistischen Fall möglich sein wird. Die radiale Diracgleichung hat abzählbar unendlich viele, linear unabhängige Lösungen, welche mit einer weiteren Hauptquantenzahl n unterschieden werden. Obwohl die analytischen Lösungen der radialen Dirac-Gleichung bekannt sind (s. Abschnitt QED im Furry-Bild), ist jedoch diese analytische Lösung für konkrete Rechnungen aus folgenden Gründen ungeeignet:

1. Wie im Abschnitt QED im Furry-Bild bereits dargelegt wurde, ist die Summe \sum_n (n steht jetzt für die Gesamtheit aller Quantenzahlen n, κ, μ) im Elektronenpropagator

$$S_F(E, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{r}_1) \varphi_n^{\dagger}(\mathbf{r}_2)}{E - E_n(1 - i\epsilon)} \quad (4.85)$$

auszuführen über das kontinuierliche und das diskrete Spektrum der Dirac-Gleichung. Die formale Summe spaltet somit in einen Integral- und einen Summationsanteil auf. Es ist klar, daß sich diese Summation/Integration sehr aufwendig und schwierig gestaltet, da es sich um unendlich viele Zustände sowohl im Kontinuum als auch im diskreten Spektrum handelt und der Integrand eine komplizierte Struktur aufweist.

2. Ein weiterer Grund liegt in der Auswertung der Zwei-Photonen-Selbstenergie. Es treten dabei typische Integrale der Form

$$I_A = \int_0^{\infty} dr P_A(r) j_l(r) P_n(r),$$

$$I_B = \int_0^{\infty} dr Q_A(r) j_l(r) Q_n(r) \quad (4.86)$$

auf. Diese Integrale besitzen keine analytischen Lösungen und ihre numerische Auswertung ist aufgrund des Integranden ebenfalls kompliziert.

Aus diesen Gründen sind in den letzten Jahren neuartige numerische Methoden entwickelt wurden, insbesondere:

1. Finite-Basis-Set-Methode [142, 143]
2. B-Spline-Methode [144]
3. Finite-Discrete-Spectrum-Methode [145]

Die Grundidee bei allen diesen modernen Methoden ist dabei, das betrachtete Quantensystem in eine kugelförmige Box mit charakteristischem Radius R einzuschließen. Das Dirac-Spektrum diskretisiert dann vollständig (s. Abbildung 4.9) und die Summation/Integration

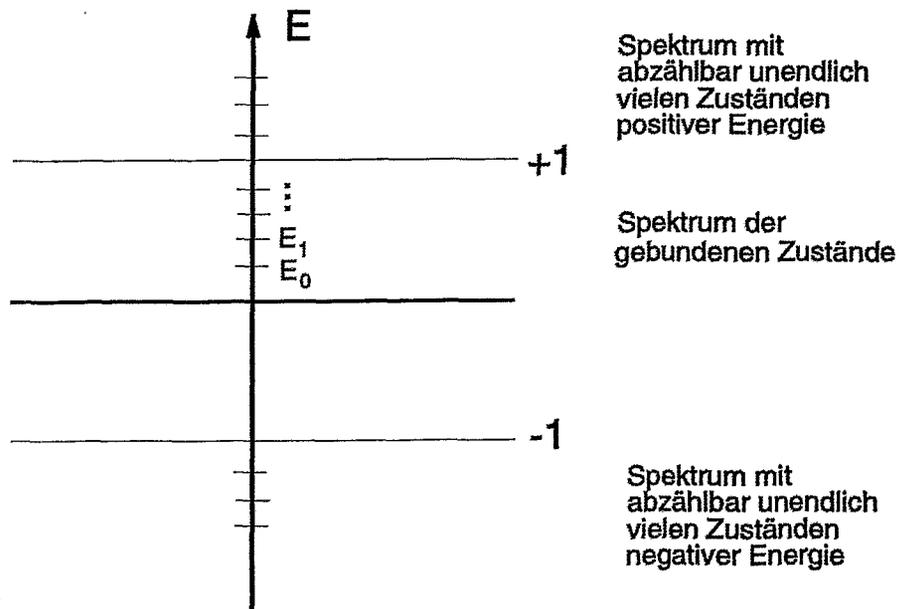


Abbildung 4.9: Das Diracspektrum der gebundenen und ungebundenen Zustände diskretisiert vollständig in einer kugelförmigen Box

im Elektronenpropagator (4.85) geht in eine reine Summation über. Die nun diskret verteilten Zustandsvektoren $\varphi_n(r)$ werden anschließend durch Polynome m -ter Ordnung dargestellt. Das Einschließen des Atoms in eine kugelförmige Box mit Radius R impliziert Randbedingungen an den Grenzen dieser Box, d.h. bei R . Die Verallgemeinerung der entsprechenden Randbedingung von der nichtrelativistischen Theorie

$$P_{nl}(R) = 0 \quad , \quad (4.87)$$

wobei hier P_{nl} die nichtrelativistische radiale Wellenfunktion bezeichnen soll, zum relativistischen Fall, ist die sogenannte Massachusetts Institute of Technology (MIT) bag-Modell Randbedingung [147, 148]

$$P_{n\kappa}(R) = Q_{n\kappa}(R) \quad . \quad (4.88)$$

Diese Randbedingung vermeidet das " Kleinsche Paradoxon " [149], welches auftritt, wenn man ein relativistisches Teilchen in eine Box mit unendlich hohen Potentialwänden einsperrt. Die radiale Koordinate wird nun unterteilt in N Intervalle von $r_0 = 0$ bis $r_{N-1} = R$, wobei die Unterteilung hinsichtlich Abstand und Anzahl zunächst vollkommen beliebig gewählt sein soll.

In jedes Intervall wird eine beliebige, aber feste Anzahl von Polynomen m -ten Grades gelegt (eine sogenannte Familie von stückweisen Polynomen), d.h. z.B. :

im 1. Intervall (von $r_0 = 0$ bis r_1) befinden sich vier Polynome 3. Grades ,

im 2. Intervall (von r_1 bis r_2) befinden sich vier Polynome 3. Grades ,

·
·
·

im N -ten Intervall (von r_{N-2} bis $r_{N-1} = R$) befinden sich vier Polynome 3. Grades .

In der B-Spline-Methode sind diese Polynome gerade die B-Splines, so daß also eine Lösung der radialen Diracgleichung (4.84) in der Basis der B-Splines gesucht wird. Die Definition dieser B-Splines von der Ordnung k ist gegeben durch

$$B_{i,1}(r) = \left\{ \begin{array}{l} 1, r_i \leq r < r_{i+1} \\ 0, \text{sonst} \end{array} \right\} \quad (4.89)$$

und

$$B_{i,k}(r) = \frac{r - r_i}{r_{i+k-1} - r_i} B_{i,k-1}(r) + \frac{r_{i+k} - r}{r_{i+k} - r_{i+1}} B_{i+1,k-1}(r) . \quad (4.90)$$

Aus diesen beiden Gleichungen folgt unmittelbar, daß die B-Splines $B_{i,k}(r)$ stückweise Polynome vom Grad $k - 1$ sind und überall verschwinden, außer im Intervall $r_i \leq r < r_{i+k}$.

Betrachtet man ein beliebiges Intervall von r_i bis r_{i+1} , so werden die nun endlich vielen radialen Wellenfunktionen $P_\kappa(r)$ und $Q_\kappa(r)$ als Linearkombination dieser B-Splines wie folgt dargestellt:

$$P_\kappa(r_i \leq r < r_{i+1}) = \sum_{j=i+1}^{i+k} p_j^\kappa B_{j,k}(r_i \leq r < r_{i+1}) , \quad (4.91)$$

$$Q_\kappa(r_i \leq r < r_{i+1}) = \sum_{j=i+1}^{i+k} q_j^\kappa B_{j,k}(r_i \leq r < r_{i+1}) .$$

Die Anzahl Z aller B-Splines zur Abdeckung des Bereiches von $r_0 = 0$ bis $r_{N-1} = R$ ist offensichtlich nur abhängig von der Anzahl N der Gitterpunkte und der Ordnung k der B-Splines, nämlich $z = (N + k - 1)$, wie man an einem einfachen Beispiel schnell einsieht. Somit läßt sich die B-Spline-Darstellung (4.91) über das Gesamtintervall wie folgt schreiben:

$$P_\kappa(r) = \sum_{j=i}^z p_j^\kappa B_{j,k}(r) , \quad (4.92)$$

$$Q_\kappa(r) = \sum_{j=i}^z q_j^\kappa B_{j,k}(r) .$$

Die Güte dieser Näherung steigt mit wachsender (in den numerischen Rechnungen festgehaltenen) Ordnung k der B-Splines, der Anzahl der Gitterpunkte r_i und der Größe der

kugelförmigen Box.

Die Aufgabe besteht nun in der Bestimmung der Koeffizienten p_j^κ und q_j^κ . Um eine Bestimmungsgleichung für diese Koeffizienten herzuleiten, kann man die sehr elegante Galerkin-Methode [150] benutzen, welche hier nur kurz erläutert werden soll (eine sehr übersichtliche Darstellung findet man in [144]). In der Galerkin-Methode wird zunächst eine Wirkung S so konstruiert, das aus ihr durch Variation die radiale Diracgleichung (4.84) folgt. Der oben eingeführte Energieparameter ϵ erscheint als Lagrangescher Multiplikator, da die Normierungsbedingung der Wellenfunktion

$$\int_0^R dr [(P_\kappa(r))^2 + (Q_\kappa(r))^2] = 1 \quad (4.93)$$

erfüllt werden muss. Die Randbedingung (4.88) des MIT-bag-Modell wird in der Wirkung durch einen Term S' berücksichtigt. Direktes Einsetzen der B-Spline-Darstellung (4.91) in diese Wirkung $S + S'$ und anschließende Variation nach den Koeffizienten p_j^κ und q_j^κ führt zu der gesuchten Bestimmungsgleichung (vergl. mit (4.84)):

$$\hat{A}\bar{v} = \epsilon\hat{B}\bar{v}$$

mit dem $2z$ -dimensionalen Lösungsvektor

$$\bar{v} = (p_1^\kappa, p_2^\kappa, \dots, p_z^\kappa, q_1^\kappa, q_2^\kappa, \dots, q_z^\kappa), \quad (4.94)$$

wobei die $2z \times 2z$ -dimensionalen symmetrischen Matrizen \hat{A} und \hat{B} gegeben sind durch:

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} \hat{V} & \hat{D} - \frac{\hat{\kappa}}{r} \\ \hat{D} + \frac{\hat{\kappa}}{r} & -2\hat{C} + \hat{V} \end{bmatrix} + \hat{A}', \quad (4.95)$$

$$\hat{B} = \begin{bmatrix} \hat{C} & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{C} \end{bmatrix},$$

mit der Matrix \hat{A}' , welche in Komponentenschreibweise lautet:

$$(\hat{A}')_{ij} = \begin{bmatrix} \delta_{i,1}\delta_{j,1} - \frac{1}{2}\delta_{i,1}\delta_{j,z+1} - \frac{1}{2}\delta_{i,z+1}\delta_{j,1} + \frac{1}{2}\delta_{i,z}\delta_{j,z} - \frac{1}{2}\delta_{i,2z}\delta_{j,2z} & \text{für } \kappa < 0, \\ 2\delta_{i,1}\delta_{j,1} - \frac{1}{2}\delta_{i,1}\delta_{j,z+1} - \frac{1}{2}\delta_{i,z+1}\delta_{j,1} + \frac{1}{2}\delta_{i,z}\delta_{j,z} - \frac{1}{2}\delta_{i,2z}\delta_{j,2z} & \text{für } \kappa > 0 \end{bmatrix}. \quad (4.96)$$

Die $z \times z$ -Matrizen \hat{C} , \hat{D} , \hat{V} und $\hat{\kappa}/r$ sind in Komponentenschreibweise gegeben durch

$$(\hat{C})_{ij} = \int_0^\infty dr B_{i,k}(r) B_{j,k}(r),$$

$$(\hat{D})_{ij} = \int_0^\infty dr B_{i,k}(r) \frac{d}{dr} B_{j,k}(r),$$

$$\begin{aligned}
 (\hat{V})_{ij} &= \int_0^{\infty} dr B_{i,k}(r)V(r)B_{j,k}(r), \\
 \left(\frac{\hat{\kappa}}{r}\right)_{ij} &= \int_0^{\infty} dr B_{i,k}(r)\frac{\kappa}{r}B_{j,k}(r).
 \end{aligned} \tag{4.97}$$

Das $2z$ -dimensionale Eigenwertproblem (4.94) hat für jeden Wert der Quantenzahl κ genau $2z$ Eigenwerte ϵ_λ und die dazugehörigen $2z$ Eigenvektoren v^λ . Der Parameter λ übernimmt damit in der B-Spline-Methode die Rolle der Hauptquantenzahl n . Wählt man also einen speziellen Wert für die Quantenzahl κ , so gibt es für diesen speziellen Wert κ genau $2z$ linear unabhängige Lösungen für die Funktion $P_\kappa(r)$ und $2z$ linear unabhängige Lösungen für die Funktion $Q_\kappa(r)$, d.h.

$$\begin{aligned}
 P_\kappa^\lambda(r) &= \sum_{i=1}^z v_i^\lambda B_{i,k}(r), \\
 Q_\kappa^\lambda(r) &= \sum_{i=z+1}^{2z} v_i^\lambda B_{i,k}(r),
 \end{aligned} \tag{4.98}$$

somit also genau $2z$ orthonormale Eigenfunktionen der radialen Diracgleichung in einer kugelförmigen Box.

Als letzter Schritt werden die B-Spline-Darstellungen (4.98) der gesuchten Funktionen $P_\kappa^\lambda(r)$ und $Q_\kappa^\lambda(r)$ in normale Polynom-Darstellungen transformiert. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, diese Transformation auszuführen. Eine numerisch stabile und einfache Methode [151] soll kurz an einem konkreten Beispiel erläutert werden, aus dem die Verallgemeinerung schnell klar wird.

Betrachtet seien z.B. B-Splines der Ordnung 4. Man betrachtet zunächst das 1. Intervall r_0, r_1 und legt nun vier Punkte in dieses Intervall. Diese vier Punkte seien $r_{1.1}, r_{1.2}, r_{1.3}, r_{1.4}$. Anschließend berechnet man die Funktionswerte der beiden Funktionen P_κ^λ und Q_κ^λ an diesen vier Punkten. Für diese Funktionswerte wird ein Potenzreihenansatz in der folgenden Weise vorgenommen:

$$\begin{aligned}
 P_\kappa^\lambda(r_{1.1}) &= a_1 + a_2(r_{1.1} - r_0)^1 + a_3(r_{1.1} - r_0)^2 + a_4(r_{1.1} - r_0)^3, \\
 P_\kappa^\lambda(r_{1.2}) &= a_1 + a_2(r_{1.2} - r_0)^1 + a_3(r_{1.2} - r_0)^2 + a_4(r_{1.2} - r_0)^3, \\
 P_\kappa^\lambda(r_{1.3}) &= a_1 + a_2(r_{1.3} - r_0)^1 + a_3(r_{1.3} - r_0)^2 + a_4(r_{1.3} - r_0)^3, \\
 P_\kappa^\lambda(r_{1.4}) &= a_1 + a_2(r_{1.4} - r_0)^1 + a_3(r_{1.4} - r_0)^2 + a_4(r_{1.4} - r_0)^3,
 \end{aligned} \tag{4.99}$$

$$\begin{aligned}
 Q_\kappa^\lambda(r_{1.1}) &= b_1 + b_2(r_{1.1} - r_0)^1 + b_3(r_{1.1} - r_0)^2 + b_4(r_{1.1} - r_0)^3, \\
 Q_\kappa^\lambda(r_{1.2}) &= b_1 + b_2(r_{1.2} - r_0)^1 + b_3(r_{1.2} - r_0)^2 + b_4(r_{1.2} - r_0)^3, \\
 Q_\kappa^\lambda(r_{1.3}) &= b_1 + b_2(r_{1.3} - r_0)^1 + b_3(r_{1.3} - r_0)^2 + b_4(r_{1.3} - r_0)^3, \\
 Q_\kappa^\lambda(r_{1.4}) &= b_1 + b_2(r_{1.4} - r_0)^1 + b_3(r_{1.4} - r_0)^2 + b_4(r_{1.4} - r_0)^3.
 \end{aligned} \tag{4.100}$$

Diese Gleichungssystem kann aufgelöst werden nach den acht unbekanntenen Koeffizienten a_1, \dots, b_4 . Dieselbe Methode wird auf jedes einzelne Intervall in vollkommen identischer Weise angewandt, und die Gesamtheit der Koeffizienten stellt die gesuchte Transformation von der B-Spline-Darstellung auf gewöhnliche Polynome dar. Für das oben betrachtete 1. Intervall lautet die so gewonnene Polynomdarstellung

$$\begin{aligned}
 P_\kappa^\lambda(r) &= a_1 + a_2(r - r_0)^1 + a_3(r - r_0)^2 + a_4(r - r_0)^3, \\
 Q_\kappa^\lambda(r) &= b_1 + b_2(r - r_0)^1 + b_3(r - r_0)^2 + b_4(r - r_0)^3.
 \end{aligned} \tag{4.101}$$

Die eingangs erwähnten Integrale der komplizierten Art (4.86) vereinfachen sich so zu gewöhnlichen Integralen über diese Potenzen, welche mit Besselfunktionen multipliziert sind.

Um die Genauigkeit dieses mit der B-Spline-Methode gefundene Spektrum der radialen Diracgleichung zu testen, gibt es verschiedene Möglichkeiten. Auf die zwei wichtigsten von ihnen soll hier kurz eingegangen werden. Eine Möglichkeit ist die Thomas-Reiche-Kuhn (TRK)-Summenregel. Diese Summenregel lautet im relativistischen Fall

$$0 = \frac{l}{2l+1} \sum_{\lambda=1}^{2z} (\epsilon_{\lambda\kappa} - \epsilon_{1,-1}) |\langle \kappa = -1, \lambda = 1 | r | \kappa = l, \lambda \rangle|^2 + \frac{l+1}{2l+1} \sum_{\lambda=1}^{2z} (\epsilon_{\lambda\kappa} - \epsilon_{1,-1}) |\langle \kappa = -1, \lambda = 1 | r | \kappa = -l-1, \lambda \rangle|^2, \quad (4.102)$$

wobei der Zustand mit der Energie $\epsilon_{1,-1}$ dem $1s_{1/2}$ Zustand entspricht. Die Summe über die Zustände für positive Energien ergibt einen Beitrag, welcher dicht bei dem Beitrag der entsprechenden nichtrelativistischen (TRK)-Summenregel

$$\sum_{\lambda=1}^{2z} (\epsilon_{\lambda\kappa} - \epsilon_{1,-1}) |\langle l = 0, \lambda = 1 | r | l, \lambda \rangle|^2 = \frac{l(l+1)+1}{2} \quad (4.103)$$

liegt, aber dieser Beitrag wird exakt weggehoben durch den Beitrag der Zustände mit negativer Energie. Dieser Test wurde auch vom Autor dieser Arbeit (mit verschiedener Ordnung der B-Splines und verschiedener Anzahl von Gitterpunkten, sowie verschiedener Box-Größen) vorgenommen. Ein konkretes Beispiel ist in der Tabelle 4.2 ersichtlich. Die Größe der Box betrug dabei $R = \exp(4)/Z$ a.u. (Z ist die Kernladungszahl), und es wurden B-Splines $B_{i,k}$ der Ordnung $k = 7$ verwendet. Die Gitterpunkte wurden dabei wie folgt exponentiell verteilt:

$$r_0 = 0, \quad r_i = R_0 \exp\left(\frac{13i}{N-1}\right); \quad i = 1, \dots, N-1; \quad R_0 = \frac{\exp(-9)}{Z}. \quad (4.104)$$

Die Resultate für dieses Beispiel sind mit genügend hoher Genauigkeit in Übereinstimmung mit der TRK-Summenregel.

Die sogenannten energiegewichteten Summenregeln [142] stellen eine weitere Möglichkeit

Kernladungszahl Z	pos. Zustände	neg. Zustände	Gesamtsumme
2	+0.49974407	-0.49974352	+0.54630610 · 10 ⁻⁶
50	+0.42254410	-0.42254401	+0.86514343 · 10 ⁻⁷
92	+0.32831972	-0.32831940	+0.32155929 · 10 ⁻⁶

Tabelle 4.2: Test der relativistischen TRK-Summenregel

dar, die Genauigkeit des ermittelten Spektrums zu testen. Diese Summenregel für den Fall des 2. Gewichts lautet

$$S_2 = \frac{2}{9} \sum_{\lambda=1}^{2z} (\epsilon_{\lambda\kappa} - \epsilon_{1,-1})^2 |\langle \kappa = -1, \lambda = 1 | r | \kappa = 1, \lambda \rangle|^2$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{4}{9} \sum_{\lambda=1}^{2z} (\epsilon_{\lambda\kappa} - \epsilon_{1,-1})^2 |\langle \kappa = -1, \lambda = 1 | r | \kappa = -2, \lambda \rangle|^2 \\
& = \frac{1}{\alpha^2}.
\end{aligned} \tag{4.105}$$

($\alpha \approx \frac{1}{137}$ ist die Feinstrukturkonstante der QED).

Dieser Test wurde ebenfalls vom Autor dieser Arbeit (wieder mit verschiedener Ordnung der B-Splines und verschiedener Anzahl von Gitterpunkten, sowie verschiedener Box-Größen) durchgeführt. Dabei ergab sich z.B. unter Benutzung derselben Parameter wie im Fall der TKR-Summenregel eine relative Genauigkeit von ungefähr 10^{-7} für die Werte $Z = 2, 50, 92$. Weitere Summenregeln findet man auch in [142].

4.5 Die numerischen Resultate zur Zwei-Photonen-Selbstenergie

In diesem Kapitel werden die numerischen Ergebnisse dargestellt. Zunächst wird dabei Augenmerk auf eine interessante Näherung gelegt, die sogenannte *Sign-Approximation*. Anschließend folgt die Darlegung des vollständigen Beitrags der Zwei-Photonen-Selbstenergie zur Lamb-Verschiebung.

4.5.1 Die Sign-Approximation der Zwei-Photonen-Selbstenergie

Sign-Approximation der Selbstenergie in 1. Ordnung Störungstheorie

Zuerst soll die Sign-Approximation an der Selbstenergie eines gebundenen Elektrons in 1. Ordnung Störungstheorie erläutert werden. Betrachtet sei dazu zunächst die unrenormierte Energieverschiebung (4.3). Das darin auftretende Matrixelement $\langle nr | \alpha_\mu(1) \alpha^\mu(2) | rn \rangle$ ist reell. Dies kann z.B. bewiesen werden durch explizites Aufschreiben dieses Terms und Ausführung der Winkelintegration. Es ist deshalb nur der Imaginärteil des in der Energieverschiebung auftretenden Energieintegrals I_1 (3.114) (im Grundzustand ist dieses Integral selbstverständlich rein imaginär, s.(3.120)) von Bedeutung, da die Energieverschiebung immer reell ist. Dieser Imaginärteil von I_1 kann analytisch berechnet werden, und das Ergebnis lautet:

$$I_1 = \frac{i}{\pi} \left([C + \ln(|\Delta_{rn}| r_{12}) + \text{Ci}(\Delta_{rn} r_{12})] \sin(\Delta_{rn} r_{12}) \right. \\ \left. + \frac{i}{\pi} \left(\left[\frac{\pi}{2} \text{sign}(E_r) - \text{Si}(\Delta_{rn} r_{12}) \right] \cos(\Delta_{rn} r_{12}) \right) \right), \quad (4.106)$$

wobei $\Delta_{rn} \equiv E_r - E_n$ definiert wurde. Die Funktionen $\text{Ci}(x)$ und $\text{Si}(x)$ sind der Integralcosinus bzw. Integralsinus und $C \approx 0.577215$ ist die Eulersche Konstante. Von dem mathematischen Ausdruck für den Massengegenterm (4.10) und (4.11) folgt offenbar ebenso ein solches Energieintegral, welches aus obigem Integral erhalten werden kann indem die Ersetzung $\Delta_{rn} \rightarrow \Delta_{qp_1} \equiv E_q - E_{p_1}$ vorgenommen wird. In [125, 153] konnte durch Anwendung der Multiple-Kommutator-Expansion [154] gezeigt werden, daß die Funktionen $\text{Ci}(x)$ und $\text{Si}(x)$ in der unrenormierten Selbstenergie unabhängig von dem Coulombfeld des Atomkerns sind und sich deshalb exakt gegen dieselben Funktionen $\text{Ci}(x)$ und $\text{Si}(x)$ im Massengegenterm herausheben. Deshalb verbleibt im Endausdruck für die renormierte Energieverschiebung nur der *logarithmische Term* und der *Sign-Term*, jeweils multipliziert mit der $\sin(x)$ - bzw. $\cos(x)$ -Funktion, welche wieder nach Partialwellen entwickelt werden. Ein Vergleich mit den exakten Resultaten [83] zeigt, daß der logarithmische Term in (4.106) den dominanten Beitrag für Systeme mit niedrigen Kernladungszahlen ($Z \leq 10$) liefert und der Sign-Term den dominanten Beitrag für Systeme mit hohen Kernladungszahlen darstellt. Zum Beispiel liefert für $Z = 92$ (Uran) der Sign-Term 95% des exakten Wertes für die Energieverschiebung. Die *Sign-Approximation* kann deshalb durch folgende Ersetzung definiert werden:

$$i\mathfrak{S} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{E^2+i\epsilon}r_{12}}}{\Delta_{rn} + E_1 - i\epsilon \text{sign}(E_r)} \right) \rightarrow \frac{i}{2} \text{sign}(E_r) \cos(\Delta_{rn} r_{12}), \quad (4.107)$$

d.h. der Hauptwert dieses Integrals wird für Systeme mit hoher Kernladungszahl Z vernachlässigt.

Sign-Approximation für die Zwei-Photonen-Selbstenergie

Die 95%-ige Genauigkeit im Ein-Schleifen-Fall ist selbstverständlich nicht im Zwei-Schleifen-Fall zu erwarten. Deshalb ist es wichtig, zu untersuchen, wie gut diese Näherung im Zwei-Schleifen-Fall arbeitet. Dies läßt sich folgendermaßen abschätzen. Der irreduzible Anteil des Loop-after-Loop-Diagramms ist z.B. für $Z = 92$ von verschiedenen Arbeitsgruppen exakt berechnet worden [96, 97, 98]. Der mathematische Ausdruck des Loop-after-Loop-Diagramms (3.9) setzt sich aus dem Produkt zweier Selbstenergien 1. Ordnung Störungstheorie zusammen und deshalb kann die Sign-Approximation, d.h. die obige Ersetzung (4.107) direkt eingesetzt werden. Für Uran ($Z = 92$) ergab die Sign-Approximation bereits 60% des exakten Beitrags dieses Diagramms. Dieses wichtige Resultat zeigt, daß diese Näherung auch im Zwei-Schleifen-Fall für Systeme mit hoher Kernladungszahl funktioniert und deshalb auch für die anderen Diagramme der Zwei-Photonen-Selbstenergie angewendet werden kann. Der Gewinn ist dabei zweifach:

- 1.) Es kann damit erstmalig eine kontrollierbare und definierte Abschätzung der Energieverschiebung der Zwei-Photonen-Selbstenergie angegeben werden. Dies gilt auch für die angeregten Zustände.
- 2.) Die Sign-Approximation stellt einen guten Test für die spätere, wesentlich kompliziertere Auswertung des exakten Beitrags der Diagramme der Zwei-Photonen-Selbstenergie dar.

Um nun die mathematischen Ausdrücke der Sign-Approximation zu erhalten, müssen die einzelnen Energieintegrale entsprechend (4.107) genähert werden. Die Sign-Approximation des Energieintegrals I_2 (3.115) erhält man, indem man in (4.107) zunächst $E_n \rightarrow E$ setzt, anschließend nach E differenziert und schließlich wieder den Limes $E \rightarrow E_n$ ausführt. Diese Vorgehensweise folgt aus (3.35). Die Sign-Approximation der anderen Energieintegrale I_3 bis I_5 (3.116, 3.117, 3.118) gewinnt man durch Partialbruchzerlegung des Nenners dieser Integrale und anschließender Anwendung von (4.107). Dementsprechend ergeben sich die einzelnen Integrale in Sign-Approximation zu

$$I_2 \approx \frac{i}{2} \text{sign}(E_r) \cos(\Delta_{rn}r_{12}), \quad (4.108)$$

$$I_3 \approx -\frac{1}{4} \frac{1}{\Delta_{tr}} \text{sign}(E_s) \text{sign}(E_t) \cos(\Delta_{tn}r_{14}) \cos(\Delta_{st}r_{23}) \\ + \frac{1}{4} \frac{1}{\Delta_{tr}} \text{sign}(E_s E_r) \cos(\Delta_{rn}r_{14}) \cos(\Delta_{sr}r_{23}), \quad (4.109)$$

$$I_4 \approx -\frac{1}{4} \frac{1}{\Delta_{st} + \Delta_{nr}} \text{sign}(E_t E_r) \cos(\Delta_{tn}r_{24}) \cos(\Delta_{rn}r_{13}) \\ + \frac{1}{4} \frac{1}{\Delta_{st} + \Delta_{nr}} \text{sign}(E_t E_s) \cos(\Delta_{nt}r_{24}) \cos(\Delta_{st}r_{13}), \quad (4.110)$$

$$I_5 \approx \frac{i}{2} \frac{1}{\Delta_{sr}} \text{sign}(E_r) \cos(\Delta_{rn}r_{12}) - \frac{i}{2} \frac{1}{\Delta_{sr}} \text{sign}(E_s) \cos(\Delta_{sn}r_{12}). \quad (4.111)$$

Diagramm	ΔE_{1s} (in eV)
SESE a red)	0.01 \pm 0.005
SESE b)	-0.05 \pm 0.025
SESE c)	0.51 \pm 0.250

Tabelle 4.3: Die numerischen Ergebnisse der Lamb-Verschiebung der Zwei-Photonen-Selbstenergie in Sign-Approximation für den Grundzustand in wasserstoffartigem Uran $^{238}\text{U}^{91+}$.

Das Einsetzen dieser genäherten Energieintegrale in (3.100) bis (3.104) liefert die Sign-Approximation für die unrenormierte Zwei-Photonen-Selbstenergie. In den Gegentermen der Zwei-Photonen-Selbstenergie entstehen mit der Sign-Approximation ebensolche Energieintegrale. Die $\cos(x)$ - und $\sin(x)$ -Funktionen in der unrenormierten Energieverschiebung und der Massengegenterm werden dann wieder nach Partialwellen entwickelt, so daß die PWR anwendbar ist. Die numerischen Resultate für Uran sind in der Tabelle 4.5.1 ersichtlich. Für die numerische Berechnung der in Tabelle 4.3 ersichtlichen Ergebnisse wurden $N = 28$ Gitterpunkte verwendet und die Ordnung der B-Splines war $k = 9$. In der Summe über die beiden Partialwellen L_1, L_2 wurden $L_1 = 7, L_2 = 4$ Partialwellen ausgewertet. Aus der Ungenauigkeit der Sign-Approximation (40%) zusammen mit der numerischen Ungenauigkeit (10%) resultiert der angegebene numerische relative Fehler von 50%. Die Energieverschiebung des gesamten Diagramms der Zwei-Photonen-Selbstenergie (ohne den irreduziblen Anteil) ergibt sich als die Summe der in Tabelle 4.3 angegebenen Werte für wasserstoffartiges Uran zu

$$\Delta E_{1s}^{\text{SESE a red), b), c) ren}}(Z = 92) = 0.47 \pm 0.28 \text{ eV} . \quad (4.112)$$

Diese Resultate wurden erstmalig in [155] veröffentlicht. Es wurde schon erwähnt, daß von *Mallampalli, Sapirstein* (1998) in [99] eine Näherung des Beitrags der Zwei-Photonen-Selbstenergie zur Lambverschiebung angegeben wurde. Wie jedoch bereits ausgeführt, ist unklar, ob die in [99] erhaltenen Ergebnisse, welche auch in starkem Gegensatz zu den obigen Resultaten der Sign-Approximation sind, tatsächlich den dominierenden Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie darstellen, und diese sind deshalb sehr kritikwürdig. Deshalb stellen die hier vorgestellten Ergebnisse der Sign-Approximation erstmalig den tatsächlichen dominanten Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie dar. Es sei an dieser Stelle auch vorweggenommen, daß der im folgenden Abschnitt zu besprechende vollständige Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie die Ergebnisse der Sign-Approximation bestätigt.

4.5.2 Vollständiger Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie

Die Partialwellenentwicklung der mathematischen Terme der Zwei-Photonen-Selbstenergie wurden im Abschnitt 4.1.2 angegeben. Für den Grundzustand wurden die Energieintegrale in eine polfreie Darstellung umgeschrieben, so daß die charakteristische $i\epsilon$ -Vorschriften zum Umlaufen der Pole in der komplexen E_1, E_2 -Ebene fallengelassen werden konnten, und die Integrationsgrenzen im Bereich $(0, \dots, \infty)$ liegen. Der gesamte Integrand der Energieverschiebung zeigte ein starkes Abfallen für große Energien E_1, E_2 (s. Abbildung 4.10). Wie in der obigen Abbildung 4.10 dargestellt, kann wegen des starken Abfalls der Integranden die obere Integrationsgrenze der Energieintegrale bei einem genügend großen Wert $E_1^{\text{max}}, E_2^{\text{max}}$

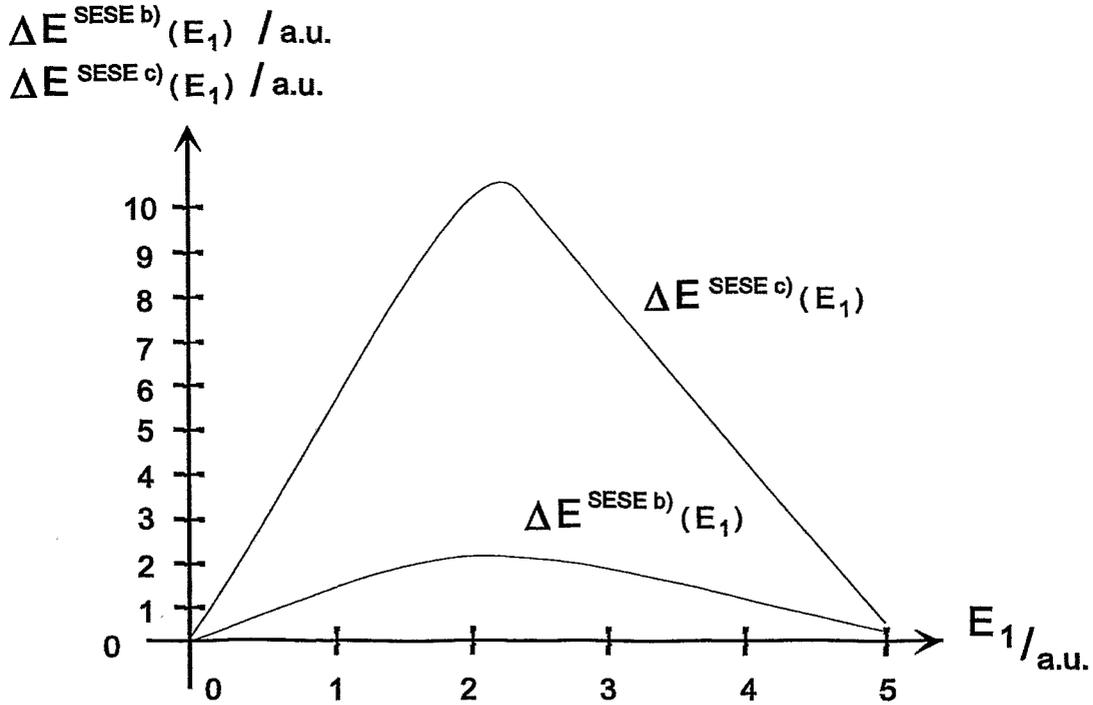


Abbildung 4.10: Die renormierte Energieverschiebung $\Delta E^{\text{SESE b)}}(E_1)$ und $\Delta E^{\text{SESE c)}}(E_1)$ für die Partialwelle $L_1 = 0, L_2 = 0$. Es wurde dabei über die Energievariable E_2 bereits integriert. Der verbleibende Integrand ist somit nur noch eine Funktion der Energievariable E_1 . Das abfallende Verhalten für große Energiewerte E_1 ist auch typisch für höhere Partialwellen L_1, L_2 .

abgeschnitten werden:

$$E_1^{\text{max}} = E_2^{\text{max}} = 540 \text{ a.u.} . \quad (4.113)$$

Bezüglich der Energieintegrale für die Diagramme Loop-Inside-Loop und Loop-Crossed-Loop wurde zudem folgende Näherung verwendet:

Das Integral I_3 des Loop-Inside-Loop-Diagramms ist proportional zu (s. Gleichung (3.122))

$$1 + S^{\text{in}}(E_1, E_2) , \quad (4.114)$$

und das Integral I_4 des Loop-Crossed-Loop-Diagramm ist proportional zu (s. Gleichung (3.123))

$$1 + S^{\text{cr}}(E_1, E_2) . \quad (4.115)$$

Entsprechend diesen beiden Gleichungen kann die gesamte Energieverschiebung des Diagramms SESE b) und des Diagramms SESE c) (für den Grundzustand $n=1s_{1/2}$) in die zwei Anteile

$$\Delta E_n^{\text{SESE b)}} \text{ ren} = \Delta E_n^{\text{SESE b)}} \text{ ren,1} + \Delta E_n^{\text{SESE b)}} \text{ ren,2} \quad (4.116)$$

und

$$\Delta E_n^{\text{SESE c)}} \text{ ren} = \Delta E_n^{\text{SESE c)}} \text{ ren,1} + \Delta E_n^{\text{SESE c)}} \text{ ren,2} \quad (4.117)$$

aufgespalten werden. Der 1. Summand in (4.116) bzw. in (4.117) entspricht dabei dem Term, welcher proportional dem Faktor 1 aus (4.114) bzw. dem Faktor 1 aus (4.115) ist. Der 2. Summand in (4.116) bzw. (4.117) entspricht dem Term, welcher proportional dem Faktor S^{in} aus (4.114) bzw. S^{cr} aus (4.115) ist. Die expliziten Ausdrücke dieser Terme können in einfacher Weise durch Einsetzen des umgeschriebenen Energieintegrals (3.122) bzw. (3.123) in die Energieverschiebungen (3.102) bzw. (3.103) gewonnen werden. In der numerischen Auswertung stellten sich diese Terme $\Delta E_n^{\text{SESEb) ren,2}}$ und $\Delta E_n^{\text{SESEc) ren,2}}$ für alle Partialwellen als sehr klein gegenüber den Termen $\Delta E_n^{\text{SESEb) ren,1}}$ bzw. $\Delta E_n^{\text{SESEc) ren,1}}$ heraus (s. Tabelle 4.4), d.h.:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{SESEb) ren,1}} &\gg \Delta E_n^{\text{SESEb) ren,2}}, \\ \Delta E_n^{\text{SESEc) ren,1}} &\gg \Delta E_n^{\text{SESEc) ren,2}}. \end{aligned} \quad (4.118)$$

Deshalb konnten die Terme $\Delta E_n^{\text{SESEb) ren,2}}$ und $\Delta E_n^{\text{SESEc) ren,2}}$ in der Auswertung vernachlässigt werden [156]. Die folgende Tabelle 4.4 verdeutlicht diese Näherung im Integrationsbereich $E_1 = 0, \dots, 5$ a.u. an wasserstoffartigem Uran für die Partialwelle $L_1 = 0, L_2 = 0$. Die

E_1	$\Delta E_n^{\text{SESEb) ren,1}}$	$\Delta E_n^{\text{SESEb) ren,2}}$	$\Delta E_n^{\text{SESEc) ren,1}}$	$\Delta E_n^{\text{SESEc) ren,2}}$
0	0.00	0.00	0.00	0.00
1	1.10	$< 10^{-18}$	6.30	$< 10^{-16}$
2	0.80	$< 10^{-18}$	4.60	$< 10^{-16}$
3	0.50	$< 10^{-18}$	3.10	$< 10^{-16}$
4	0.07	$< 10^{-17}$	0.60	$< 10^{-15}$
5	0.21	$< 10^{-5}$	0.10	$< 10^{-4}$

Tabelle 4.4: Das Integral I_3 des Loop-Inside-Loop-Diagramms ist proportional zu $1 + S^{\text{in}}(E_1, E_2)$ und das Integral I_4 des Loop-Crossed-Loop-Diagramms ist proportional zu $1 + S^{\text{cr}}(E_1, E_2)$. Die Tabelle verdeutlicht für die Partialwelle $L_1 = 0, L_2 = 0$ an wasserstoffartigem Uran $^{238}\text{U}^{91+}$, daß der Anteil $\Delta E_n^{\text{SESEb) ren,2}}$ bzw. $\Delta E_n^{\text{SESEc) ren,2}}$ gegenüber dem Anteil $\Delta E_n^{\text{SESEb) ren,1}}$ bzw. $\Delta E_n^{\text{SESEc) ren,1}}$ vernachlässigt werden kann. Ähnliche Resultate wurden auch für die höheren Partialwellen gefunden. Die Integration über E_2 wurde bereits ausgeführt. Die Werte in der Tabelle geben somit die gesamte Energieverschiebung $\Delta E^{\text{SESEb)}$, $\Delta E^{\text{SESEc)}$ als Funktion der verbleibenden Integrationsvariablen E_1 an. (Alle Energiewerte in a.u.)

numerischen Ergebnisse der ersten vier Partialwellen der Diagramme der Zwei-Photonen-Selbstenergie für wasserstoffartiges Uran $^{238}\text{U}^{91+}$ und Blei $^{208}\text{Pb}^{81+}$ sind in den folgenden Tabellen 4.5 und 4.6 ersichtlich und wurden erstmalig in [157, 158, 159] veröffentlicht. Für die Berechnung der einzelnen Partialwellen wurden $N = 23$ Gitterpunkte verwendet, und die Ordnung der B-Splines war $k = 4$. Als Vergleich seien an dieser Stelle die entsprechenden Werte für den irreduziblen Anteil des Loop-after-Loop-Diagramms der Arbeit [98] genannt: $N = 28, k = 9, L = 7$. Die Genauigkeit beträgt etwa 10%. Die numerischen Berechnungen wurden mit dem Supercomputer CRAY-T3E mit 32 parallelen Prozessoren am Institut für Hochleistungsrechnen der TU Dresden durchgeführt. Jeder einzelne Prozessor hatte eine Taktfrequenz von 300 MHz. Für die vier Partialwellen wurden insgesamt 30.000 einzelne CPU-Stunden Rechenzeit benötigt. Durch Veränderung der Zahl der Gitterpunkte

	$L_2 = 0$	$L_2 = 1$	$L_2 = 2$	$L_2 = 3$
$L_1 = 0$	0.699	0.384	0.106	-0.059
$L_1 = 1$	0.384	-0.188	0.563	
$L_1 = 2$	-0.427	-0.376		
$L_1 = 3$	0.501			

Tabelle 4.5: Beiträge der einzelnen Partialwellen $\Delta E_{1s}^{(L_1, L_2)}$ zur Energieverschiebung $\Delta E_{1s}^{(2)\text{ren}}$ für wasserstoffartiges Uran (in eV)

	$L_2 = 0$	$L_2 = 1$	$L_2 = 2$	$L_2 = 3$
$L_1 = 0$	0.439	0.158	0.051	-0.04
$L_1 = 1$	0.186	-0.092	0.228	
$L_1 = 2$	-0.135	-0.124		
$L_1 = 3$	0.172			

Tabelle 4.6: Beiträge der einzelnen Partialwellen $\Delta E_{1s}^{(L_1, L_2)}$ zur Energieverschiebung $\Delta E_{1s}^{(2)\text{ren}}$ für wasserstoffartiges Blei (in eV)

von $N = 23$ auf $N = 46$ wurde eine relative numerische Ungenauigkeit von 38% für diese einzelnen Partialwellen ermittelt.

Wie in den vorhergehenden Kapiteln eingehend dargelegt wurde, ergibt sich die gesamte Energieverschiebung der Zwei-Photonen-Selbstenergie als Summe über alle einzelnen Partialwellen:

$$\Delta E_{1s}^{\text{SESE a) red, b), c) ren}} = \sum_{L_1, L_2} \Delta E_{1s}^{L_1, L_2}. \quad (4.119)$$

Um aus den obigen Werten der einzelnen Partialwellen die Energieverschiebung zu ermitteln, müssen deshalb zunächst die einzelnen akkumulativen Summen

$$S_L = \sum_{L_1, L_2}^{L_1+L_2=l} \Delta E_{1s}^{L_1, L_2} \quad (4.120)$$

gebildet werden. Sie ergeben sich mit den obigen Werten aus Tabelle 4.5 und Tabelle 4.6 zu

$$\text{U: } S_0 = 0.70 \text{ eV, } S_1 = 1.47 \text{ eV, } S_2 = 0.96 \text{ eV, } S_3 = 1.59 \text{ eV,}$$

$$\text{Pb: } S_0 = 0.439 \text{ eV, } S_1 = 0.783 \text{ eV, } S_2 = 0.607 \text{ eV, } S_3 = 0.843 \text{ eV.} \quad (4.121)$$

Die einzelnen Werte $(S_L + S_{L+1})/2$ konvergieren sowohl für Uran als auch für Blei, d.h. die Differenz zweier benachbarter Energiewerte wird mit wachsendem L_{max} kleiner. Die Werte für die Energieverschiebung werden wie im Ein-Schleifen-Fall [125] und auch im irreduziblen Anteil des Loop-after-Loop-Diagramms [96, 98] durch eine Extrapolation dieser

einzelnen akkumulativen Summen erhalten. Wie im Abschnitt über die Methode der Partialwellenrenormierung ausgeführt wurde, werden also die benachbarten Summanden der beiden höchsten berechneten Partialwellen von (4.121), d.h. S_2 und S_3 , gemittelt:

$$\Delta E_{1s}^{\text{SESEa)red.,b),c)ren}}(Z = 92) = 1.28 \pm 0.15 \text{ eV} ,$$

$$\Delta E_{1s}^{\text{SESEa)red.,b),c)ren}}(Z = 82) = 0.73 \pm 0.09 \text{ eV} . \quad (4.122)$$

Diese Werte stellen die beste Näherung für den Grenzwert $L_{\max} \rightarrow \infty$ dar. Die angegebenen Fehler wurden dabei wie folgt bestimmt [156, 159]:

Die einzelnen Partialwellen in den Tabellen 4.5 und 4.6 haben zu gleichen Anteilen sowohl negative als auch positive Vorzeichen. Deshalb sollte die oben angegebene Ungenauigkeit von 38% für die einzelnen Partialwellen mit dem statistische Faktor $1/\sqrt{n}$ multipliziert werden. Es ergeben sich damit die in (4.122) angegebenen relativen Fehlerabschätzungen.

Es ist bemerkenswert festzustellen, daß diese Ergebnisse des vollständigen Beitrags der Zwei-Photonen-Selbstenergie (4.122) tatsächlich in guter Übereinstimmung mit der Sign-Approximation (4.112) stehen. Entsprechend der obigen Resultate liefert die Sign-Approximation etwa 40% des exakten Ergebnisses.

4.6 Stand der Vorhersagen zur Lamb-Verschiebung

Um einen Vergleich der erzielten Ergebnisse mit dem Experiment durchzuführen, ist es natürlich notwendig, alle relevanten Beiträge zur Lambverschiebung aufzusummieren. Diese einzelnen Beiträge der QED wurden bereits im Abschnitt 3.1 kurz zusammengefaßt. Insgesamt ergibt sich für die Ein-Elektronensysteme Uran und Blei die folgende Tabelle. Die

Korrekturen (in eV):	$^{238}\text{U}^{91+}$	$^{208}\text{Pb}^{81+}$
endliche Kernaussdehnung	198.82 \pm 0.10	67.25
Selbstenergie (Ordnung α)	355.05	226.33
Vakuumpolarisation (Ordnung α)	-88.60	-48.41
SESE (a) (irred.)	-0.97	-0.51
SESE (a) (red.) (b) (c)	1.28 \pm 0.15	0.73 \pm 0.09
VPVP (d)	-0.22	-0.09
VPVP (e)	-0.15	-0.07
VPVP (f) (Uehling)	-0.60 \pm 0.20	-0.34 \pm 0.10
SEVP (g),(h),(i)	1.12	0.53
S(VP)E (k) (Uehling)	0.13	0.07
relativistischer Rückstoß	0.16	0.10
Kernpolarisation	-0.20 \pm 0.10	0.00
Lambverschiebung (Theorie)	465.82 \pm 0.55	245.59 \pm 0.19
Lambverschiebung (Experiment)	468 \pm 13	290 \pm 75

Tabelle 4.7: Lambverschiebung für den Grundzustand der Ein-Elektronen-Systeme $^{238}\text{U}^{91+}$ und $^{208}\text{Pb}^{81+}$ (in eV). Die Korrektur der endlichen Kernaussdehnung für Uran wurde mit einer Fermiverteilung mit $\langle r^2 \rangle^{1/2} = 5.860 \pm 0.002$ fm und für Blei mit $\langle r^2 \rangle^{1/2} = 5.505 \pm 0.001$ fm berechnet. Zur Notation der Diagramme siehe die Abbildungen 2.4 und 3.4

einzelnen Strahlungskorrekturen sind mit den Diagrammen der Abbildungen 2.4 bzw. 3.4 identisch. Der bisher genaueste gemessene Wert für die Lambverschiebung in Uran wurde in [163] und für Blei in [164] angegeben. Beide Werte wurden bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt gemessen. Für Blei ist die derzeitige Ungenauigkeit zu groß, um etwaige Rückschlüsse beim Vergleich zwischen Theorie und Experiment ziehen zu können. Aber wie bereits eingehender erläutert wurde, ist gerade das Bleisystem für Tests der QED besonders attraktiv, da die Kernpolarisation des Bleikerns praktisch vernachlässigbar ist und somit die Unsicherheiten der inneren Freiheitsgrade des Atomkerns stark reduziert sind (s.a. [160]).

Vom Standpunkt der Theorie sind im Rahmen der gegenwärtigen Messgenauigkeit die Strahlungskorrekturen in erster Ordnung in α unter Einbeziehung der Korrekturen der endlichen Kernaussdehnung ausreichend, um die experimentellen Daten zu verstehen. Die Ergebnisse zwischen Theorie und Experiment zum Beispiel für das Uransystem sind gegenwärtig in exzellenter Übereinstimmung. Vom Blickpunkt der Theorie aus ist es jedoch wesentlich, daß eine etwaige Abweichung zwischen Theorie und Experiment in der Lamb-Verschiebung um etwa 1 eV im Uransystem bereits eine bedeutende Abweichung darstellen würde, welche hinterfragt

werden müsste. Ähnliche Aussagen gelten für das Bleisystem. Es sei in diesem Zusammenhang erwähnt, daß an der GSI bereits Experimente in Vorbereitung sind, welche auf einen experimentellen Fehler von nur $1 \dots 0.1$ eV für das Uransystem als auch für das Bleisystem abzielen. Dann aber werden alle Korrekturen der Ordnung α^2 relevant. Der gegenwärtige Stand dieser Korrekturen wurde in der obigen Tabelle für das wasserstoffartige Uran- und Blei-System aufgenommen. Wesentlich ist dabei, daß die Berechnung des irreduziblen Anteils des Loop-After-Loop-Diagramms SESE a irred) zum Beispiel -0.97 eV für das Uransystem und -0.51 eV für das Bleisystem ergab. Deshalb war durchaus ein ebensolch großer Beitrag der anderen Selbstenergie-Diagramme SESE a red), b), c) zu erwarten, deren Beitrag bisher jedoch nicht berücksichtigt wurde. Daraus folgte eine relative Ungenauigkeit von etwa 1 eV für alle Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2 und es war dringend erforderlich, diesen Beitrag der Selbstenergie zu bestimmen. Aus den Zahlenwerten in obiger Tabelle erkennt man, daß die Berechnung des vollständigen Beitrags der Zwei-Photonen-Selbstenergie die Ungenauigkeiten der Energiekorrekturen der Ordnung α^2 beträchtlich reduzieren.

Der relativistische Rückstoß-Effekt beschreibt den Einfluß der gemeinsamen Bewegung von Kern und gebundenem Elektron auf die Energieverschiebung. Die besondere Schwierigkeit bei der Behandlung dieser Problematik liegt darin, daß die Beschreibung relativistisch und exakt in allen Ordnungen in $Z\alpha$ zu erfolgen hat. Dieses äußerst schwierige Problem konnte 1995 von *Shabaev, Artemyev, Yerokhin* in den Arbeiten [161, 162] gelöst werden.

Schließlich sei noch einmal betont, daß die innere Kerndynamik eine ultimative Grenze für Tests der QED in schweren Ionen setzt. Die Wechselwirkung des Atomkerns mit dem gebundenen Elektron führt nämlich zu energetischen Anregungen des Kerns, und diese wiederum führen zu einer Energieverschiebung des gebundenen Elektrons (s. Kernpolarisation in obiger Tabelle). Die Frage ist deshalb, in welcher Größenordnung die Ungenauigkeit der Parameter der heutigen Kernmodelle liegt und inwieweit sich diese auf die Unbestimmtheit der Lamb-Verschiebung überträgt. Dieser Wert muss als Grenze der Tests der reinen QED-Effekte angesehen werden. Als ein exzellenter und didaktischer Überblick dieser komplexen Problematik sei an dieser Stelle ebenfalls auf [24] verwiesen. Hier soll erwähnt werden, daß man ab dem Niveau von ca. ± 0.1 eV im Uransystem den Bereich reiner QED-Tests verläßt und daß man beginnt, die intrinsische Kerndynamik bzw. Kernstruktur zu erkunden. Im Bleisystem liegt diese ultimative Grenze mit ca. ± 0.01 eV um etwa eine Größenordnung darunter, und damit ist dieses atomare System für Tests reiner QED-Effekte besonders geeignet. Diese Zahlen bedeuten aber auch, daß es mit der Genauigkeit der heutigen Kernmodelle keinen Sinn macht, Strahlungskorrekturen höherer Ordnung zu berechnen.

5 Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation

Die Welt ist im ständigen Werden und Kampf ist der Vater aller Dinge.
Heraklit (um 535 bis 475 v.u.Z.)

5.1 Einleitung

Das Diagramm der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation VPVP f) ist bisher nur in Uehling-Näherung bekannt. Neben dem Diagramm der Selbstenergie-Vakuumpolarisation S(VP)E k) ist es damit das einzige Diagramm in der Ordnung α^2 , welches bisher nicht exakt berechnet worden ist. Ein Grund ist in der zu erwartenden relativ kleinen Korrektur des exakten Beitrags zur Uehling-Näherung dieses Diagramms zu suchen. Die z.B. für Uran mit ± 0.2 eV angegebene Ungenauigkeit beruht auf einem Vergleich des exakten Beitrags mit dem Beitrag der Uehling-Näherung des Diagramms VPVP e) zur Lambverschiebung. Im Fall des $1s$ -Zustandes in Uran $^{238}\text{U}^{91+}$ ergibt nämlich die Uehling-Näherung mit -0.115 eV etwa 75% des exakten Resultats von -0.153 eV. Für das Diagramm VPVP f) ergab die Uehlingnäherung 0.6 eV, woraus die oben angegebene Korrektur von ± 0.2 eV folgt. Es ist klar, daß solche Abschätzungen zwar zulässig, jedoch unter Umständen nicht sehr zuverlässig sind. Wie bereits erwähnt, sind außerdem in naher Zukunft experimentelle Genauigkeiten bis zu ± 0.1 eV z.B. für Uran zu erwarten. Es wurde weiter oben dargelegt, daß dieser Wert aufgrund der Unbestimmtheiten der Parameter der heutigen Kernmodelle eine ultimative Grenze bei den Untersuchungen reiner QED-Effekte darstellt. Aufgrund dieser hohen Präzision erscheint es wichtig, den exakten Beitrag auch des Diagramms der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation zu berechnen. Ziel der Untersuchungen dieses Kapitels ist es deshalb, einen renormierten Ausdruck dieses Diagramms abzuleiten. Dabei soll wie im Fall der Zwei-Photonen-Selbstenergie die Methode der BPHZ-Renormierung angewendet werden. Somit stellen die hier dargelegten Ergebnisse die Grundlage für eine spätere numerische Auswertung des exakten Beitrags des Diagramms VPVP f) dar.

5.2 Die Vakuumpolarisation der Ordnung α

Am Beispiel der Vakuumpolarisation in 1. Ordnung Störungstheorie sollen die grundlegenden Problemkreise *Renormierung* und *Eichinvarianz* eines Graphen mit Vakuumpolarisation kurz diskutiert werden. Dies wird ein späteres Verständnis im Fall der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation erleichtern. Um den renormierten Ausdruck im Fall der Ein-Photonen-Vakuumpolarisation zu finden, muss zunächst eine Potentialentwicklung durchgeführt werden, s. Abbildung 5.1.

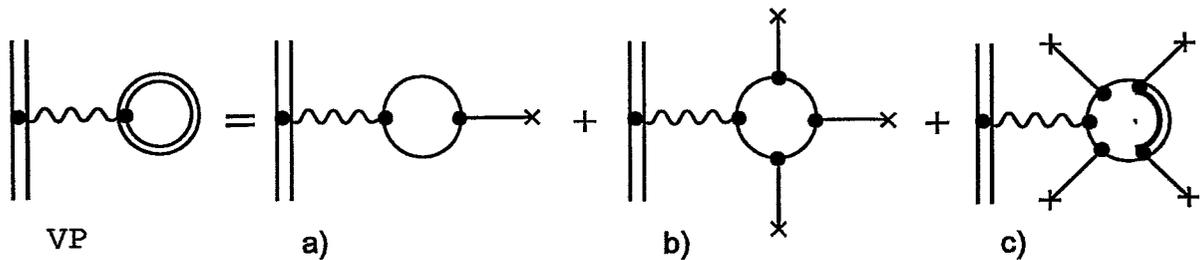


Abbildung 5.1: Die Potentialentwicklung der Vakuumpolarisation in 1. Ordnung Störungstheorie. Entsprechend der BPHZ-Renormierung muss die Entwicklung bis zu fünf äußeren bosonischen Beinen ausgeführt werden. Somit entsteht neben dem Uehling-Term a) und dem endlichen Wichmann-Kroll-Term c) noch ein Term b) mit vier äußeren bosonischen Beinen. Aufgrund des Furry-Theorem verschwinden die Diagramme mit einer ungeraden Anzahl von äußeren Beinen, wenn in der Schleife freie Elektronenpropagatoren stehen.

5.2.1 Renormierung der Vakuumpolarisation der Ordnung α

Die Renormierung der Ein-Photonen-Vakuumpolarisation erfolgt in diesem Abschnitt nach einem Subtraktionsschema, welches später in analoger Weise ebenso für die Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation Verwendung finden wird. Die Vakuumpolarisation VP ist ein Beispiel, an welchem auch das Wechselspiel zwischen Renormierung und Regularisierung sehr gut demonstriert werden kann. Es erscheint an dieser Stelle notwendig, diesen Gesichtspunkt genauer zu betrachten, da in der physikalischen Literatur oft unklar ausgedrückt ist, warum bei der Vakuumpolarisation teilweise eine Regularisierung bereits den physikalisch relevanten Anteil separiert.

Die explizite Struktur der unrenormierten Energieverschiebung des Uehlinganteils $\Delta E^{\text{Uehling, unren}}$ ist für die weiteren Betrachtungen dieses Kapitel nicht wichtig und wird deshalb nicht explizit angegeben. Der renormierte, d.h. physikalisch relevante Anteil des Uehling-Terms $\Delta E^{\text{Uehling, ren}}$ ist analytisch bekannt (s. Abschnitt 3.1.1). Wird also die unrenormierte Energieverschiebung des Uehlinganteils vom gesamten Diagramm subtrahiert, so folgt die renormierte Korrektur höherer Ordnung zu

$$\Delta E_n^{\text{h.o., ren}} = \Delta E_n^{\text{VP}} - \Delta E_n^{\text{Uehling}} - \Delta E_n^{\text{GT}}, \quad (5.1)$$

wobei der Ausdruck ΔE^{GT} den Gegenterm des Diagramms b) bezeichnet. Die Bezeichnung *höhere Ordnung* umfasst dabei offensichtlich alle Korrekturen, welche über die Uehlingnäherung hinausgehen. Die Gleichung (5.1) stellt einen eichinvarianten Term dar, denn die renormierten Energieverschiebungen eichinvarianter Diagramme stellen wiederum eichinvariante

Größen dar. Die Renormierung der Energieverschiebung höherer Ordnung $\Delta E^{\text{h.o.}}$ ist nicht sehr kompliziert, sondern beschränkt sich auf eine Renormierung des Diagramms b) (s. Abbildung 5.2) und soll jetzt genauer betrachtet werden. Der mathematische Ausdruck des

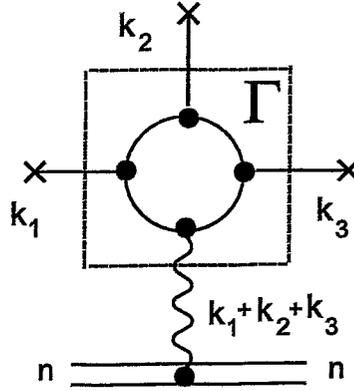


Abbildung 5.2: Das Diagramm b) mit den äußeren Impulsen \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 , \mathbf{k}_3 .

Diagramms b) im Energie-Impuls-Raum lautet

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(b)} &= e^2 \langle n | \gamma^0 \int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{k}_1) V(\mathbf{k}_2) V(\mathbf{k}_3) \\ &\quad \times \frac{1}{0^2 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)^2 + i\epsilon} \hat{F}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, m) | n \rangle, \end{aligned} \quad (5.2)$$

mit der Fouriertransformation des Coulombpotentials (3.26) und der Notation

$$\langle n | \gamma_0 \hat{A} | n \rangle \equiv \int d^3 \mathbf{r} \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}) \gamma_0 \hat{A}(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (5.3)$$

Der mathematische Ausdruck des eigentlichen Feynmandiagramms Γ ist gegeben durch

$$\hat{F}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, m) = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m), \quad (5.4)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{I}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m) &= \text{Tr} \left(\gamma_0 \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q} + \not{k}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1}{\not{q} + \not{k}_1 + \not{k}_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q} + \not{k}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \right). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Der renormierte Ausdruck dieses Diagramms lautet

$$\hat{F}'_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, m) = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{R}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m). \quad (5.6)$$

Das Feynmandiagramm Γ mit vier äußeren bosonischen Beinen ist eine spezielle Variante des Vakuumpolarisationstensor (2.175) und trägt den oberflächlichen Divergenzgrad $\omega(\Gamma) = 0$,

so daß der Tayloroperator t^Γ bis zur 0. Ordnung wirkt und sich somit der Operator \hat{R}_Γ zu

$$\begin{aligned}\hat{R}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m) &= (1 - t^\Gamma) \hat{\bar{R}}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m) \\ &= (1 - t^\Gamma) \hat{I}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m) \\ &= \hat{I}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m) - \hat{I}_\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, q, m)\end{aligned}\quad (5.7)$$

ergibt. Entsprechend dieser Gleichung ist also der Gegenterm der Energieverschiebung höherer Ordnung gegeben durch

$$\begin{aligned}\Delta E_n^{\text{GT}} &= e^2 \langle n | \gamma_0 \int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)r} V(\mathbf{k}_1) V(\mathbf{k}_2) V(\mathbf{k}_3) \\ &\quad \times \frac{1}{0^2 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)^2 + i\epsilon} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \hat{I}_\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, q, m) | n \rangle.\end{aligned}\quad (5.8)$$

Mit der Gleichung (5.8) wurde der renormierte Ausdruck der Korrektur höherer Ordnung entsprechend (5.1) gefunden. Dieser Gegenterm (5.8) kann als *spurioser Term* bezeichnet werden. Diese Bezeichnung wird im folgendem Abschnitt klar.

5.2.2 Diskussion des spuriosen Terms

Im Zusammenhang mit der Vakuumpolarisation VP wird in der physikalischen Literatur [165, 166, 167] ein etwas anderer *spurioser Term* diskutiert. Diese Terminologie wird in diesem Kapitel beibehalten, obwohl der Begriff *spurios* etwas ungünstig gewählt ist, denn dieser Term ist keineswegs spurios, sondern entsteht ganz zwangsläufig durch die Regularisierung. Dies soll in diesem Abschnitt erläutert werden, denn die Diskussion dieses Terms ist auch für die Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation und die Eichinvarianz von wesentlicher Bedeutung. Wird die sphärische Entwicklung nach κ sowohl für den gebundenen als auch für den freien Elektronenpropagator in den renormierten Ausdruck (5.1) eingesetzt, so folgt

$$\Delta E_n^{\text{h.o., ren}} = \sum_{\kappa} \Delta E_n^{\text{VP}, \kappa} - \sum_{\kappa} \Delta E_n^{\text{Uehling}, \kappa} - \sum_{\kappa} \Delta E_n^{\text{GT}, \kappa}.\quad (5.9)$$

Solch eine sphärische Entwicklung stellt eine spezielle Art Regularisierung dar, denn jeder Summand in (5.9) ist konvergent. Es kann nun insbesondere gezeigt werden, daß jeder einzelne Summand des Gegenterms verschwindet, d.h. $\Delta E_n^{\text{GT}, \kappa} = 0$. Für einen etwas allgemeineren Fall wird diese Aussage im Kapitel des Diagramms der Selbstenergie-Vakuumpolarisation S(VP)E explizit bewiesen. Wird demzufolge die sphärische Entwicklung verwendet, dann liefert dieser *spuriose Term* keinen Beitrag. Diese interessante Feststellung soll auch von einem etwas anderen Zugang betrachtet werden, denn sie ist auch für die Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation und sogar für die Selbstenergie-Vakuumpolarisation S(VP)E von Bedeutung.

Die einzelnen Terme in (5.9) können auch mit der Pauli-Villars-Methode regularisiert werden. Somit folgt für (5.9) die folgende Gleichung:

$$\Delta E_n^{\text{h.o., ren}} = \Delta E_n^{\text{VP, reg}} - \Delta E_n^{\text{Uehling, reg}} - \Delta E_n^{\text{GT, reg}}.\quad (5.10)$$

Betrachtet sei zunächst die regularisierte Energieverschiebung $\Delta E_n^{\text{VP, reg}}$. Unter einer Pauli-Villars-Regularisierung dieses Terms ist, nach der Potentialentwicklung in Abbildung 5.1,

die Pauli-Villars-Regularisierung der oberflächlich divergenten Diagramme a) und b) zu verstehen. Die Pauli-Villars-Regularisierung und die Herleitung des physikalisch relevanten Anteils des Uehlingterms a) ist in vielen Standardlehrbüchern enthalten. Eine sehr gute Darstellung ist z.B. in [170] zu finden. Hier soll deshalb nur die Pauli-Villars-Regularisierung des Diagramms b) betrachtet werden. Die regularisierte Energieverschiebung des Diagramms b) ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{b, reg}} &= e^2 \left\langle n \left| \gamma_0 \int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{k}_1) V(\mathbf{k}_2) V(\mathbf{k}_3) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \frac{1}{0^2 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)^2 + i\epsilon} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \left[\hat{I}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, m) - \hat{I}_\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, q, M) \right] \right| n \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Dabei ist M wieder eine große Elektronenmasse. Es ist sehr wichtig festzustellen, daß nun der subtrahierte Term in (5.11) die Rolle eines Gegenterms, bzw. eines *spuriösen Term* einnimmt, welcher nach (2.181) die Eichinvarianz des Diagramms b) sichert. Das bedeutet jedoch, daß jetzt der *regularisierte* Gegenterm $\Delta E_n^{\text{GT, reg}}$ in (5.10) verschwinden sollte, denn sonst wären zwei Terme für die Sicherung der Eichinvarianz notwendig, was sehr seltsam wäre. Der regularisierte Gegenterm verschwindet tatsächlich, und das wird klar, wenn der mathematische Ausdruck des regularisierten Gegenterms

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{GT, reg}} &= e^2 \left\langle n \left| \gamma_0 \int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{k}_1) V(\mathbf{k}_2) V(\mathbf{k}_3) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \frac{1}{0^2 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)^2 + i\epsilon} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \left[\hat{I}_\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, q, m) - \hat{I}_\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, q, M) \right] \right| n \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.12)$$

und insbesondere das darin auftretende Integral

$$\begin{aligned} I &= \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \left(\hat{I}_\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, q, m) - \hat{I}_\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, q, M) \right) \\ &= \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left(\gamma_0 \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right) \\ &\quad - \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left(\gamma_0 \frac{1}{\not{q} - M + i\epsilon} \right). \end{aligned} \quad (5.13)$$

betrachtet wird. Aus einer Dimensionsbetrachtung folgt unmittelbar, daß jedes einzelne Integral von der Masse m bzw. M unabhängig ist, so daß ihre Lösung nur eine von m bzw. M unabhängige Konstante sein kann.¹ Das bedeutet jedoch, daß sich diese Konstanten in (5.13)

¹Dabei ist allerdings zu beachten, daß solch ein Argument eigentlich nur für konvergente Integrale anwendbar ist. Der divergente Anteil könnte durchaus Terme der Art $\ln(m^2/M^2)$ erzeugen! Jedoch treten in (5.13) solche Terme nicht auf. Dies wird z.B. klar, indem der divergente Anteil beider Integrale unter Verwendung einer dimensional Regularisierung ($\text{dim} \rightarrow 4 - 2\epsilon$) berechnet wird und anschließend beide Integrale wieder zusammengefaßt werden. Dabei entstehen Terme der Art $0 \ln(m^2/\mu^2) - 0 \ln(M^2/\mu^2) = 0 \ln(m^2/M^2)$. Die entsprechende Rechnung ist nicht schwierig und soll hier nicht ausgeführt werden. Diese Methode der zwischenzeitlichen Verwendung der dimensional Regularisierung zur einzelnen Auswertung beider Integrale geht im anschließend auszuführendem Limes $\epsilon \rightarrow 0$ selbstverständlich wieder in die Pauli-Villars-Methode über.

gegenseitig wegheben werden. Es ist aber für die spätere Untersuchung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation sehr nützlich, das Verschwinden des Integrals I auch auf eine andere Weise zu beweisen. Dazu wird (5.13) zunächst unter Verwendung der Relation

$$\frac{\partial}{\partial q^0} \left(\frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \right) = -\frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \quad (5.14)$$

als ein Oberflächenintegral umgeschrieben:

$$I = -\text{Tr} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{\partial}{\partial q^0} \left(\gamma_0 \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q} - m + i\epsilon} - \gamma_0 \frac{1}{\not{q} - M + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q} - M + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q} - M + i\epsilon} \right). \quad (5.15)$$

Der Gauss'sche Satz ist zunächst nur für den n -dimensionalen Euklidischen Raum definiert und deshalb nicht direkt auf (5.15) anwendbar. Das betrachtete Integrale hat jedoch in der komplexen q_0 -Ebene nur Pole bei

$$q_0 = \pm \sqrt{\mathbf{q}^2 + (m - i\epsilon)^2} \quad (5.16)$$

und diese Polstruktur erlaubt eine Wick-Rotation $q_0 \rightarrow iq_0$, wodurch das Integral I in den Euklidischen Raum transformiert wird. Das Oberflächenintegral über die unendliche Euklidische Mannigfaltigkeit M_E verschwindet jedoch, wenn der Integrand genügend schnell im Unendlichen abfällt:

$$I = \int_{M_E} d^3 \mathbf{q} dq_0 \frac{\partial}{\partial q^0} f(q) = 0. \quad (5.17)$$

Diese Bedingungen sind durch den Integranden in (5.15) und i.a. für jedes *regularisierte Integral* erfüllt, denn ein endliches Integral im Euklidischen Raum impliziert selbstverständlich immer einen endlichen Integranden, welcher zudem genügend schnell im Unendlichen abfällt. Somit ist das Oberflächenintegral I identisch Null. Daraus folgt selbstverständlich auch das Verschwinden des regularisierten Gegenterms (5.12) und aus (5.10) wird

$$\Delta E_n^{\text{h.o., ren}} = \Delta E_n^{\text{VP, reg}} - \Delta E_n^{\text{Uehling, reg}}. \quad (5.18)$$

Es sei nochmals bemerkt, daß der *regularisierte Gegenterm* bereits ohne eine sphärische Entwicklung verschwindet, und deshalb unterscheidet sich die Gleichung (5.18) von (5.9) durch Wegfallen des Gegenterms. Selbstverständlich kann in (5.18) ebenfalls die sphärische Entwicklung des gebundenen und freien Elektronenpropagators eingesetzt werden. Es ist dann offensichtlich zu erwarten, daß auch der durch die Regularisierung subtrahierte Term in (5.11) verschwinden sollte, welcher ebenfalls als *spurioser Term* bezeichnet worden ist. Dies ist tatsächlich der Fall und wurde erstmalig in [93] explizit bewiesen. Dies demonstriert die enge Verbindung und Konsistenz zwischen Regularisierung und Renormierung der Vakuumpolarisation. Die tiefere Ursache ist in den Gleichungen (2.176) bis (2.183) zu suchen. Es sei deshalb noch einmal betont, daß eine renormierte Vakuumpolarisation ebenso die Eichinvarianz sichert wie eine regularisierte Vakuumpolarisation. Verschwinden deshalb einige Gegenterme in einer beliebigen Regularisierung, so ist trotzdem die Eichinvarianz gesichert.

5.3 Renormierung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation

Ziel dieses Kapitels ist es, einen renormierten Ausdruck der Korrektur höherer Ordnung zur Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation herzuleiten. Die Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation VPVP f) ist noch einmal in der Abbildung 5.3 dargestellt und wird in diesem Kapitel abkürzend als VPVP bezeichnet. Dieses Diagramm stellt eine eichinvariante Untergruppe

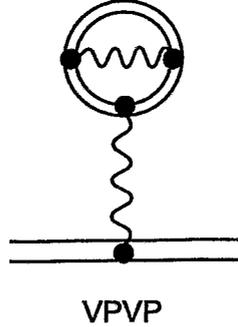


Abbildung 5.3: Die Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation VPVP.

der gesamten Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2 dar und kann deshalb separat von den anderen Diagrammen renormiert und berechnet werden. Streng genommen bezieht sich der Begriff eichinvariante Untergruppe immer auf den renormierten Ausdruck dieser Untergruppe. Der mathematische Ausdruck der unrenormierten Energieverschiebung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation ergibt sich für einen beliebigen äußeren Zustand n zu

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{\text{VPVP}} &= \langle n | \hat{U}^{\text{VPVP}} | n \rangle \\ &= \int d^3 \mathbf{r}_1 \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{U}^{\text{VPVP}}(\mathbf{r}_1) \varphi_n(\mathbf{r}_1) \end{aligned} \quad (5.19)$$

mit dem Potential

$$\begin{aligned} \hat{U}^{\text{VPVP}}(\mathbf{r}_1) &= e^4 \int d^3 \mathbf{r}_2 \int d^3 \mathbf{r}_3 \int d^3 \mathbf{r}_4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\ &\times \alpha_0 D^{00}(E_1, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) D^{\alpha\beta}(E_2, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \\ &\times \text{Tr} [\alpha_0 S_F(E_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \alpha_\alpha S_F(E_1 - E_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \alpha_\beta S_F(E_1, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2)] . \end{aligned} \quad (5.20)$$

Dabei wurde berücksichtigt, daß aufgrund der sphärischen Symmetrie des Potentials der Vakuumpolarisation nur die Zeit-Zeit-Komponente des ersten Photons beiträgt (dazu s.a. Abschnitt 5.3 *Partialwellenentwicklung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation*).

5.3.1 Potentialentwicklung

Die Renormierungstheorie ist zunächst nur für die freie QED definiert. Um eine Renormierung eines Diagramms der Bound-State-QED durchzuführen, ist eine Potentialentwicklung

der vollen Elektronenpropagatoren notwendig. Solch eine Potentialentwicklung muss solange durchgeführt werden, bis die im betrachteten Diagramm enthaltenen Divergenzen als Diagramme der freien QED separieren. Die Abbildung 5.4 stellt solch eine geeignete Potentialentwicklung für das Diagramm VPVP dar. In der Potentialentwicklung wurde das

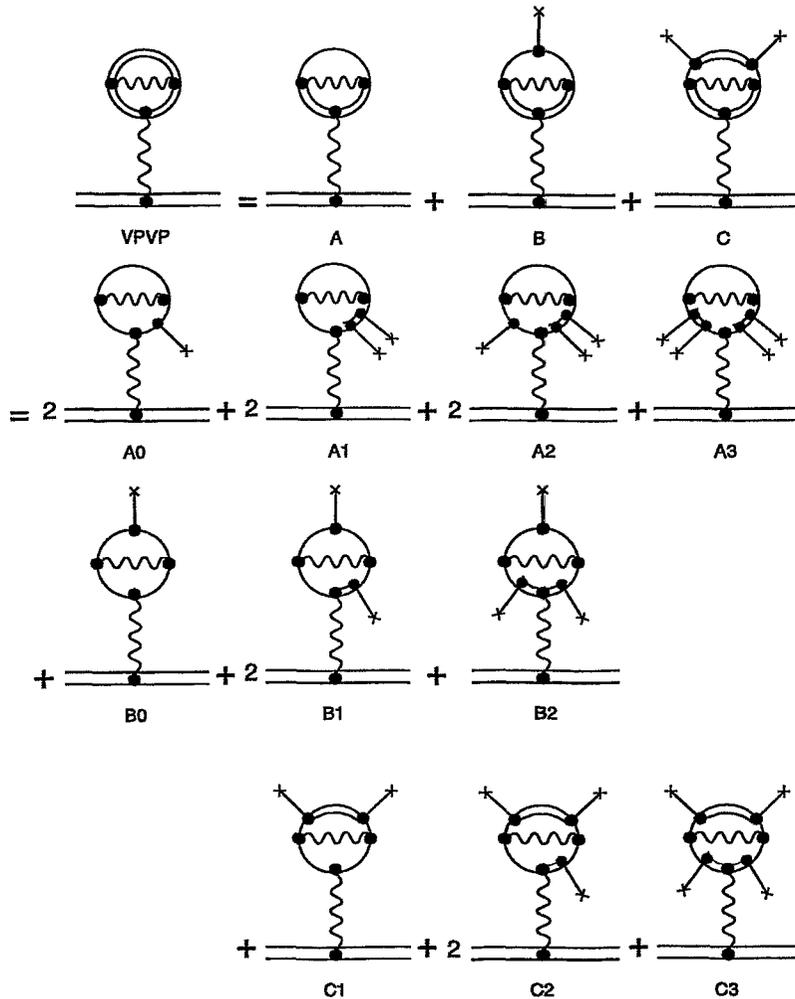


Abbildung 5.4: Die Potentialentwicklung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation. Die Diagramme A0 und B0 sind die Källen-Sabrý-Diagramme. Ihr Beitrag ist bereits berechnet worden, und deshalb können sie vom gesamten Diagramm VPVP subtrahiert werden. Die Diagramme C2 und C3 sind konvergent.

Furry-Theorem berücksichtigt, welches besagt, daß alle Vakuumpolarisations-Diagramme mit freien Elektronenpropagatoren und ungerader Anzahl von äußeren bosonischen Beinen verschwinden. Die Diagramme A0 und B0 sind die *Källen-Sabrý-Diagramme*. Die technisch sehr anspruchsvolle Renormierung dieser Diagramme gelang erstmalig *Källen* und *Sabrý* [103] (1955) und später auch anderen Arbeitsgruppen [104]. Da jedoch der Beitrag der *Källen-Sabrý-Diagramme* zur Lambverschiebung bereits in [105, 107] für beliebige Kernladungszahl Z berechnet worden ist, können diese Diagramme vom gesamten Diagramm VPVP subtrahiert werden. Mit dieser Subtraktion ist eine Renormierung dieser Diagramme dann nicht

mehr notwendig. Die Korrektur höherer Ordnung $\Delta E_n^{\text{h.o.}}$ lautet dann also

$$\Delta E_n^{\text{h.o.}} = \Delta E_n^{\text{VPVP}} - \Delta E_n^{\text{Källen-Sabry}}. \quad (5.21)$$

Ziel im nächsten Abschnitt ist es, einen renormierten Ausdruck dieser auch in Abbildung 5.5 dargestellten Korrektur zu finden.

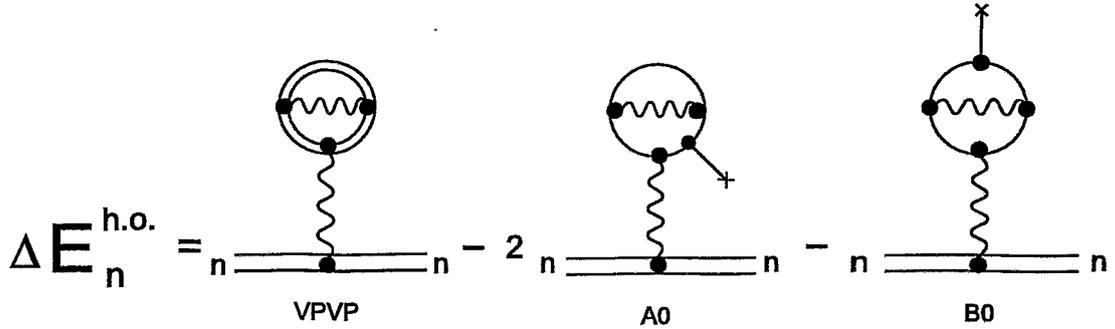


Abbildung 5.5: Die Subtraktion der Källen-Sabry-Diagramme vom gesamten Diagramm VPVP stellt die Korrektur höherer Ordnung $\Delta E_n^{\text{h.o.}}$ dar.

5.3.2 Die äußere Renormierung

Die in Abbildung 5.4 dargestellte Potentialentwicklung ist im Prinzip nicht ausreichend. Entsprechend der BPHZ-Renormierung sind nämlich alle Diagramme Γ , deren oberflächlicher Divergenzgrad $\omega(\Gamma) \geq 0$ ist, divergent und unterliegen einer Renormierung. Deshalb ist es vielmehr notwendig, die Entwicklung der gebundenen Elektronenpropagatoren solange durchzuführen, bis die Zahl der äußeren bosonischen Beine in Diagrammen, welche gebundene Elektronenpropagatoren enthalten, mindestens 5 beträgt, d.h. bis der oberflächliche Divergenzgrad aller Diagramme, welche volle Elektronenpropagatoren enthalten, negativ wird. Wird solch eine Potentialentwicklung durchgeführt, so entstehen die in der Abbildung 5.6 dargestellten Diagramme. Die Renormierung der Diagramme (A11), (A21), (B11), (B21), (C11) und (C21) ist Gegenstand der Untersuchungen dieses Abschnitts, während die Diagramme (A12), (A22), (B12), (B23), (C12) und (C22) und auch (A3) im nachfolgenden Abschnitt renormiert werden.

Renormierung des Diagramms (A21)

Ein typisches Diagramm mit einem Unterdiagramm der Selbstenergie stellt das Diagramm (A21) dar. Die Abbildung 5.7 verdeutlicht neben den Bezeichnungen der einzelnen Impulse auch die Bezeichnungsweise für das gesamte divergente Feynmandiagramm Γ_{A21} und für das darin enthaltene divergente Unterdiagramm γ_{A21} . Die Energieverschiebung dieses Diagramms läßt sich wie folgt schreiben:

$$\Delta E_n^{(A21)} = e^4 \left\langle n \left| \int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} \right. \right. \\ \left. \left. \times e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)r} V(\mathbf{k}_1) V(\mathbf{k}_2) V(\mathbf{k}_3) \frac{1}{0^2 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)^2 + i\epsilon} \hat{F}_{\Gamma_{A21}} \right| n \right\rangle. \quad (5.22)$$

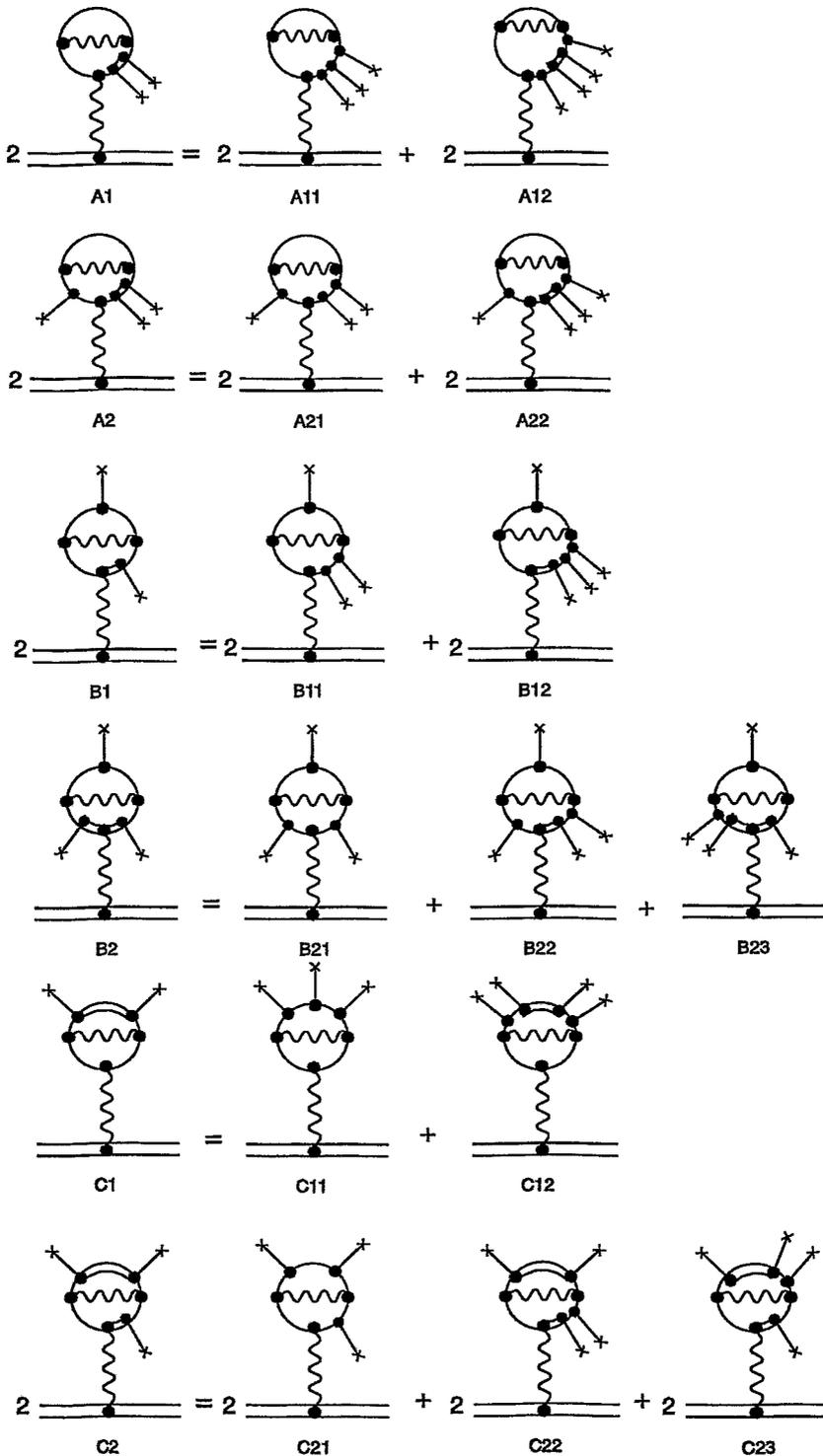


Abbildung 5.6: Die Potentialentwicklung muss solange durchgeführt werden, bis alle Diagramme, welche gebundene Elektronenpropagatoren enthalten, einen negativen oberflächlichen Divergenzgrad ω besitzen. Die Diagramme A12, A22, B12, B22, B23 und C12 haben negativen oberflächlichen Divergenzgrad $\omega(\Gamma) < 0$ und erfordern deshalb nur eine innere Renormierung, während die Diagramme A11, A21, B11, B21, C11 und C21 einen oberflächlichen Divergenzgrad $\omega(\Gamma) = 0$ aufweisen und deshalb eine innere als auch eine äußere Renormierung erfordern. Die Diagramme C22 und C23 sind konvergent.

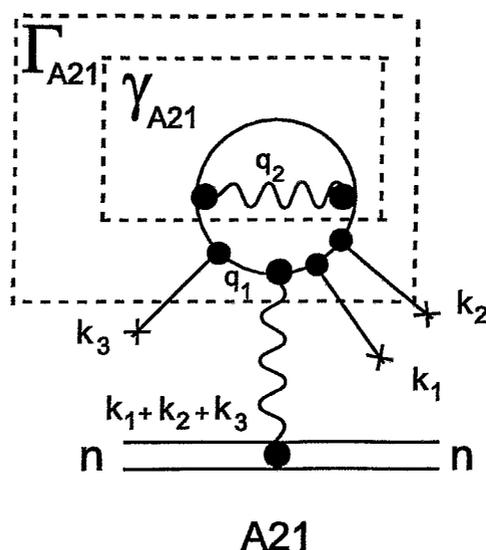


Abbildung 5.7: Das Diagramm A21. Die äußeren unabhängigen bosonischen Impulse, welche aus dem Diagramm Γ_{A21} herauslaufen sind k_1, k_2, k_3 . Der Impuls des ersten Photons ist durch die Impulserhaltung zu $k_1 + k_2 + k_3$ festgelegt. q_1 ist der Impuls des umlaufenden Elektrons und q_2 ist der Impuls des zweiten Photons. Der äußere Zustand ist n . Das innere Unterdiagramm γ_{A21} ist die Selbstenergie in 1. Ordnung Störungstheorie.

Die herauslaufenden Impulse sind dabei $k_j = (0, \mathbf{k}_j)$, $j = 1, 2, 3$, d.h., sie tragen keine Energie und die Funktion $V(\mathbf{k}_j)$, $j = 1, 2, 3$ ist wieder die Fouriertransformierte des Kernpotentials (3.26). Das eigentliche Feynmandiagramm Γ_{A21} , welches mit der BPHZ-Methode renormiert werden soll, lautet im Energie-Impuls-Raum

$$\hat{R}_{\Gamma_{A21}} = \text{Tr} \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{A21}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\Gamma_{A21}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2) &= \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \\ &\times \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \left(\frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \gamma^\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \right) \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Der mathematische Ausdruck des Integranden des Unterdiagramms γ_{A21} wurde in Klammern gesetzt. Dieses Unterdiagramm stellt eine Ein-Schleifen-Selbstenergie eines freien Elektrons dar, welches den (äußeren) Impuls $q_1 + k_3$ trägt. Die Anwendung der \mathcal{R} -Operation auf den Integranden des gesamten Diagramms Γ_{A21} ergibt

$$\hat{R}_{\Gamma_{A21}} = \underbrace{\hat{I}_{\Gamma_{A21}} - \hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}} \left(t^{\gamma_{A21}} \hat{I}_{\gamma_{A21}} \right)}_{\text{innere Renormierung}}$$

$$\underbrace{-t^{\Gamma_{A21}} \hat{I}_{\Gamma_{A21}} + t^{\Gamma_{A21}} \left(\hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}} \left(t^{\gamma_{A21}} \hat{I}_{\gamma_{A21}} \right) \right)}_{\text{äußere Renormierung}} . \quad (5.24)$$

Entsprechend der Definition der *inneren Renormierung* und der *äußeren Renormierung* wurden die Gegenterme bereits einzeln den Renormierungsarten zugeordnet. In diesem Abschnitt interessieren zunächst nur die Gegenterme der äußeren Renormierung. Die Gegenterme der inneren Renormierung werden im nächsten Abschnitt behandelt. Die oberflächlichen Divergenzgrade des gesamten Diagramms Γ_{A21} und des Unterdiagramms γ_{A21} ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \omega(\Gamma_{A21}) &= 0, \\ \omega(\gamma_{A21}) &= 1. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Dementsprechend wirkt der Tayloroperator $t^{\Gamma_{A21}}$ nur bis einschließlich 0. Ordnung, und der Tayloroperator $t^{\gamma_{A21}}$ wirkt bis einschließlich 1. Ordnung. Demnach gibt es genau drei Gegenterme der äußeren Renormierung und zwei Gegenterme der inneren Renormierung. Die äußeren unabhängigen Impulse des gesamten Diagramms sind k_1, k_2, k_3 , und der äußere unabhängige Impuls des Unterdiagramms ist also $q_1 + k_3$. Somit lauten nach Einsetzen der \mathcal{R} -Operation (5.24) in (5.23) die Gegenterme der *äußeren Renormierung* im einzelnen

$$\begin{aligned} \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} t^{\Gamma_{A21}} \hat{I}_{\Gamma_{A21}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2) &= \underbrace{\int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{A21}}(0, 0, 0, q_1, q_2)}_{\text{GT1(A21)}}, \\ \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} t^{\Gamma_{A21}} \left(\hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}}(k_1, k_2, k_3, q_1) \left(t^{\gamma_{A21}} \hat{I}_{\gamma_{A21}}(k_3, q_1, q_2) \right) \right) &= \underbrace{\Sigma^{(1)} \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}}(0, 0, 0, q_1)}_{\text{GT2(A21)}} \\ &+ \underbrace{\Sigma^{(1)'} \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} (\not{q}_1 - m) \hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}}(0, 0, 0, q_1)}_{\text{GT3(A21)}}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Die Bezeichnung $(\not{q}_1 - m) \hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}}$ bedeutet, daß die Diracstruktur $(\not{q}_1 - m)$ genau an der Stelle in dem Diagramm $\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}$, d.h. im Gegenterm GT3, wieder eingefügt werden muß, an welcher das Unterdiagramm γ_{A21} aus dem gesamten Diagramm Γ_{A21} zuvor herausgenommen wurde. Die Abbildung 5.8 soll die Renormierung des Diagramms Γ_{A21} und das Einsetzen der Diracstruktur im Gegenterm GT3 noch einmal graphisch veranschaulichen. In (5.26) wurden die Ein-Schleifen-Gegenterme $\Sigma^{(1)}$ und $\Sigma^{(1)'}$ eingesetzt, welche sich aus den Feynmanregeln ergeben und in den hier definierten äußeren Impulsen folgendermaßen lauten (zu beachten ist, daß der Tayloroperator $t^{\Gamma_{A21}}$ alle Impulse $k_i = 0$ setzt):

$$\begin{aligned} \Sigma^{(1)} &= - \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \gamma^\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \Big|_{\not{q}_1 = m}, \\ \gamma_\rho \Sigma^{(1)'} &= - \frac{\partial}{\partial q_1^\rho} \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \gamma^\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \Big|_{\not{q}_1 = m}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

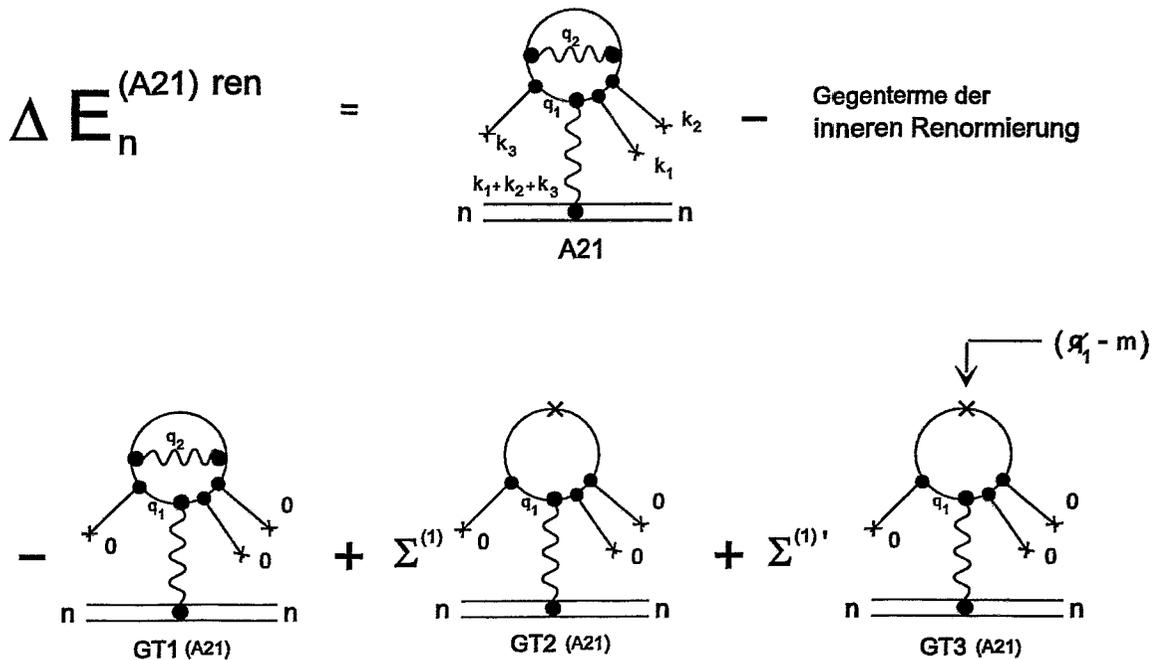


Abbildung 5.8: Die graphische Darstellung der renormierten Energieverschiebung des Diagramms A21. Die Gegenterme der inneren Renormierung wurden nicht graphisch veranschaulicht. Die drei Gegenterme der äußeren Renormierung sind GT1, GT2 und GT3. Die Diracstruktur $(\not{\alpha}_1 - m)$ im Gegenterm GT3 wird genau an der Stelle wieder eingesetzt, an welcher das Unterdiagramm γ_{A21} zuvor herausgenommen und zu einem Punkt, dargestellt durch ein Kreuz, zusammengezogen wurde.

Renormierung des Diagramms (B11)

Jetzt wird ein Diagramm betrachtet, welches als inneres divergentes Unterdiagramm eine Vertexkorrektur besitzt. Ein typisches Diagramm ist der Graph (B11). Die Abbildung 5.9 veranschaulicht die Bezeichnungen der Impulse und die Bezeichnungsweise des gesamten Diagramms Γ_{B11} und des Unterdiagramms γ_{B11} . Die unrenormierte Energieverschiebung des gesamten Diagramms Γ_{B11} lautet

$$\Delta E_n^{(B11)} = e^4 \left\langle n \left| \int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} \times e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{k}_1) V(\mathbf{k}_2) V(\mathbf{k}_3) \frac{1}{0^2 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)^2 + i\epsilon} \hat{F}_{\Gamma_{B11}} \right| n \right\rangle. \quad (5.28)$$

Das zu renormierende Feynmandiagramm folgt im Energie-Impuls-Raum zu

$$\hat{F}_{\Gamma_{B11}} = \text{Tr} \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{B11}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2)$$

mit

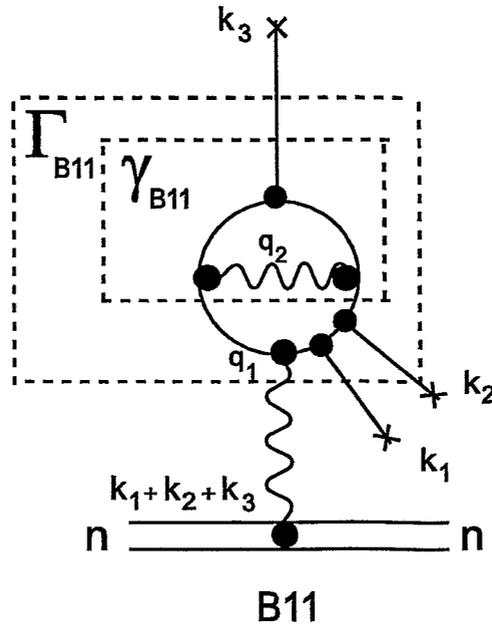


Abbildung 5.9: Das Diagramm B11. Die äußeren unabhängigen bosonischen Impulse, welche aus dem Diagramm Γ_{B11} herauslaufen sind k_1, k_2, k_3 . Der Impuls des ersten Photons ist durch die Impulserhaltung zu $k_1 + k_2 + k_3$ festgelegt. q_1 ist der Impuls des umlaufenden Elektrons und q_2 ist der Impuls des zweiten Photons. Der äußere Zustand ist n . Das Unterdiagramm γ_{B11} ist die Vertexkorrektur in 1. Ordnung Störungstheorie.

$$\hat{I}_{\Gamma_{B11}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2) = \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0$$

$$\times \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \left(\frac{1}{\not{q}_2^2 + i\epsilon} \gamma^\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \right) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} .$$
(5.29)

Wieder wurde der Integrand des Unterdiagramms γ_{B11} in Klammern geschrieben. Diesmal stellt es eine Ein-Schleifen-Vertexkorrektur dar. Die \mathcal{R} -Operation für den Integranden des gesamten Diagramms liefert

$$\hat{R}_{\Gamma_{B11}} = \underbrace{\hat{I}_{\Gamma_{B11}} - \hat{I}_{\Gamma_{B11}/\gamma_{B11}} \left(t^{\gamma_{B11}} \hat{I}_{\gamma_{B11}} \right)}_{\text{innere Renormierung}}$$

$$\underbrace{-t^{\Gamma_{B11}} \hat{I}_{\Gamma_{B11}} + t^{\Gamma_{B11}} \left(\hat{I}_{\Gamma_{B11}/\gamma_{B11}} \left(t^{\gamma_{B11}} \hat{I}_{\gamma_{B11}} \right) \right)}_{\text{äußere Renormierung}} .$$
(5.30)

Da sich die oberflächlichen Divergenzgrade des gesamten Diagramms Γ_{B11} bzw. des Unterdiagramms γ_{B11} zu

$$\omega(\Gamma_{B11}) = 0 ,$$

$$\omega(\gamma_{B11}) = 0$$
(5.31)

ergeben, wirken beide Tayloroperatoren $t^{\Gamma_{B11}}, t^{\gamma_{B11}}$ nur bis einschließlich 0. Ordnung. Somit folgen also zwei Gegenterme von der äußeren und ein Gegenterm von der inneren Renormierung. Einsetzen von (5.30) in (5.29) liefert den renormierten Ausdruck, und die Gegenterme der äußeren Renormierung lauten:

$$\begin{aligned} \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} t^{\Gamma_{B11}} \hat{I}_{\Gamma_{B11}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2) &= \int \underbrace{\frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{B11}}(0, 0, 0, q_1, q_2)}_{\text{GT1(B11)}}, \\ \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} t^{\Gamma_{B11}} \left(\hat{I}_{\Gamma_{B11}/\gamma_{B11}}((k_1, k_2, k_3, q_1)) \left(t^{\gamma_{B11}} \hat{I}_{\gamma_{B11}}(k_3, q_1, q_2) \right) \right) & \\ = \Lambda^{(1)} \int \underbrace{\frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \gamma_0 \hat{I}_{\Gamma_{B11}/\gamma_{B11}}(0, 0, 0, q_1)}_{\text{GT2(B11)}}. & \end{aligned} \quad (5.32)$$

Die Bezeichnung $\gamma_0 \hat{I}_{\Gamma_{B11}/\gamma_{B11}}$ bedeutet wieder die Einsetzung der Diracstruktur γ_0 an derselben Stelle im Diagramm $\Gamma_{B11}/\gamma_{B11}$, an welcher das Unterdiagramm γ_{B11} zuvor herausgenommen wurde. Die Abbildung 5.10 stellt den renormierten Ausdruck der Energieverschiebung des Diagramms (B11) dar und verdeutlicht noch einmal diese Einsetzung der Diracstruktur. In (5.32) wurde wieder die gewöhnliche Bezeichnung für den Gegenterm im Ein-Schleifen-Fall verwendet (zu beachten ist wieder, daß der Tayloroperator $t^{\Gamma_{B11}}$ alle Impulse $k_i = 0$ setzt):

$$\gamma_0 \Lambda^{(1)} = - \int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \gamma^\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \Big|_{\not{q}_1 = m}. \quad (5.33)$$

Zusammenfassung der Gegenterme der äußeren Renormierung

Die fünf in den Abbildungen 5.8 und 5.10 graphisch dargestellten Gegenterme lassen sich wie folgt zusammenfassen. Aus der Beziehung

$$\frac{(\not{q}_1 - m) \hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}}}{(\not{q}_1 - m) \hat{I}_{\Gamma_{A21}/\gamma_{A21}}} = \gamma_0 \hat{I}_{\Gamma_{B11}/\gamma_{B11}}, \quad (5.34)$$

welche auch in Abbildung 5.11 in diagrammatischer Form dargestellt wurde, folgt zusammen mit der unrenormierten Wardidentität $\Sigma^{(1)'} = -\Lambda^{(1)}$, daß sich die beiden Gegenterme GT3 (A21) und GT2 (B11) gegenseitig wegheben. Somit folgt der renormierte Ausdruck der beiden Diagramme (A21) und (B11) insgesamt zu

$$\begin{aligned} \hat{F}'_{\Gamma_{A21}} + \hat{F}'_{\Gamma_{B11}} &= \hat{F}_{\Gamma_{A21}} + \hat{F}_{\Gamma_{B11}} - \text{Gegenterme der inneren Renormierung} \\ &- \underbrace{\int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{A21}}(0, 0, 0, q_1, q_2)}_{\text{GT1(A21)}} - \underbrace{\int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{B11}}(0, 0, 0, q_1, q_2)}_{\text{GT1(B11)}} + \text{GT2(A21)}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Diese Terme lassen sich weiter zusammenfassen. Der Gegenterm GT1 (A21) enthält das Unterdiagramm der unrenormierten Selbstenergie und der Gegenterm GT1 (B11) enthält das

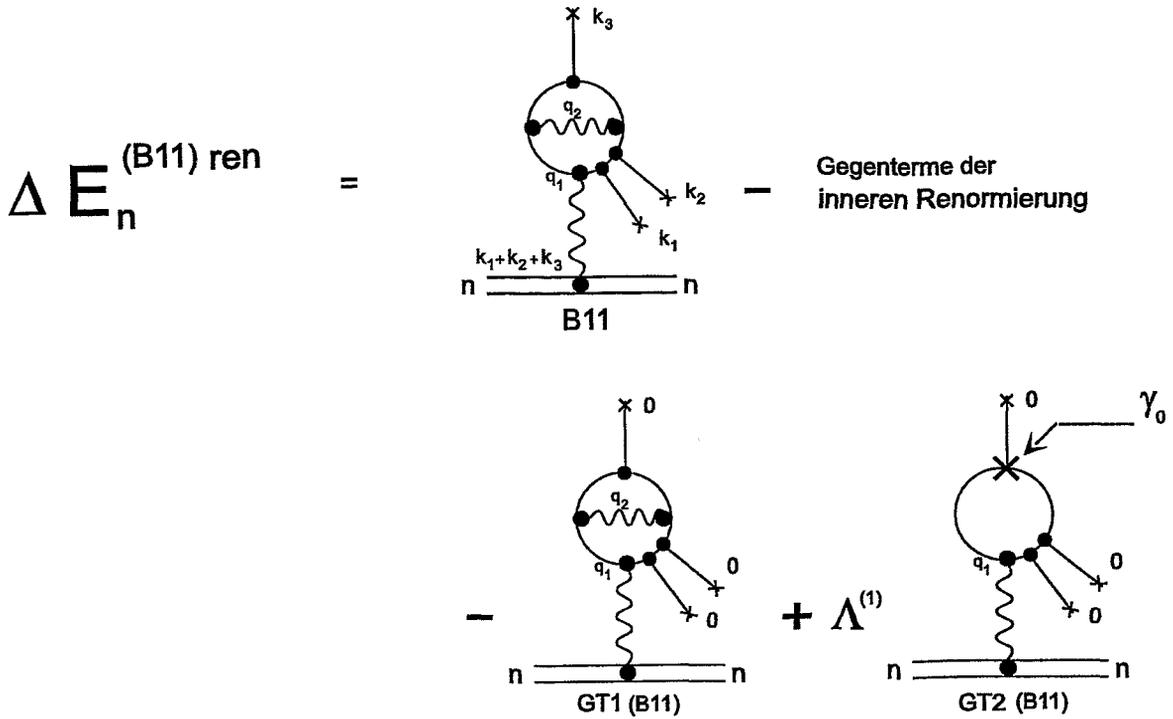


Abbildung 5.10: Die graphische Darstellung der renormierten Energieverschiebung des Diagramms B11. Die Gegenterme der inneren Renormierung wurden nicht graphisch veranschaulicht. Die zwei Gegenterme der äußeren Renormierung sind GT1 und GT2. Die Diracstruktur γ_0 im Gegenterm GT2 wird genau an der Stelle wieder eingesetzt, an welcher das Unterdiagramm γ_{B11} zuvor herausgenommen und zu einem Punkt, dargestellt durch ein Kreuz, zusammengezogen wurde.

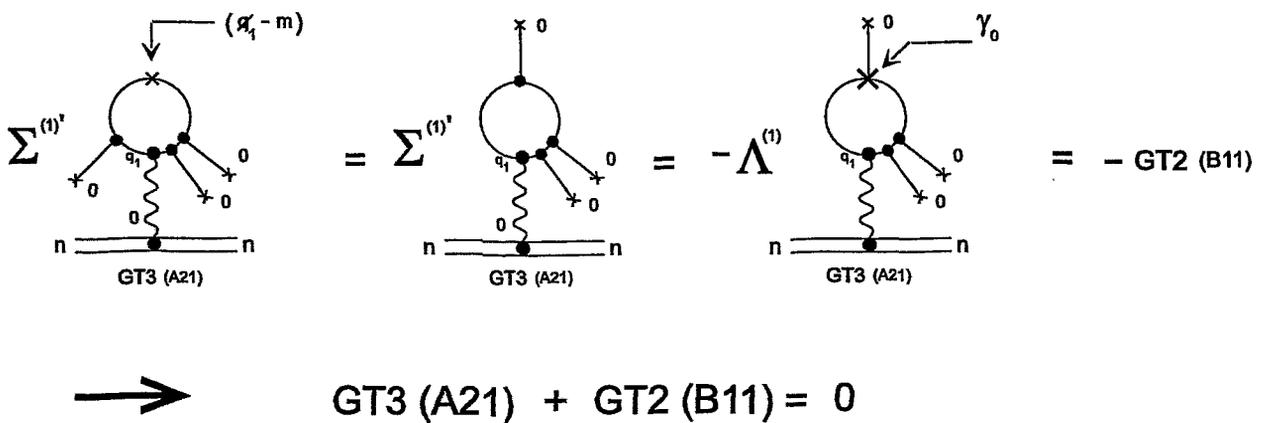


Abbildung 5.11: Die beiden Gegenterme GT3 (A21) und GT2 (B11) heben sich gegenseitig weg.

Unterdiagramm der unrenormierten Vertexkorrektur. Die äußeren Impulse beider Unterdia-

gramme sind \not{q}_1 . Die unrenormierte Selbstenergie und die unrenormierte Vertexkorrektur lassen sich, wie in vorhergehenden Abschnitten dargelegt wurde, schreiben als:

$$\hat{\Sigma}^{(1), \text{unren}}(\not{q}_1) = \Sigma^{(1)} + \Sigma^{(1)'}(\not{q}_1 - m) + \hat{\Sigma}^{(1), \text{ren}}(\not{q}_1),$$

$$\hat{\Lambda}_0^{(1), \text{unren}}(\not{q}_1, \not{q}_1) = \gamma_0 \Lambda^{(1)} + \hat{\Lambda}_0^{(1), \text{ren}}(\not{q}_1, \not{q}_1). \quad (5.36)$$

Werden diese Relationen in die Unterdiagramme der Gegenterme GT1 (A21) und GT1 (B11) eingesetzt, so ergibt sich das in Abbildung 5.12 dargestellte Resultat.

Diese Aufspaltung hat den wichtigen Vorteil, daß sich offensichtlich der Gegenterm GT1

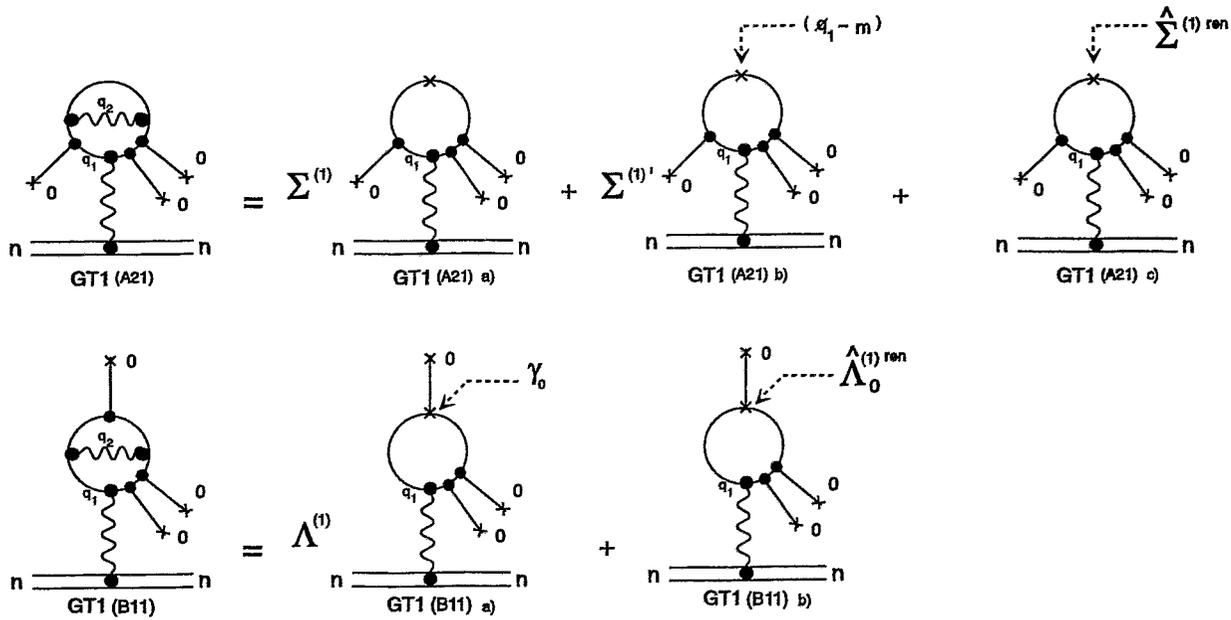


Abbildung 5.12: Werden die Beziehungen (5.36) in die Unterdiagramme der beiden Gegenterme GT1 (A21) bzw. GT1 (B11) eingesetzt, so ergibt sich in diagrammatischer Darstellung die in der Abbildung gezeigte Aufspaltung.

(A21) a) genau gegen den Gegenterm GT2 (A21) in Gleichung (5.35) weghebt. Ebenso heben sich wegen der unrenormierten Wardidentität die Gegenterme GT1 (A21) b) und GT1 (B11) a) der Abbildung 5.12 gegenseitig weg. Dies wurde bereits an dem Beispiel der Gegenterme GT3 (A21) und GT2 (B11) weiter oben demonstriert und in Abbildung 5.11 in diagrammatischer Weise dargestellt. Somit ergibt sich insgesamt für die Renormierung der Diagramme (A21) und (B11) der in der Abbildung 5.13 dargestellte Ausdruck. Zu beachten ist selbstverständlich, daß die Diagramme (A21) und (B11) jeweils mit einem Faktor 2 multipliziert sind.

Die Diagramme (A11), (B21) und (C11) sind topologisch vollkommen den Diagrammen (A21) und (B11) äquivalent. D.h. das Diagramm (A11) enthält als Unterdiagramm die unrenormierte Selbstenergie, und die Diagramme (B21) und (C11) enthalten jeweils als Unterdiagramm wieder die unrenormierte Vertexkorrektur. Deshalb kann die äußere Renormierung der Diagramme (A11), (B21) und (C11) vollkommen nach demselben Schema behandelt werden, welches zu den Gegentermen der Diagramme (A21) und (B11) führte. Es ist klar,

$$\hat{F}'_{\Gamma_{A21}} + \hat{F}'_{\Gamma_{B11}} = \hat{F}_{\Gamma_{A21}} + \hat{F}_{\Gamma_{B11}} + \text{Gegenterme der inneren Renormierung}$$

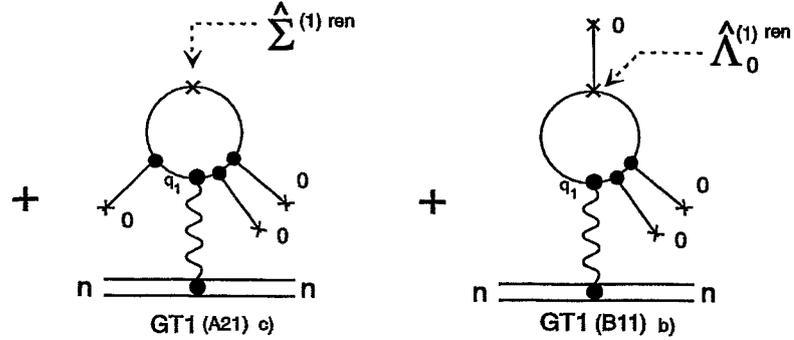


Abbildung 5.13: Der renormierte Ausdruck der Diagramme A21 und B11.

daß sich dann die Gegenterme der äußeren Renormierung der Diagramme (A11), (B21) und (C11) gegenseitig in genau derselben Weise zusammenfassen lassen, wie es in den Diagrammen (A21), (B11) der Fall war. Somit ergibt sich als Summe aller Gegenterme der äußeren Renormierung der fünf Diagramme (A11), (A21), (B11), (B21) und (C11) der folgende mathematische Ausdruck:

$$\begin{aligned} & 2\hat{F}'_{\Gamma_{A11}} + 2\hat{F}'_{\Gamma_{A21}} + 2\hat{F}'_{\Gamma_{B11}} + 1\hat{F}'_{\Gamma_{B21}} + 1\hat{F}'_{\Gamma_{C11}} \\ &= 2\hat{F}_{\Gamma_{A11}} + 2\hat{F}_{\Gamma_{A21}} + 2\hat{F}_{\Gamma_{B11}} + 1\hat{F}_{\Gamma_{B21}} + 1\hat{F}_{\Gamma_{C11}} \\ & \quad - \text{Gegenterme der inneren Renormierung} - I_1 - I_2 . \end{aligned} \tag{5.37}$$

Die beiden Integrale I_1 und I_2 sind dabei gegeben durch (mit $q_1 = (E_1, \mathbf{q}_1)$):

$$\begin{aligned} I_1 = & \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{(2\pi)} \int \frac{d^3\mathbf{q}_1}{(2\pi)^3} \\ & \times \left[\hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{h}_1, \not{h}_1) \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \right. \\ & + \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{h}_1, \not{h}_1) \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \\ & + \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{h}_1, \not{h}_1) \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \\ & \left. + \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{h}_1, \not{h}_1) \frac{1}{\not{h}_1 - m + i\epsilon} \right] \end{aligned} \tag{5.38}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
I_2 &= \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{(2\pi)} \int \frac{d^3\mathbf{q}_1}{(2\pi)^3} \\
&\times \left[\gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{q}_1) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \right. \\
&+ \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{q}_1) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \\
&+ \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{q}_1) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \\
&\left. + \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{q}_1) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \right]. \quad (5.39)
\end{aligned}$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, daß der Gegenterm der äußeren Renormierung des Diagramms (C21) noch nicht inbegriffen ist. Dieser Gegenterm des Diagramms (C21) wird nach der Diskussion der beiden Integrale (5.38), (5.39) behandelt und ist von wesentlicher Bedeutung. Die Integrale (5.38) und (5.39) sind selbstverständlich immer als regularisierte, d.h. endliche Integrale zu verstehen, wobei die Art der verwendeten Regularisierung vollkommen beliebig sein kann.

Die renormierte Selbstenergie und auch die renormierte Vertexkorrektur haben keine Pole. Das bedeutet, daß die obigen beiden Integrale I_1, I_2 nur Pole bei $E_1 = \pm\sqrt{\mathbf{q}_1^2 + (m - i\epsilon)^2}$ haben und deshalb eine Wickrotation $E_1 \rightarrow iE_1$ in den Euklidischen Raum durchführbar ist, denn in der E_1 -Ebene fallen die Integranden in der oberen/unteren Halbebene genügend schnell ab. Zur Diskussion der Integrale I_1, I_2 ist es deshalb sehr nützlich, sie in Oberflächenintegrale umzuschreiben. Dazu seien zunächst die beiden folgenden Integrale I_A, I_B (im Minkowskiraum) betrachtet:

$$\begin{aligned}
I_A &= -\text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{q}_1}{(2\pi)^3} \\
&\times \frac{\partial}{\partial E_1} \left[\hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{q}_1, \not{q}_1) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \right] = 0, \quad (5.40)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
I_B &= -\text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{q}_1}{(2\pi)^3} \\
&\times \frac{\partial}{\partial E_1} \left[\hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{q}_1) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \right] = 0. \quad (5.41)
\end{aligned}$$

Diese Integrale sind Null, da Oberflächenintegrale regularisierter Integranden im Euklidischen Raum verschwinden [171] (auf eine Wickrotation dieser beiden Integrale wird hier aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet). Wird nun wieder die Relation

$$\frac{\partial}{\partial E_1} \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} = -\frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \quad (5.42)$$

als auch die renormierte Ein-Schleifen-Wardidentität

$$\frac{\partial}{\partial E_1} \hat{\Sigma}^{(1)\text{ren}}(\not{p}_1) = -\hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{p}_1, \not{p}_1) \quad (5.43)$$

und die Invarianz einer Spur unter zyklischer Vertauschung der in ihr auftretenden Operatoren verwendet, so folgt unmittelbar:

$$I_A + I_B = I_1 + I_2$$

$$-\text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{(2\pi)} \int \frac{d^3 q_1}{(2\pi)^3} \left[\left(\frac{\partial}{\partial E_1} \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{p}_1, \not{p}_1) \right) \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \right]. \quad (5.44)$$

Dieses interessante Resultat besagt, daß sich die Gegenterme der äußeren Renormierung der Diagramme (A11), (A21), (B11), (B21) und (C11) zu einem einzigen Gegenterm GT^{Summe} zusammenfassen lassen, welcher die folgende Struktur besitzt:

$$GT^{\text{Summe}} = \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{(2\pi)} \int \frac{d^3 q_1}{(2\pi)^3}$$

$$\times \left[\left(\frac{\partial}{\partial E_1} \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{p}_1, \not{p}_1) \right) \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \right]. \quad (5.45)$$

Renormierung des Diagramms (C21) und Zusammenfassung aller Gegenterme der äußeren Renormierung

An dieser Stelle ist es nun notwendig, die Renormierung des Diagramms (C21) zu betrachten. Die Renormierung des Diagramms (C21) ist von allen Diagrammen, welche eine äußere Renormierung erfordern, die unkomplizierteste, denn die beiden Unterdiagramme γ_{C21} des Diagramms (C21) sind konvergent, d.h. ihr oberflächlicher Divergenzgrad ist negativ. Der oberflächliche Divergenzgrad des gesamten Diagramms (C21) ist jedoch

$$\omega(\Gamma_{C21}) = 0, \quad (5.46)$$

und somit muss eine äußere Renormierung dieses Diagramms durchgeführt werden. Das Diagramm wurde noch einmal in Abbildung 5.14 dargestellt. Die Energieverschiebung dieses Diagramms läßt sich wieder wie folgt schreiben:

$$\Delta E_n^{(C21)} = e^4 \left\langle n \left| \gamma_0 \int \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k_3}{(2\pi)^3} \right. \right.$$

$$\times \left. e^{i(k_1+k_2+k_3)r} V(k_1)V(k_2)V(k_3) \frac{1}{0^2 - (k_1+k_2+k_3)^2 + i\epsilon} \hat{F}_{\Gamma_{C21}} \right| n \rangle. \quad (5.47)$$

Die herauslaufenden Impulse sind $k_j = (0, \mathbf{k}_j)$, $j = 1, 2, 3$. Das Feynmandiagramm Γ_{C21} lautet im Energie-Impuls-Raum

$$\hat{F}_{\Gamma_{C21}} = \text{Tr} \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{C21}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2)$$

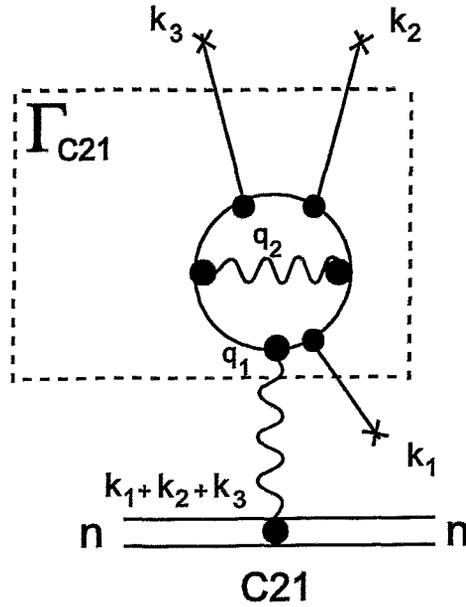


Abbildung 5.14: Das Diagramm C21. Es erfordert keine innere Renormierung, sondern nur eine äußere Renormierung, denn die beiden Unterdiagramme sind konvergent.

mit

$$\begin{aligned}
 \hat{I}_{\Gamma_{C21}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2) &= \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \left(\gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \right. \\
 &\times \frac{1}{\not{q}_1 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 + \not{k}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 + \not{k}_3 - m + i\epsilon} \gamma_0 \\
 &\left. \times \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \right). \quad (5.48)
 \end{aligned}$$

Die Anwendung der \mathcal{R} -Operation auf den Integranden dieses Diagramms ergibt

$$\hat{R}_{\Gamma_{C21}} = \hat{I}_{\Gamma_{C21}} \underbrace{-t^{\Gamma_{C21}} \hat{I}_{\Gamma_{C21}}}_{\text{äußere Renormierung}}. \quad (5.49)$$

Entsprechend gibt es also nur einen Gegenterm dieses Diagramms, und er lautet nach Einsetzen von (5.49) in (5.48):

$$\begin{aligned}
 \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} t^{\Gamma_{C21}} \hat{I}_{\Gamma_{C21}}(k_1, k_2, k_3, q_1, q_2) &= \underbrace{\int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \hat{I}_{\Gamma_{C21}}(0, 0, 0, q_1, q_2)}_{GT1(C21)} \\
 &= \int \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon} \left(\int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \gamma_\alpha \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \right. \\
 &\left. \times \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{q}_1 - \not{q}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \right) \frac{1}{\not{q}_1 - m + i\epsilon}. \quad (5.50)
 \end{aligned}$$

Der Term in Klammern läßt sich nun unter Verwendung der Beziehung (5.42) ebenfalls als ein Ableitungsterm der unrenormierten Vertexkorrektur wie folgt umschreiben ($q_1 = (E_1, \mathbf{q}_1)$)

$$\left(\int \frac{d^4 q_2}{(2\pi)^4} \frac{1}{q_2^2 + i\epsilon} \gamma_\alpha \frac{1}{\not{p}_1 - \not{p}_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - \not{p}_2 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - \not{p}_2 - m + i\epsilon} \gamma^\alpha \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial E_1} \hat{\Lambda}_0^{\text{unren}}(\not{p}_1, \not{p}_1), \quad (5.51)$$

und so ergibt sich für den Gegenterm GT1 (C21) insgesamt

$$GT1(C21) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int \frac{d^3 \mathbf{q}_1}{(2\pi)^3} \text{Tr} \left[\gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \left(\frac{\partial}{\partial E_1} \hat{\Lambda}_0^{\text{unren}}(\not{p}_1, \not{p}_1) \right) \frac{1}{\not{p}_1 - m + i\epsilon} \right]. \quad (5.52)$$

Da das Diagramm (C21) zweimal auftritt, d.h mit einem Faktor 2 multipliziert werden muss, und aufgrund der Relation

$$\frac{\partial}{\partial E_1} \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{ren}}(\not{p}_1, \not{p}_1) = \frac{\partial}{\partial E_1} \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{unren}}(\not{p}_1, \not{p}_1), \quad (5.53)$$

welche unmittelbar aus (5.36) folgt, ist somit klar, daß sich der Gegenterm 2 GT1 (C21) exakt gegen den Term GT^{Summe} aus Gleichung (5.45) weghebt. Mit den Relationen (5.45) und (5.53) ist somit bewiesen worden, daß die Summe aller Gegenterme der äußeren Renormierung der regularisierten Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation verschwindet [172]. Somit müssen nur die Gegenterme der inneren Renormierung betrachtet werden. Dieses Resultat stellt eine wesentliche Vereinfachung in der numerischen Auswertung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation dar.

5.3.3 Die innere Renormierung

Aus den Ergebnissen des vorangegangenen Abschnitts folgt, daß nur die Gegenterme der inneren Renormierung betrachtet werden müssen und daß demzufolge die in Abbildung 5.4 dargestellte Potentialentwicklung ausreichend ist, um alle Gegenterme zu erhalten. Selbstverständlich beinhaltet eine innere Renormierung der Diagramme der Abbildung 5.4 bereits auch die Gegenterme der inneren Renormierung der im vorhergehenden Abschnitt behandelten Diagramme. Die Gegenterme der inneren Renormierung lassen sich recht einfach deduzieren, denn die Unterdiagramme der zu renormierenden Diagramme (A1),(A2),(A3),(B1),(B2) und (C1) sind wieder die bereits bekannten divergenten Ein-Schleifen-Diagramme *Selbstenergie* und *Vertexkorrektur*. Somit werden einfach alle divergenten Unterdiagramme nach folgendem Schema ersetzt:

$$\hat{\Sigma}^{(1)\text{unren}}(\not{p}) \rightarrow \hat{\Sigma}^{(1)\text{unren}}(\not{p}) - \Sigma^{(1)} - \Sigma^{(1)'}(\not{p} - m),$$

$$\hat{\Lambda}_0^{(1)\text{unren}}(\not{p}, \not{k}) \rightarrow \hat{\Lambda}_0^{(1)\text{unren}}(\not{p}, \not{k}) - \gamma_0 \Lambda^{(1)}. \quad (5.54)$$

Diese Renormierungsprozedur ist in der Abbildung 5.15 in diagrammatischer Form dargestellt. Die Källen-Sabrá-Diagramme sind in der Korrektur höherer Ordnung nicht mehr enthalten, und deshalb ist es nicht notwendig, diese Diagramme zu renormieren.

5.3.4 Der renormierte Ausdruck der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation

Die hergeleiteten Gegenterme der inneren Renormierung müssen in einer Form zusammengefaßt werden, welche eine möglichst einfache Auswertung zuläßt. Die Terme proportional zu $\Sigma^{(1)'}$ heben sich wegen der unrenormierten Wardidentität $\Sigma^{(1)'} = -\Lambda^{(1)}$ exakt gegen die Terme heraus, welche proportional zu $\Lambda^{(1)}$ sind. Die verbleibenden Gegenterme proportional zu $\Sigma^{(1)}$ können zusammengefaßt werden, indem die Potentialentwicklung in diesen Gegentermen umgekehrt, d.h. rückgängig gemacht wird. Die so gefundenen Terme stellen den gesuchten Ausdruck der Gegenterme für die Korrektur höherer Ordnung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation dar. Somit konnte erstmalig ein mathematischer Ausdruck für die renormierte Energieverschiebung des Diagramms der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation hergeleitet werden [172]. In Abbildung 5.16 ist der so gefundene Ausdruck in diagrammatischer Form dargestellt. Schließlich seien zusammenfassend die mathematischen Ausdrücke notiert, welche den Diagrammen der Abbildung 5.16 entsprechen. Der renormierte Ausdruck läßt sich schreiben als

$$\Delta E_n^{\text{VPVP ren}} = \langle n | \hat{U}^{\text{VPVP}} - 2\hat{U}^{\text{A0}} - 1\hat{U}^{\text{B0}} - \Sigma^{(1)} (\hat{U}^{\text{GT1}} - 2\hat{U}^{\text{GT2}}) | n \rangle. \quad (5.55)$$

Das Potential \hat{U}^{VPVP} wurde bereits in (5.20) angegeben. Die Potentiale der beiden Källen-Sabry-Diagramme lauten (mit $\alpha_0 = \mathbb{1}$):

$$\begin{aligned} \hat{U}^{\text{A0}}(\mathbf{r}_1) &= e^4 \int d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 d^3\mathbf{r}_4 d^3\mathbf{r}_5 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\ &\quad \times D^{00}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0) D^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4, E_2) V(\mathbf{r}_3) \\ &\quad \times \text{Tr} [S_F^0(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3, E_1) \alpha_\alpha S_F^0(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4, E_1) S_F^0(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5, E_1 - E_2) \alpha_\beta \\ &\quad \times S_F^0(\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_2, E_1)] \end{aligned} \quad (5.56)$$

und

$$\begin{aligned} \hat{U}^{\text{B0}}(\mathbf{r}_1) &= e^4 \int d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 d^3\mathbf{r}_4 d^3\mathbf{r}_5 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\ &\quad \times D^{00}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0) D^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4, E_2) V(\mathbf{r}_5) \\ &\quad \times \text{Tr} [S_F^0(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3, E_1) \alpha_\alpha S_F^0(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_5, E_1 - E_2) S_F^0(\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_4, E_1 - E_2) \alpha_\beta \\ &\quad \times S_F^0(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2, E_1)], \end{aligned} \quad (5.57)$$

und die mathematischen Ausdrücke der Potentiale der beiden Gegenterme lauten:

$$\hat{U}^{\text{GT1}}(\mathbf{r}_1) = e^2 \int d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} D^{00}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0) \alpha^0$$

$$\times \text{Tr} \left[S_F(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, E) \gamma_0 S_F(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2, E) \right] \quad (5.58)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \hat{U}^{\text{GT2}}(\mathbf{r}_1) = & e^2 \int d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{r}_3 d^3 \mathbf{r}_4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \alpha^0 D^{00}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0) V(\mathbf{r}_3) \\ & \times \text{Tr} \left[\gamma_0 S_F^0(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3, E) S_F^0(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4, E) S_F^0(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2, E) \right] . \end{aligned} \quad (5.59)$$

Es sei bemerkt, daß der vielleicht etwas seltsam erscheinende Gegenterm GT2 in dem Gegenterm GT1 ebenfalls enthalten ist. Dies wird nach einer Potentialentwicklung des Gegenterms GT1 klar. Somit hebt sich insgesamt der Gegenterm GT2 heraus. Das ist auch vollkommen verständlich, denn der Gegenterm GT2 ist ein typischer Gegenterm der Källen-Sabry-Diagramme A0 und B0, d.h. er sollte in dem renormierten Ausdruck der Energiekorrektur höherer Ordnung tatsächlich nicht auftreten.

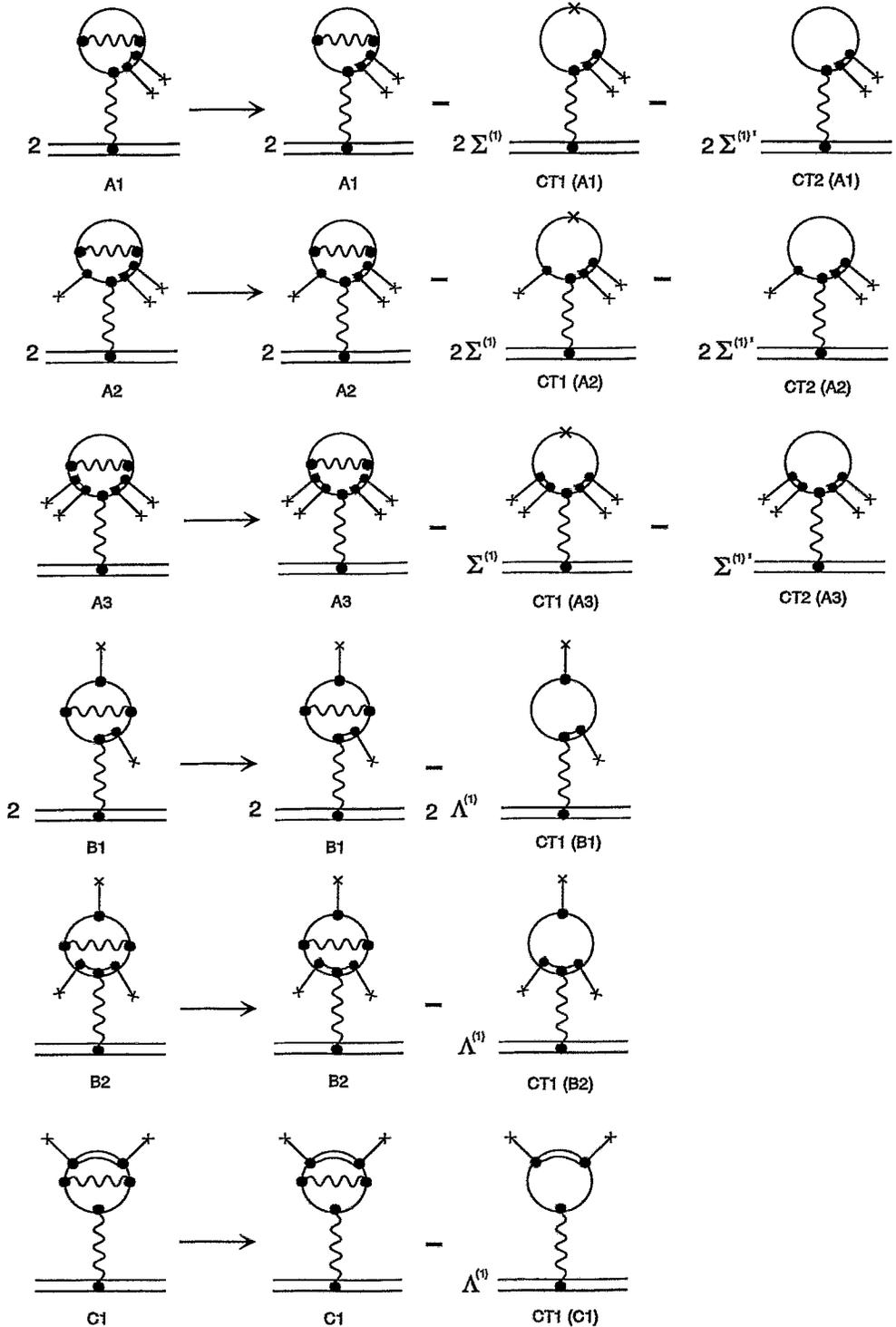


Abbildung 5.15: Die innere Renormierung kann durch Ersetzung der divergenten Unterdiagramme entsprechend der Gleichung (5.54) durchgeführt werden. In den Gegentermen GT2 (A1), GT2 (A2) und GT2 (A3) könnten die Kreuze zusammen mit dem Faktor $(\not{q} - m)$ weggelassen werden, denn die Diracstruktur $(\not{q} - m)$ kürzt sich exakt mit dem Elektronenpropagator $1/(\not{q} - m)$.

$$\Delta E_n^{\text{h.o. ren}} = \underbrace{\text{VPVP}}_{n \text{---} n} - 2 \underbrace{\text{A0}}_{n \text{---} n} - \underbrace{\text{B0}}_{n \text{---} n} - \Sigma^{(1)} \left(\underbrace{\text{GT1}}_{n \text{---} n} - 2 \underbrace{\text{GT2}}_{n \text{---} n} \right)$$

Abbildung 5.16: Der renormierte Ausdruck der Korrektur höherer Ordnung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation. Die Gegenterme der inneren Renormierung können zu den zwei Gegentermen GT1 und GT2 zusammengefaßt werden.

5.4 Die Partialwellenentwicklung

In diesem Abschnitt soll die Partialwellenentwicklung der mathematischen Ausdrücke der renormierten Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation durchgeführt werden. Da die Impulse k und k' als Argumente in den sphärischen Besselfunktionen explizit angegeben werden müssen, ist es sehr zweckmäßig, in diesem Abschnitt die einzelnen Ortskoordinaten in den Matrixelementen ebenfalls explizit mitzuschreiben. Dementsprechend lautet die Notation eines Matrixelements

$$\langle \varphi_s(\mathbf{r}_1) | \alpha^\mu C^L(1) j_{L_1}(kr_1) | \varphi_t(\mathbf{r}_1) \rangle \equiv \int d^3 \mathbf{r}_1 \varphi_s^\dagger(\mathbf{r}_1) \alpha^\mu C^L(\theta_1, \phi_1) j_{L_1}(kr_1) \varphi_t(\mathbf{r}_1). \quad (5.60)$$

Neben der sphärischen Entwicklung der gebundenen und freien Elektronenpropagatoren wird in der numerischen Auswertung auch der Photonenpropagator nach Partialwellen entwickelt. Diese Entwicklung verläuft nach demselben Schema, welches in der Zwei-Photonen-Selbstenergie angewendet wurde. D.h. es werden zunächst die vollen Elektronenpropagatoren bzw. freien Elektronenpropagatoren und der Photonenpropagator in die Potentiale eingesetzt. Nach Ausführung der Winkelintegration im Exponenten entsteht wieder die typische $\sin(kr)/r$ -Struktur, welche nach Partialwellen entwickelt wird. Für das Potential der unrenormierten Energieverschiebung entsteht so nach Ausführung der Spur:

$$\begin{aligned} \hat{U}^{\text{VPVP}}(\mathbf{r}_1) &= -\frac{e^4}{(2\pi^2)^2} \int_0^\infty dk \int_0^\infty k'^2 dk' \sum_{r,s,t} I_1(E_r, E_s, E_t, k') \\ &\times \sum_{L_1, L_2=0}^\infty (2L_1+1)(2L_2+1) C^{L_1}(1) j_{L_1}(kr_1) \alpha_\mu \\ &\times \langle \varphi_t(\mathbf{r}_2) | \alpha^\mu C^{L_1}(2) j_{L_1}(kr_2) | \varphi_r(\mathbf{r}_2) \rangle \langle \varphi_r(\mathbf{r}_3) | \alpha_\alpha C^{L_2}(3) j_{L_2}(k'r_3) | \varphi_s(\mathbf{r}_3) \rangle \\ &\times \langle \varphi_s(\mathbf{r}_4) | \alpha^\alpha C^{L_2}(4) j_{L_2}(k'r_4) | \varphi_t(\mathbf{r}_4) \rangle. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Die sphärischen Tensoren mit demselben Drehimpuls L sind dabei jeweils vektoriell multipliziert. Da in der Summe über die Quantenzahlen r, s, t über alle Orientierungen m_r, m_s, m_t des gesamten Drehimpulses j summiert wird, kann gezeigt werden, daß

$$\mu = 0, \quad \text{d.h.} \quad \alpha_\mu \rightarrow \alpha_0 = \mathbb{1} \quad (5.62)$$

gelten muss. Aus dieser Einschränkung kann sofort eine weitere Vereinfachung gefolgert werden, denn aus der Energieverschiebung (5.55) folgen mit Einsetzen des Potentials (5.62) nun mit einem beliebigen äußeren Zustand n immer Matrixelemente der Form:

$$\langle \varphi_n(\mathbf{r}_1) | C^{L_1}(\theta_1, \phi_1) j_{L_1}(kr_1) | \varphi_n(\mathbf{r}_2) \rangle. \quad (5.63)$$

Das Einsetzen der Wellenfunktion $|\varphi_n\rangle$ ergibt unmittelbar die folgenden Winkelintegrale

$$\int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^\pi d\theta_1 \sin \theta_1 Y_{l_1, m_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{L_1, M_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{l_1, m_1}^*(\theta_1, \phi_1) = \sqrt{\frac{2L_1+1}{4\pi}} C_{l_1 0 L_1 0}^{l_1 m_1} C_{l_1 m_1 L_1 M_1}^{l_1 m_1}. \quad (5.64)$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten C sind aber nur dann von 0 verschieden, wenn die Relationen

$$\begin{aligned} |l_1 - l_2| &\leq L_1 \leq l_1 + l_2, \\ m_1 + m_2 &= M, \\ l_1 + L_1 + l_2 &\text{ muss geradzahlig sein} \end{aligned} \quad (5.65)$$

erfüllt sind. Diese Beschränkungen bedeuten, daß die Summe über die Partialwelle L_1 nach endlich vielen Summanden abbricht, so daß es effektiv nur eine Summation über die Partialwelle L_2 gibt. Für den wichtigen Fall, daß der äußere Zustand n der Grundzustand ist, bedeuten diese Bedingungen z.B., daß nur der eine Summand $L_1 = 0, M_1 = 0$ beiträgt. Dieselben Aussagen gelten selbstverständlich auch für alle Gegenterme, denn das betrachtete Matrixelement ist in allen Termen impliziert.

Die Partialwellenentwicklung der subtrahierten Källen-Sabry-Diagramme lautet (unter Beachtung von (5.62)):

$$\begin{aligned} \hat{U}^{A0}(\mathbf{r}_1) &= -\frac{e^4}{(2\pi^2)^2} \int_0^\infty dk \int_0^\infty k'^2 dk' \int d^3\mathbf{p}_1 \int d^3\mathbf{p}_2 \int d^3\mathbf{p}_3 \int d^3\mathbf{p}_4 \\ &\times I_2(E_{p_1}, E_{p_2}, E_{p_3}, E_{p_4}, k') \sum_{L_1, L_2=0}^\infty (2L_1 + 1)(2L_2 + 1) C^{L_1}(1) j_{L_1}(kr_1) \\ &\times \langle \mathbf{p}_4 | C^{L_1}(2) j_{L_1}(kr_2) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | V(\mathbf{r}_3) | \mathbf{p}_2 \rangle \\ &\times \langle \mathbf{p}_2 | \alpha_\nu C^{L_2}(4) j_{L_2}(k'r_4) | \mathbf{p}_3 \rangle \langle \mathbf{p}_3 | \alpha^\nu C^{L_2}(5) j_{L_2}(k'r_5) | \mathbf{p}_4 \rangle \end{aligned} \quad (5.66)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \hat{U}^{B0}(\mathbf{r}_1) &= -\frac{e^4}{(2\pi^2)^2} \int_0^\infty dk \int_0^\infty k'^2 dk' \int d^3\mathbf{p}_1 \int d^3\mathbf{p}_2 \int d^3\mathbf{p}_3 \int d^3\mathbf{p}_4 \\ &\times I_3(E_{p_1}, E_{p_2}, E_{p_3}, E_{p_4}, k') \sum_{L_1, L_2=0}^\infty (2L_1 + 1)(2L_2 + 1) C^{L_1}(1) j_{L_1}(kr_1) \\ &\times \langle \mathbf{p}_4 | C^{L_1}(2) j_{L_1}(kr_2) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \alpha_\nu C^{L_2}(3) j_{L_2}(k'r_3) | \mathbf{p}_2 \rangle \\ &\times \langle \mathbf{p}_2 | V(\mathbf{r}_5) | \mathbf{p}_3 \rangle \langle \mathbf{p}_3 | \alpha^\nu C^{L_2}(4) j_{L_2}(k'r_4) | \mathbf{p}_4 \rangle \end{aligned} \quad (5.67)$$

Dabei wurde mit $|\mathbf{p}\rangle$ wieder wie im Fall der Zwei-Photonen-Selbstenergie die Wellenfunktion eines freien Elektrons bezeichnet. Schließlich sei auch noch die Partialwellenentwicklung der beiden Gegenterme GT1 und GT2 angegeben:

$$\begin{aligned} \hat{U}^{GT1}(\mathbf{r}_1) &= \frac{e^2}{2\pi^2} \Sigma^{(1)} \int_0^\infty dk \sum_{r,t} I_4(E_r, E_t) \sum_{L_1=0}^\infty (2L_1 + 1) C^{L_1}(1) j_{L_1}(kr_1) \\ &\times \langle \varphi_t(\mathbf{r}_2) | C^{L_1}(2) j_{L_1}(kr_2) | \varphi_r(\mathbf{r}_2) \rangle \langle \varphi_r(\mathbf{r}_3) | \gamma_0 | \varphi_t(\mathbf{r}_3) \rangle \end{aligned} \quad (5.68)$$

und

$$\begin{aligned}
 \hat{U}^{\text{GT2}}(\mathbf{r}_1) &= \frac{e^2}{2\pi^2} \Sigma^{(1)} \int_0^\infty dk \int d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 d^3\mathbf{p}_3 \\
 &\times I_5(E_{p_1}, E_{p_2}, E_{p_3}) \sum_{L_1=0}^\infty (2L_1 + 1) C^{L_1}(1) j_{L_1}(kr_1) \langle \mathbf{p}_1 | V(r_5) | \mathbf{p}_2 \rangle \\
 &\times \langle \mathbf{p}_3 | C^{L_1}(2) j_{L_1}(kr_2) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_2 | \gamma_0 | \mathbf{p}_3 \rangle
 \end{aligned} \tag{5.69}$$

Dabei ist zu beachten, daß in den Termen mit freien Elektronenzuständen selbstverständlich über die positiven und negativen Energiezustände zu summieren ist. Die Energieintegrale I_1, I_2, I_3, I_4, I_5 lassen sich analytisch lösen und sind aus Gründen der Übersichtlichkeit im Anhang angegeben. Der Gegenterm $\Sigma^{(1)}$ kann wie im Fall der Zwei-Photonen-Selbstenergie unter Verwendung des Virialtheorems nach Partialwellen L_2 entwickelt werden (s. Abbildung 4.5).

6 Selbstenergie–Vakuumpolarisation

Um klar zu sehen, genügt oft ein Wechsel der Blickrichtung.
Antoine de Saint-Exupéry (1900–1944)

6.1 Einleitung

Das Diagramm der Selbstenergie–Vakuumpolarisation $S(VP)E$ ist in der Abbildung 6.1 dargestellt. Dieses Diagramm ist deshalb von besonderer Bedeutung, da es ebenso wie die Zwei-

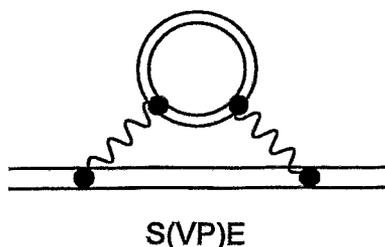


Abbildung 6.1: Das Diagramm der Selbstenergie–Vakuumpolarisation $S(VP)E$.

Photonen–Vakuumpolarisation nur in Uehling–Näherung berechnet und somit der Beitrag dieses Diagramms zur Lamb–Verschiebung bisher für kein einziges Element betrachtet worden ist. Die einzige über die Uehlingnäherung hinausgehende Berechnung wurde für das Wasserstoffatom in [173] von *Pachucki* (1993) durchgeführt, jedoch auch in dieser Berechnung wurde nicht der volle Beitrag $S(VP)E$ ausgewertet. Interessanterweise stellte sich dabei heraus, daß die von *Pachucki* berechnete Korrektur (-5.33 kHz) größer war als der Beitrag der Uehlingnäherung (-3.16 kHz). Für die hochgeladenen Ionen ($Z > 50$) werden etwa 30% Korrektur zur Uehlingnäherung erwartet. Da der Beitrag dieses Diagramms zur Lambverschiebung für Uran ($Z = 92$) in Uehlingnäherung nur -0.13 eV beträgt, scheint für Lambshift–Berechnungen hochgeladener Ionen trotzdem der exakte Beitrag des vollen Diagramms vernachlässigbar gegenüber dem Uehlingbeitrag. In den zukünftigen Experimenten sind jedoch experimentelle Fehlerschranken bis hinunter zu ± 0.1 eV zu erwarten. Das bedeutet, daß dann durchaus der exakte Beitrag dieses Diagramms sogar für hochgeladene Ionen in naher Zukunft relevant wird. Ziel dieses Kapitels ist es, für dieses Diagramm einen renormierten Ausdruck herzuleiten. Es sollte zudem erwähnt werden, daß der in diesem Kapitel hergeleitete renormierte Ausdruck auch gültig ist für die *Delbrück–Streuung* (dies ist die Streuung von Photonen beliebiger Energie durch ein externes elektrisches Feld). Das Diagramm der Delbrück–Streuung ist in Abbildung 6.2 dargestellt. Eine andere wichtige Anwendungsmöglichkeit ist die Aufspaltung zweier Energieniveaus a und b . Solch ein Diagramm ist in der Abbildung 6.3 dargestellt. Allerdings wurde in den Arbeiten [168, 169] für diese Diagramme bereits ein renormierter Ausdruck hergeleitet und dieser dort ebenfalls für

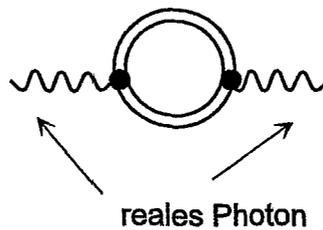
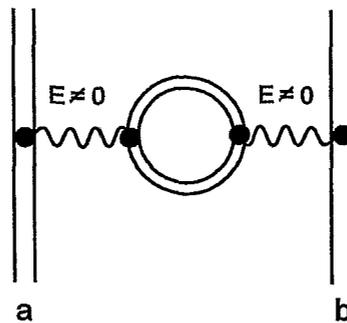


Abbildung 6.2: Das Diagramm der Delbrück-Streuung.

Abbildung 6.3: Die Aufspaltung zweier Energieniveaus a und b eines Atoms durch die Vakuumpolarisation.

den Fall $E \neq 0, E < 1$ auf Eichinvarianz untersucht. Die Methoden der Untersuchung der Eichinvarianz des renormierten Ausdrucks in diesen Arbeiten gründen sich auf die in [93] vorgeschlagene Methode. Dennoch sollte erwähnt werden, daß der in diesen Arbeiten gewählte Zugang zum Beweis der Eichinvarianz leider nicht geeignet und nicht verallgemeinerbar erscheint für das Diagramm der Selbstenergie-Vakuumpolarisation, denn im Diagramm $S(VP)E$ können in die Elektronenschleife *beliebig große Energien* hineinfließen. Gerade durch diese Eigenschaft ist aber eine Wick-Rotation in der komplexen Energieebene nicht möglich, auf welche sich aber die Untersuchungen in den gerade erwähnten Arbeiten stützten. Deshalb war es notwendig, einen etwas anderen Zugang zu wählen, welcher in diesem Kapitel eingehender erläutert wird.

6.2 Renormierung der Selbstenergie–Vakuumpolarisation

6.2.1 Potentialentwicklung

Zunächst ist wieder eine Potentialentwicklung des vollen Elektronenpropagators im Diagramm notwendig, um eine Renormierung durchführen zu können. Der mathematische Ausdruck der Energieverschiebung des Diagramms der Selbstenergie–Vakuumpolarisation ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{S(VP)E} &= e^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{r}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_3}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_4}{(2\pi)^3} \\ &\quad \times \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \alpha_\mu S_F(E_n - E_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \alpha_\beta \varphi_n(\mathbf{r}_2) D^{\mu\nu}(E_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) D^{\alpha\beta}(E_1, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2) \\ &\quad \times \text{Tr} [\alpha_\nu S_F(E_1 + E_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \alpha_\alpha S_F(E_2, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_3)] . \end{aligned} \quad (6.1)$$

Die Potentialentwicklung dieses Diagramms ist in der Abbildung 6.4 dargestellt.

6.2.2 Renormierung

Das Diagramm (A1) muss nicht renormiert werden, denn es ist, unter Verwendung eines effektiven Photonenpropagators, bereits berechnet wurden [101, 112]. Deshalb kann dieses Diagramm vom gesamten Diagramm $S(VP)E$ subtrahiert werden. Somit ergibt sich wie im Fall der Zwei–Photonen–Vakuumpolarisation die Korrektur höherer Ordnung zu

$$\Delta E_n^{S(VP)E \text{ h.o.}} = \Delta E_n^{S(VP)E} - \Delta E_n^{S(VP)E \text{ Uehling}} . \quad (6.2)$$

Diese Gleichung wurde in der Abbildung 6.5 in diagrammatischer Weise dargestellt. Der oberflächliche Divergenzgrad ω sowohl der Unterdiagramme γ als auch des gesamten Diagramms Γ ist im Fall der Graphen (A3), (B2), (C2) und (D) negativ und somit sind diese Diagramme konvergent. Deshalb brauchen nur die Diagramme (A2), (B1) und (C1) renormiert zu werden und sollen Gegenstand der Untersuchungen dieses Abschnitts sein. Die Summe der divergenten Diagramme ist in der Abbildung 6.6 dargestellt. Mit den in der Abbildung 6.6 angegebenen Konventionen folgt der mathematische Ausdruck der Energieverschiebung dieser drei divergenten Diagramme zu:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(A2)+(B1)+(C1)} &= e^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{r}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_3}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_4}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_5}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{r}_6}{(2\pi)^3} \\ &\quad \times \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \alpha_\mu S_F(E_n - E_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \alpha_\beta \varphi_n(\mathbf{r}_2) D^{\mu\nu}(E_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) D^{\alpha\beta}(E_1, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2) \\ &\quad \times \text{Tr} \left[\alpha_\nu S_F^0(E_1 + E_2, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \alpha_\alpha S_F^0(E_2, \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_6) V(\mathbf{r}_6) S_F^0(E_2, \mathbf{r}_6 - \mathbf{r}_5) V(\mathbf{r}_5) S_F^0(E_2, \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_3) \right. \\ &\quad + \alpha_\nu S_F^0(E_1 + E_2, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_6) V(\mathbf{r}_6) S_F^0(E_1 + E_2, \mathbf{r}_6 - \mathbf{r}_4) \alpha_\alpha S_F^0(E_2, \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5) V(\mathbf{r}_5) S_F^0(E_2, \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_3) \\ &\quad \left. + \alpha_\nu S_F^0(E_1 + E_2, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_6) V(\mathbf{r}_6) S_F^0(E_1 + E_2, \mathbf{r}_6 - \mathbf{r}_5) V(\mathbf{r}_5) S_F^0(E_1 + E_2, \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_4) \alpha_\alpha S_F^0(E_2, \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3) \right] . \end{aligned} \quad (6.3)$$

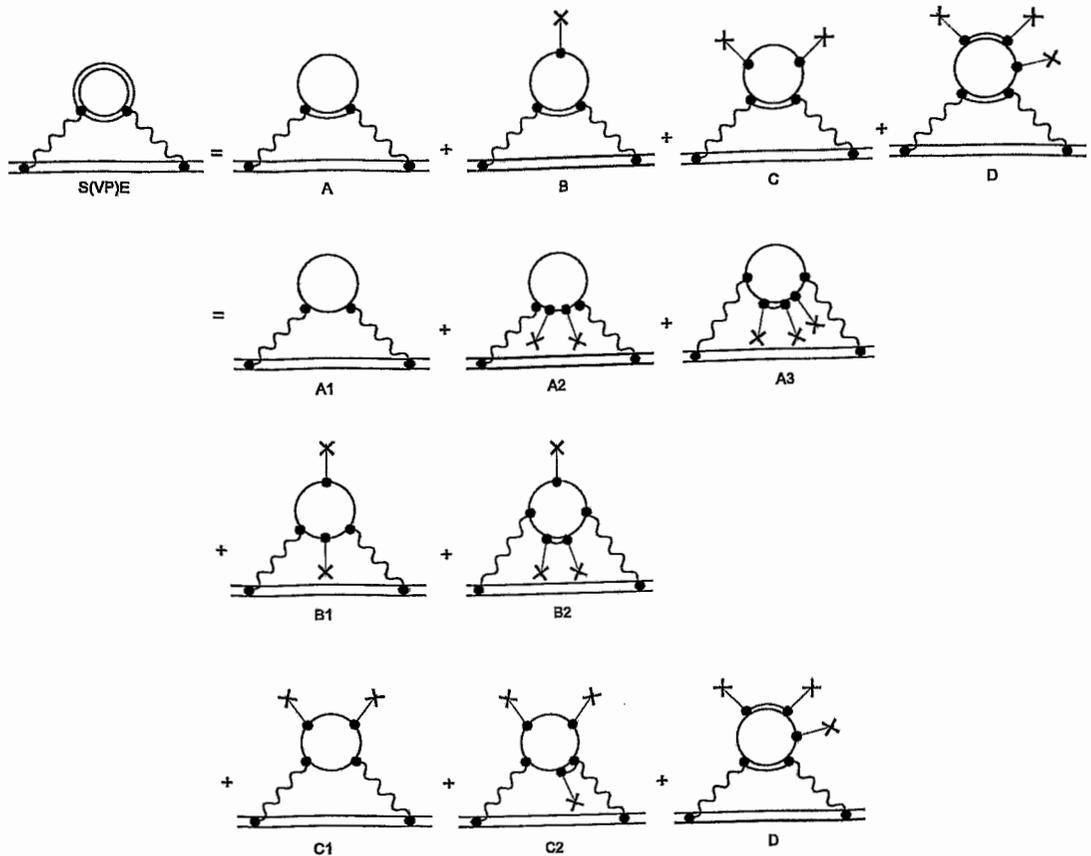


Abbildung 6.4: Die Potentialentwicklung des Diagramms der Selbstenergie-Vakuumpolarisation. Der volle Elektronenpropagator muss solange entwickelt werden, bis alle Diagramme bzw. Unterdiagramme, welche einen vollen Elektronenpropagator enthalten, konvergent sind. Die Diagramme A3, B2 und C2 und D sind konvergent, denn sowohl für ihre Unterdiagramme als auch für das gesamte Diagramm ist der oberflächliche Divergenzgrad negativ. Das Diagramm A1 ist der Uehlinganteil und kann subtrahiert werden, da es bereits berechnet worden ist. Die Diagramme A2, B1 und C1 sind Gegenstand der Renormierung in diesem Kapitel.

$$\Delta E_n^{\text{h.o.}} = \text{Diagramm } S(VP)E - \text{Diagramm } A1$$

Das Diagramm zeigt die Subtraktion des Uehlinganteils $A1$ vom gesamten Diagramm der Selbstenergie-Vakuumpolarisation $S(VP)E$. Die resultierende Gleichung ist $\Delta E_n^{\text{h.o.}} = S(VP)E - A1$.

Abbildung 6.5: Wird der bereits berechnete Uehlinganteil vom gesamten Diagramm der Selbstenergie-Vakuumpolarisation subtrahiert, so stellt dies die Korrektur höherer Ordnung dar.

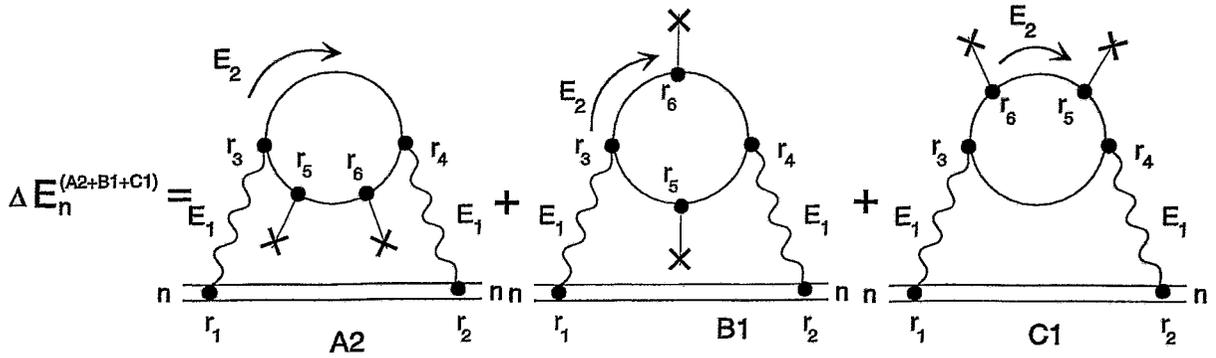


Abbildung 6.6: Die divergenten Diagramme A2, B1 und C1 der Energiekorrektur höherer Ordnung, welche renormiert werden müssen.

Um diese Energieverschiebung renormieren zu können, muss eine Fouriertransformation in den Energie-Impuls-Raum durchgeführt werden. Es ist dabei entscheidend, festzustellen, welche Impulse als äußere Impulse anzusehen sind. Deshalb ist es sehr instruktiv und auch für die weiteren Betrachtungen wesentlich, die genaue Struktur der Energieverschiebung dieser zu renormierenden Diagramme im Energie-Impuls-Raum explizit zu notieren. Der

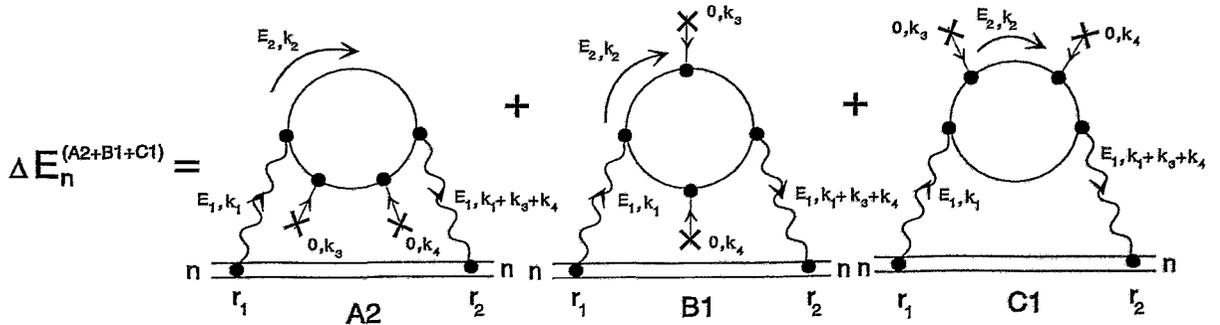


Abbildung 6.7: Die divergenten Diagramme (A2), (B1) und (C1) der Energiekorrektur höherer Ordnung in der Energie-Impulsdarstellung.

Ausdruck der Energieverschiebung der Diagramme A2, B1 und C1 lautet mit den in der Abbildung 6.7 angegebenen Konventionen der Impulse:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_n^{(A2)+(B1)+(C1)} &= e^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k}_3) \int \frac{d^3\mathbf{k}_4}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k}_4) \\
 &\times \frac{1}{E_1^2 - \mathbf{k}_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{E_1^2 - (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)^2 + i\epsilon} \\
 &\times \sum_m \frac{\langle \varphi_n(\mathbf{r}_1) | \alpha^\mu e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1} | \varphi_m(\mathbf{r}_1) \rangle \langle \varphi_m(\mathbf{r}_2) | \alpha^\alpha e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \mathbf{r}_2} | \varphi_n(\mathbf{r}_2) \rangle}{E_n - E_1 - E_m(1 - i\epsilon)} \\
 &\times \hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(E_1, \mathbf{k}_1; E_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4; 0, \mathbf{k}_3; 0, \mathbf{k}_4; m), \quad (6.4)
 \end{aligned}$$

wobei der Operator $\hat{\Pi}$ das eigentlich zu renormierende Feynmandiagramm darstellt und gegeben ist zu

$$\begin{aligned}
\hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(E_1, \mathbf{k}_1; E_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4; 0, \mathbf{k}_3; 0, \mathbf{k}_4; m) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \\
&\times \text{Tr} \left[\gamma_\mu \frac{1}{(E_1 + E_2)\gamma_0 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_\alpha \frac{1}{E_2\gamma_0 - (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \right. \\
&\times \frac{1}{E_2\gamma_0 - (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \\
&+ \gamma_\mu \frac{1}{(E_1 + E_2)\gamma_0 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{(E_1 + E_2)\gamma_0 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_\alpha \\
&\times \frac{1}{E_2\gamma_0 - (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \\
&+ \gamma_\mu \frac{1}{(E_1 + E_2)\gamma_0 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{(E_1 + E_2)\gamma_0 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \\
&\left. \times \frac{1}{(E_1 + E_2)\gamma_0 - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_\alpha \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \right]. \tag{6.5}
\end{aligned}$$

Dieser Operator ist wieder der unrenormierte Vakuumpolarisationstensor 4. Stufe. In dem Abschnitt 5.2 wurde bereits festgehalten, daß dieser Tensor konvergent ist. Jedoch ist er nicht eichinvariant. Genau aus diesem Grund ist eine Renormierung, welche nämlich immer eichinvariante Resultate liefert, trotz dieser Konvergenz des Tensors unerläßlich. Die Renormierung dieses Operators erfolgt nun entsprechend der im Abschnitt 5.2 diskutierten Vorschrift, indem die äußeren Impulse und Energien im Gegenterm auf Null, d.h. auf die Massenschale des Photons gesetzt werden:

$$\begin{aligned}
&\hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}^{\text{ren}}(E_1, \mathbf{k}_1; E_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4; 0, \mathbf{k}_3; 0, \mathbf{k}_4; m) \\
&= \hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(E_1, \mathbf{k}_1; E_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4; 0, \mathbf{k}_3; 0, \mathbf{k}_4; m) - \hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(0, \mathbf{0}; 0, \mathbf{0}; 0, \mathbf{0}; 0, \mathbf{0}; m). \tag{6.6}
\end{aligned}$$

Dieser Ausdruck erfüllt die Relationen (2.183) der Eichinvarianz. Mit der Gleichung (6.6) wurde zudem auch festgelegt, welche Impulse in der Energieverschiebung (6.3) bzw. (6.4) zu Null gesetzt werden und auf welche Art dies zu erfolgen hat. Das bedeutet insbesondere, daß in den anderen Termen der Energieverschiebung selbstverständlich keineswegs die Impulse Null gesetzt werden, sondern nur in dem Ausdruck des Vakuumpolarisationstensor.

6.2.3 Verschwinden der Gegenterme und Eichinvarianz

Da der Vakuumpolarisationstensor und damit die gesamte Energiekorrektur höherer Ordnung konvergent ist, ist eine *Regularisierung nicht erforderlich*. Jedoch würde eine Pauli-Villars-Regularisierung die Eichinvarianz sichern. In einem nicht regularisierten Ausdruck übernimmt diese Aufgabe jedoch der Gegenterm in (6.6), welcher aus genau diesem Grund nicht verschwinden sollte. Umsomehr ist es interessant, festzustellen, daß bei Verwendung

der sphärischen Entwicklung des freien und vollen Elektronenpropagators nach der Quantenzahl κ dieser Gegenterm verschwindet, wenn nur bis zu einem endlichen κ_{\max} summiert wird. Die Eichinvarianz wird davon nicht beeinträchtigt, wie bereits eingehenden im Abschnitt 2.5 dargelegt wurde. Diese Aussage ist deshalb von Belang, da in der numerischen Auswertung solcher Vakuumpolarisations-Diagramme gerade solch eine sphärische Entwicklung, welche zugleich eine Regularisierung darstellt, zumindest bis hinunter zu Kernladungszahlen $Z \geq 20$ tatsächlich in den meisten Zugängen verwendet wird. Dieses Verschwinden des Gegenterms der Selbstenergie-Vakuumpolarisation unter Verwendung der sphärischen Entwicklung der Elektronenpropagatoren soll in diesem Abschnitt dargelegt werden.

Ausgangspunkt ist der Gegenterm aus Gleichung (6.6)

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(0, 0, 0, 0, m) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \\ &\times \text{Tr} \left[\gamma_\mu \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_\alpha \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \right. \\ &\quad \times \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \\ &\quad + \gamma_\mu \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \\ &\quad \times \gamma_\alpha \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \\ &\quad + \gamma_\mu \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \\ &\quad \left. \times \gamma_0 \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \gamma_\alpha \frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} \right]. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Es sei noch einmal festgehalten, daß der Gegenterm einen rein imaginären Ausdruck darstellt, wie im Abschnitt über den Vakuumpolarisationstensor 4. Ranges genauer dargelegt wurde, s.a. [66, 57]. Dieser Tensor wird nun wie folgt umgeformt. Zunächst folgt durch eine Fouriertransformation des freien Elektronenpropagators im Energie-Orts-Raum

$$S_F^0(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{i=1}^4 \frac{\varphi_i(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} \varphi_i^\dagger(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_2}}{E - E_k(1 - i\epsilon)} \quad (6.8)$$

in den Energie-Impuls-Raum für den freien Elektronenpropagator in (6.7) unmittelbar die Darstellung

$$\frac{1}{E_2\gamma_0 - \mathbf{k}_2\boldsymbol{\gamma} - m + i\epsilon} = \sum_{i=1}^4 \frac{\varphi_i(\mathbf{k}_2) \varphi_i^\dagger(\mathbf{k}_2)}{E_2 - E_{k_2,i}(1 - i\epsilon)}, \quad (6.9)$$

mit $k_2 = |\mathbf{k}_2|$. Die Funktionen $\varphi_i(\mathbf{k})$ sind dabei die Lösungen der freien Diracgleichung im Impulsraum, d.h. sie erfüllen die Gleichung

$$(\not{k} - m) \varphi_i(\mathbf{k}) = 0 \quad (6.10)$$

mit der Normierung

$$\varphi_{i_1}^\dagger(\mathbf{k})\varphi_{i_2}(\mathbf{k}) = \delta_{i_1, i_2}. \quad (6.11)$$

Es sei bemerkt, daß diese Normierungsrelation keine Integration oder Summation über die Impulse impliziert, d.h. für beliebige Impulse \mathbf{k} gilt. Die Indizes i unterscheiden die vier linear unabhängigen Lösungen der freien Diracgleichung, d.h. die positiven/negativen Energiezustände und die Spin-auf/Spin-ab-Zustände des Diracteilchens. Einsetzen der Gleichungen (6.9) und (6.11) in den Gegenterm (6.7) führt unmittelbar auf

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(0, 0, 0, 0, m) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \\ &\times \text{Tr} \left[\sum_{i_1, i_2=1}^4 \frac{\partial^2}{\partial E_2^2} \left(\alpha_\mu \frac{\varphi_{i_1}(\mathbf{k}_2)\varphi_{i_1}^\dagger(\mathbf{k}_2)}{E_2 - E_{k_2, i_1}(1 - i\epsilon)} \alpha_\alpha \frac{\varphi_{i_2}(\mathbf{k}_2)\varphi_{i_2}^\dagger(\mathbf{k}_2)}{E_2 - E_{k_2, i_2}(1 - i\epsilon)} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.12)$$

An dieser Stelle soll die sphärische Entwicklung des freien Elektronenpropagators verwendet werden. Jedoch ist die sphärische Entwicklung des Elektronenpropagators im Energie-Orts-Raum wesentlich einfacher als im Energie-Impuls-Raum. Deshalb ist es sehr zweckmäßig, obige Gleichung mit dem freien Elektronenpropagator in die Energie-Orts-Darstellung zu transformieren. Dazu wird in obige Gleichung zunächst eine δ -Funktion eingeschoben:

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(0, 0, 0, 0, m) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int \frac{d^3\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \\ &\text{Tr} \left[\sum_{i_1, i_2=1}^4 \frac{\partial^2}{\partial E_2^2} \left(\alpha_\mu \frac{\varphi_{i_1}(\mathbf{k}_1)\varphi_{i_1}^\dagger(\mathbf{k}_1)}{E_2 - E_{k_1, i_1}(1 - i\epsilon)} \alpha_\alpha \frac{\varphi_{i_2}(\mathbf{k}_2)\varphi_{i_2}^\dagger(\mathbf{k}_2)}{E_2 - E_{k_2, i_2}(1 - i\epsilon)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Wird diese δ -Funktion durch das Integral

$$\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) = \int \frac{d^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \quad (6.14)$$

ausgedrückt und in (6.13) eingesetzt, so folgt unmittelbar die Energie-Ortsdarstellung des Gegenterms zu

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{\mu\alpha 00}(0, 0, 0, 0, m) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int d^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &\times \text{Tr} \left[\frac{\partial^2}{\partial E_2^2} \left(\alpha_\mu S_F^0(E_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \alpha_\alpha S_F^0(E_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right) \right], \end{aligned} \quad (6.15)$$

wobei ebenfalls die Darstellung (6.8) des freien Elektronenpropagators eingesetzt wurde. Die räumlichen Komponenten der Diracmatrizen in (6.15) geben keinen Beitrag. Dies kann unter zweimaliger Verwendung der Identität

$$\alpha_j = \left(\hat{H}_0^{\text{Dirac}} - E \right) r_j - r_j \left(\hat{H}_0^{\text{Dirac}} - E \right), \quad j = 1, 2, 3 \quad (6.16)$$

und der Relation

$$\left(\hat{H}_0^{\text{Dirac}} - E\right) S_F^0(E, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (6.17)$$

bzw. ihrer konjugierten Version gesehen werden. Dabei ist \hat{H}_0^{Dirac} der freie Diracoperator ohne Coulombpotential. Somit folgt nun insgesamt der Ausdruck des Gegenterms mit $\alpha_0 = \mathbb{1}$ zu

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{\mu=0 \alpha=0 00}(0, 0, 0, 0, m) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int d^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \text{Tr} \left[\frac{\partial^2}{\partial E_2^2} \left(S_F^0(E_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) S_F^0(E_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right) \right] \\ &= \frac{1}{6} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \text{Tr} \left[\frac{\partial^3}{\partial E_2^3} \left(S_F^0(E_2, \mathbf{0}) \right) \right] \\ &= \frac{1}{6} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \text{Tr} \left[\frac{\partial^3}{\partial E_2^3} \left(S_F^0(E_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1) \right) \right], \end{aligned} \quad (6.18)$$

wobei im vorletzten Schritt nach Integration über $d^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ wieder die Normierung (6.11) zur Anwendung kam. Der freie Elektronenpropagator im Energie-Impuls-Raum ist wegen der Translationsinvarianz dieses Propagators nur eine Funktion der Energie und der Differenz der Koordinaten zweier Orte. Dies wurde im letzten Schritt berücksichtigt. Es sei ebenso erwähnt, daß der freie Elektronenpropagator $S_F^0(E_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1)$ eine divergente Größe darstellt, was unmittelbar aus der expliziten Form (2.53) folgt. Diese Eigenschaft des Ausdrucks (6.18) impliziert deshalb die Notwendigkeit einer Regularisierung dieses Gegenterms und steht damit in Übereinstimmung mit den im Abschnitt 2.5 getroffenen Aussagen, nachdem der Gegenterm alleine eine unbestimmte Größe darstellt und regularisiert werden muss. Es ist interessant festzustellen, daß exakt derselbe Term in [93] ebenfalls im Zusammenhang mit der Eichinvarianz der Vakuumpolarisation in einer etwas anderen Herleitung unter Verwendung der Pauli-Villars-Regularisierung untersucht wurde. In [93] wurde demonstriert, daß der Gegenterm (6.18) verschwindet, wenn die sphärische Entwicklung des freien Elektronenpropagators, welche ja als eine Regularisierung aufgefasst werden kann, eingesetzt wird und die Summation über die Quantenzahl κ nur bis zu einem endlichen κ_{max} läuft. Diese Aussage soll kurz verifiziert werden.

Wird zunächst die sphärische Entwicklung des freien Elektronenpropagators in (6.18) eingesetzt, die Spur ausgeführt und über die Quantenzahl μ (welche an dieser Stelle nicht mit dem Index μ des Vakuumpolarisationstensor verwechselt werden sollte) summiert, so entsteht

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{\mu=0 \alpha=0 00}(0, 0, 0, 0, m) &= \frac{1}{6} \sum_{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\partial^3}{\partial E_2^3} \\ &\times \left[G_{0,\kappa}^{11} \sum_{\mu} \left(\frac{\kappa + 1/2 - \mu}{2\kappa + 1} \left| Y_{|\kappa+1/2|-1/2, \mu-1/2}(0, 0) \right|^2 + \frac{\kappa + 1/2 + \mu}{2\kappa + 1} \left| Y_{|\kappa+1/2|-1/2, \mu+1/2}(0, 0) \right|^2 \right) \right. \\ &\left. + G_{0,\kappa}^{22} \sum_{\mu} \left(\frac{\kappa - 1/2 + \mu}{2\kappa - 1} \left| Y_{|\kappa-1/2|-1/2, \mu-1/2}(0, 0) \right|^2 + \frac{\kappa - 1/2 - \mu}{2\kappa - 1} \left| Y_{|\kappa-1/2|-1/2, \mu+1/2}(0, 0) \right|^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Unter Verwendung der Relationen

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} (\mu \pm 1/2) |Y_{|\kappa+1/2|-1/2, \mu \pm 1/2}|^2 &= 0, \\ \sum_{\mu} (\mu \pm 1/2) |Y_{|\kappa-1/2|-1/2, \mu \pm 1/2}|^2 &= 0 \end{aligned} \quad (6.20)$$

folgt somit aus (6.19) unmittelbar

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{\mu=0 \alpha=000}(0, 0, 0, 0, m) &= \frac{1}{6} \sum_{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\partial^3}{\partial E_2^3} \\ &\times \left[G_{0,\kappa}^{11} \sum_{\mu} \left(\frac{\kappa}{2\kappa+1} |Y_{|\kappa+1/2|-1/2, \mu-1/2}(0, 0)|^2 + \frac{\kappa}{2\kappa+1} |Y_{|\kappa+1/2|-1/2, \mu+1/2}(0, 0)|^2 \right) \right. \\ &\left. + G_{0,\kappa}^{22} \sum_{\mu} \left(\frac{\kappa}{2\kappa-1} |Y_{|\kappa-1/2|-1/2, \mu-1/2}(0, 0)|^2 + \frac{\kappa}{2\kappa-1} |Y_{|\kappa-1/2|-1/2, \mu+1/2}(0, 0)|^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Einsetzen der Relationen

$$\begin{aligned} \frac{\kappa}{2\kappa+1} \sum_{\mu} |Y_{|\kappa+1/2|-1/2, \mu \pm 1/2}(0, 0)|^2 &= \frac{|\kappa|}{4\pi}, \\ \frac{\kappa}{2\kappa-1} \sum_{\mu} |Y_{|\kappa-1/2|-1/2, \mu \pm 1/2}(0, 0)|^2 &= \frac{|\kappa|}{4\pi} \end{aligned} \quad (6.22)$$

in die Gleichung (6.21) liefert für den Gegenterm in sphärischer Entwicklung

$$\hat{\Pi}_{\mu=0 \alpha=000}(0, 0, 0, 0, m) = \frac{1}{6} \sum_{\kappa} \frac{|\kappa|}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\partial^3}{\partial E_2^3} [G_{0,\kappa}^{11}(E_2, r_1, r_1) + G_{0,\kappa}^{22}(E_2, r_1, r_1)]. \quad (6.23)$$

Jetzt wird das Energieintegral in (6.23) betrachtet. Nach einer Wick-Rotation $E_2 \rightarrow iE_2$ lautet das Energieintegral

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\partial^3}{\partial E_2^3} [G_{0,\kappa}^{11}(E_2) + G_{0,\kappa}^{22}(E_2)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{\partial^3}{\partial E_2^3} \operatorname{Re} \left(i [G_{0,\kappa}^{11}(iE_2) + G_{0,\kappa}^{22}(iE_2)] \right). \end{aligned} \quad (6.24)$$

Dabei wurde berücksichtigt, daß der Gegenterm rein imaginär ist, wie bereits im Abschnitt 2.5 bewiesen wurde. In der Arbeit [93] wurde festgestellt, daß dieses Integral verschwindet. Um dies zu sehen, muss die explizite Form der radialen Komponenten des freien Elektronenpropagators in (6.24) eingesetzt werden. Anwendung des Gauss'schen Satzes liefert

$$\begin{aligned} I &= -\frac{\partial^2}{\partial E_2^2} \left[(iE_2 + 1) \sqrt{1 + E_2^2} j_i(i\sqrt{1 + E_2^2} r_1) h_i^{(1)}(i\sqrt{1 + E_2^2} r_1) \right. \\ &\quad \left. + (iE_2 - 1) \sqrt{1 + E_2^2} j_{\bar{i}}(i\sqrt{1 + E_2^2} r_1) h_{\bar{i}}^{(1)}(i\sqrt{1 + E_2^2} r_1) \right]_{E_2=-\infty}^{E_2=\infty}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Die zweimalige Differentiation ist elementar ausführbar und liefert einen Ausdruck elementarer Funktionen, welcher für *jeden einzelnen Summanden* l im Unendlichen, d.h. an den Integrationsgrenzen verschwindet. Dies wird klar, wenn beachtet wird, daß sich l und \bar{l} immer um 1 unterscheiden und allgemein die Relation

$$j_l(ix)h_l^{(1)}(ix) + j_{l+1}(ix)h_{l+1}^{(1)}(ix) = -\frac{1}{x^2} + O\left(\frac{1}{x^3}\right) \quad (6.26)$$

gilt. Somit verbessert eine Differentiation nach x das asymptotische Verhalten dieses Ausdrucks um eine Ordnung (obwohl dies nicht für einzelne Besselfunktionen $j_l(ix)$, $h_l^{(1)}(ix)$ zutrifft) und der Term verschwindet im Unendlichen. Demnach ist der Realteil (als auch der irrelevante Imaginärteil) obigen Integrals Null. Dieses Resultat bedeutet, daß der Gegenterm unter Verwendung der sphärischen Entwicklung der Elektronenpropagatoren in praktischen Berechnungen immer verschwindet, denn es kann nur bis zu einem endlichen κ_{\max} summiert werden. Aus den vorangegangenen Bemerkungen, insbesondere denen im Abschnitt 2.5 ist ebenfalls klar, daß gleichzeitig die Eichinvarianz erfüllt ist. Diese Aussage stellt eine bemerkenswerte Vereinfachung bei der Berechnung des Diagramms der Selbstenergie–Vakuumpolarisation S(VP)E dar [172]. Zudem ist sie auch als Verallgemeinerung der Untersuchungen zur Eichinvarianz der Arbeiten [93] und [168, 169] anzusehen, da die in diesen Arbeiten diesbezüglichen Untersuchungen der Nichtexistenz eines spuriösen Terms Spezialfälle des Diagramms der Selbstenergie–Vakuumpolarisation darstellen.

6.2.4 Der renormierte Ausdruck und Partialwellenentwicklung

Das Verschwinden des Gegenterms der Energiekorrektur höherer Ordnung hat zur Folge, daß sich der Ausdruck der renormierten Energieverschiebung vereinfacht, d.h. für die Energiekorrektur existieren keine Gegenterme. Werden also die Diagramme in Abbildung 6.4 zusammengefaßt, dann entsteht der in der Abbildung 6.8 dargestellt renormierte Ausdruck der Korrektur höherer Ordnung. Für eine spätere numerische Auswertung sei an dieser Stel-

$$\Delta E_n^{\text{h.o. ren}} = \text{S(VP)E} - \text{A1}$$

Abbildung 6.8: Werden alle Diagramme zusammengefaßt, so folgt der renormierte Ausdruck der Energiekorrektur der Selbstenergie–Vakuumpolarisation in höherer Ordnung. Es ist also nur notwendig, den bekannten Uehling–Beitrag zu subtrahieren. Mit der sphärischen Entwicklung der Elektronenpropagatoren in der Elektronenschleife erfüllt dieser Ausdruck gleichzeitig die Eichinvarianz der Theorie.

le die Partialwellenentwicklung der Selbstenergie–Vakuumpolarisation S(VP)E angegeben. Die unrenormierte Energieverschiebung der Selbstenergie–Vertexkorrektur S(VP)E wurde in Gleichung (6.1) angegeben. Um diesen Ausdruck in eine Partialwellenentwicklung umschreiben zu können, muss wieder die explizite Form des vollen Elektronenpropagators und des

Photonenpropagators eingesetzt werden. Somit folgt zunächst

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{S(VP)E \text{ unren}} &= e^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \int \frac{d^3 \mathbf{r}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{r}_2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{r}_3}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{r}_4}{(2\pi)^3} \\
&\times \int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_1^2 - \mathbf{k}_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{E_1^2 - \mathbf{k}_2^2 + i\epsilon} e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)} e^{i\mathbf{k}_2(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2)} \\
&\times \sum_r \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}_1) \alpha_\mu \varphi_r(\mathbf{r}_1) \varphi_r^\dagger(\mathbf{r}_2) \alpha_\beta \varphi_n(\mathbf{r}_2) \frac{1}{E_n - E_1 - E_r(1 - i\epsilon)} \\
&\times \sum_{s,t} \frac{\text{Tr} [\alpha^\mu \varphi_s(\mathbf{r}_3) \varphi_s^\dagger(\mathbf{r}_4) \alpha^\beta \varphi_t(\mathbf{r}_4) \varphi_t^\dagger(\mathbf{r}_3)]}{[E_1 + E_2 - E_s(1 - i\epsilon)] [E_2 - E_t(1 - i\epsilon)]}. \tag{6.27}
\end{aligned}$$

Nun kann wieder die Winkelintegration im Impulsraum \mathbf{k}_1 ausgeführt werden, d.h.

$$\int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)} = \frac{i}{2\pi^2} \int_0^\infty dk_1 k_1^2 \frac{\sin(k_1 r_{13})}{k_1 r_{13}}, \tag{6.28}$$

und analog erfolgt die Winkelintegration für den Impulsraum \mathbf{k}_2 . Einsetzen der Partialwellenentwicklung und die Ausführung der Spur liefert schließlich die Partialwellenentwicklung der unrenormierten Energieverschiebung

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{S(VP)E \text{ unren}} &= -\frac{e^4}{(2\pi^2)^2} \sum_{L_1=0}^{\infty} \sum_{L_2=0}^{\infty} (2L_1 + 1)(2L_2 + 1) \int_0^\infty dk_1 k_1^2 \int_0^\infty dk_2 k_2^2 \\
&\times \sum_{r,s,t} \sum_{\kappa_s=1}^{\kappa_s^{\max}} \sum_{\kappa_t} I(E_r, E_s, E_t) \\
&\times \langle n | \alpha_\mu \mathbf{C}^{L_1}(1) j_{L_1}(k_1 r_1) | r \rangle \langle r | \alpha_\beta \mathbf{C}^{L_2}(2) j_{L_2}(k_2 r_2) | n \rangle \\
&\times \langle s, \kappa_s | \alpha^\mu \mathbf{C}^{L_1}(3) j_{L_1}(k_1 r_3) | t, \kappa_t \rangle \langle t, \kappa_t | \alpha^\beta \mathbf{C}^{L_2}(4) j_{L_2}(k_2 r_4) | r, \kappa_r \rangle. \tag{6.29}
\end{aligned}$$

Das Energieintegral ist dabei gegeben zu

$$\begin{aligned}
I(E_r, E_s, E_t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \frac{1}{E_1^2 - \mathbf{k}_1^2 + i\epsilon} \frac{1}{E_1^2 - \mathbf{k}_2^2 + i\epsilon} \\
&\times \frac{1}{[E_n - E_1 - E_r(1 - i\epsilon)][E_1 + E_1 - E_s(1 - i\epsilon)][E_2 - E_t(1 - i\epsilon)]}, \tag{6.30}
\end{aligned}$$

und kann analytisch gelöst werden (s. Anhang).

Aus den vorangegangenen Untersuchungen ist klar, daß die Elektronenpropagatoren in der *Elektronenschleife* nach sphärischen Wellen entwickelt werden müssen, um die Eichinvarianz der berechneten Energieverschiebung zu sichern. Dies bedeutet, daß die gebundenen Elektronenzustände s, t in (6.29) in sphärischen Koordinaten (s. Abschnitt über die Lösungen der Diracgleichung in sphärischen Koordinaten) dargestellt werden [126, 141], d.h. von der

Quantenzahl κ_s, κ_t abhängen. Dies wurde noch einmal durch die explizite Darstellung der Quantenzahlen κ_s, κ_t in der Elektronenschleife unterstrichen. Ebenso sei bemerkt, daß diese beiden Quantenzahlen nicht unabhängig voneinander sind, sondern wieder die Dreieckbeziehung

$$\left| |\kappa_s \pm 1/2| - |\kappa_t \pm 1/2| \right| \leq L_1 \leq |\kappa_s \pm 1/2| + |\kappa_t \pm 1/2| - 1 \quad (6.31)$$

erfüllen. Eine entsprechende Relation gilt für die Partialwelle L_2 des zweiten Photons. Somit gibt es nur zwei unabhängige Summationen über L_1 und κ_s . Die Partialwellenentwicklung des Gegenterms ergibt sich aus dem Ausdruck (6.29) durch den Limes $Z \rightarrow 0$, d.h. die Zustände s, t und ihre Energien E_s, E_t müssen durch die freien Elektronenzustände p_1, p_2 und ihre entsprechenden Energien E_{p_1}, E_{p_2} ersetzt werden.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Was endet, beginnt.
Janwillem van de Wetering (geb. 1931)

In dieser Arbeit wurde der Beitrag der Zwei-Photonen-Selbstenergie (SESE) zur Lambverschiebung in hochgeladenen wasserstoffartigen Ionen betrachtet. Die unrenormierte Energieverschiebung des reduziblen Anteils der Zwei-Photonen-Selbstenergie wurden unter Verwendung der Methode der Zwei-Zeiten-Greenfunktion hergeleitet. Um den bekannten renormierten Ausdruck für die SESE-Diagramme zu überprüfen, kam die BPHZ-Renormierung zur Anwendung, welche sich als ein hervorragendes und elegantes Verfahren der Renormierungstheorie erwies. Soweit dem Autor dieser Arbeit bekannt ist, wurde die BPHZ-Renormierung bisher nur für die skalare Φ^3 -bzw. Φ^4 -Theorie verwendet, obwohl sie als ganz allgemeine Renormierungsprozedur prinzipiell für alle Quantenfeldtheorien geeignet ist. Desweiteren wurde die Infrarotkonvergenz des renormierten Ausdrucks der Selbstenergie SESE für den wichtigen Fall des 1s-Grundzustandes in allgemeiner kovarianter Form dargestellt. Obwohl der irreduzible Anteil der Zwei-Photonen-Selbstenergie SESE a) (irred) bereits in der Arbeit [96] (1995) berechnet werden konnte, stellten die verbleibenden Diagramme der SESE, nämlich SESE a red), b) und c) bisher die größte Unsicherheit in den Voraussagen der Energieverschiebung dar. In Ref. [99] (1998) wurde bereits ein numerisches Resultat des Beitrags dieser Diagramme angegeben. Jedoch wurde in jener Arbeit nur ein spezieller Anteil der Diagramme SESE a red), b), c) betrachtet und es ist unklar, ob der berechnete Anteil überhaupt den dominierenden Anteil darstellt. Somit blieb die oben erwähnte Unsicherheit in den Voraussagen der Lambverschiebung bestehen. In der vorliegenden Arbeit wurde erstmalig der Versuch einer vollständigen Berechnung der Zwei-Photonen-Selbstenergie zur Lambverschiebung des 1s-Grundzustandes in den wichtigsten Systemen Uran und Blei unternommen [156, 159]. Die Energieverschiebung der Zwei-Photonen-Selbstenergie wurde mit der Methode der Partialwellen-Renormierung (PWR) berechnet. In dieser Arbeit wurde ausführlich auf die Anwendbarkeit dieser Methode im Falle hochgeladener Systeme eingegangen. Die erzielten numerischen Resultate für die Diagramme SESE a red), b) und c) lauten:

$$\Delta E_{1s}^{\text{SESE a red), b), c)}(Z = 92) = 1.28 \pm 0.15 \text{ eV},$$

$$\Delta E_{1s}^{\text{SESE a red), b), c)}(Z = 82) = 0.73 \pm 0.09 \text{ eV}. \quad (7.1)$$

Diese Ergebnisse sind konsistent mit den Resultaten der *Sign-Approximation* [155]. Jedoch erscheint es sehr wünschenswert, diese Resultate wegen der Komplexität der verwendeten Berechnungsmethoden durch eine unabhängige Berechnung zu bestätigen. Zudem konnten auf Grund des enormen numerischen Rechenaufwandes, welcher bei ca. 30.000 single processor CPU-Stunden lag, nur die ersten vier Partialwellen sowohl für Uran als auch für Blei berücksichtigt werden. Deshalb ist eine Einschließung der nächsten wenigen Partialwellen notwendig. Zum einen kann dabei die Ungenauigkeit weiter reduziert als auch das

Konvergenzverhalten der Partialwellensumme besser kontrolliert werden. Eine nachfolgende Computergeneration sollte dies durchaus ermöglichen.

Schließlich wurden in dieser Arbeit auch renormierte Ausdrücke für die Energiekorrekturen höherer Ordnung der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation VPVP als auch für das Diagramm der Selbstenergie-Vakuumpolarisation S(VP)E mit Hilfe der BPHZ-Methode abgeleitet. Diese Diagramme sind schon deshalb von Bedeutung, da sie bisher nur in Uehling-Näherung berechnet worden sind und somit ihr exakter Beitrag für kein einziges Element bekannt ist. Zudem liefert zumindest das Diagramm der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation einen relevanten Beitrag zur Lambverschiebung in hochgeladenen Ionen. Jedoch wurde in der Arbeit darauf verwiesen, daß auch die Energieverschiebung S(VP)E durchaus nicht vernachlässigt werden sollte. Es erscheint deshalb notwendig, den Beitrag dieser Diagramme ebenfalls zu berechnen. Es konnte in der vorliegenden Arbeit gezeigt werden, daß das Diagramm der Zwei-Photonen-Vakuumpolarisation keine äußere Renormierung erfordert, da sich die entsprechenden Gegenterme gegenseitig wegheben. Da das gegenseitige Wegheben aller Gegenterme der äußeren Renormierung der VPVP in jeder beliebigen Regularisierung galt, wurde gleichzeitig die Eichinvarianz des renormierten Ausdrucks bewahrt. Diese Aussage stellt eine beträchtliche Vereinfachung in einer später zu erfolgenden numerischen Auswertung dar. Eine ebensolche Vereinfachung konnte im Diagramm S(VP)E erzielt werden, da die Gegenterme ebenfalls in jeder Regularisierung verschwinden. Dies konnte explizit mit der sehr wichtigen Methode der sphärischen Entwicklung der Elektronenpropagatoren in der Elektronenschleife demonstriert werden. Somit ist die Eichinvarianz auch im Fall der Energieverschiebung des Diagramms S(VP)E gesichert. Diese Untersuchungen im Fall des Diagramms S(VP)E bedeuten insbesondere, daß ein sogenannter nichteichinvarianter spurioser Term für die gesamte Klasse der Ein-Schleifen-Vakuumpolarisations-Diagramme, in denen Photonen mit beliebiger Energie hineinlaufen, nicht auftritt. Voraussetzung dafür ist die Anwendung der sphärischen Entwicklung des freien und gebundenen Elektronen-Propagators im renormierten Ausdruck, in welchem die Summation über die Quantenzahl κ als letzte Summation bis zu einem endlichen Maximalwert κ_{\max} auszuführen ist. Als renormierter Ausdruck ist dabei die jeweils betrachtete unrenormierte Energieverschiebung zu verstehen, von welcher nur der Uehlingbeitrag subtrahiert wird.

Anhang A Umformung der Energieintegrale der Zwei-Photonen-Selbstenergie

Betrachtet sei das Energieintegral der Selbstenergie der Ordnung α . Es lautet

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{i|E_1|r_{12}}}{E_r(1-i\epsilon) - E_n + E_1} \\
 &= \int_{-\infty}^0 \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{-iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 - i\epsilon \operatorname{sign}(E_r)} + \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 - i\epsilon \operatorname{sign}(E_r)}.
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Es soll nur der Fall $n = 1s_{1/2}$, d.h. der Grundzustand betrachtet werden. Der Kontur der Energieintegration in der komplexen E -Ebene ist durch die $i\epsilon$ -Vorschrift im Nenner des obigen Energieintegrals eindeutig festgelegt. Deshalb konnte die $i\epsilon$ -Vorschrift im Exponenten fallengelassen werden. Dieses Integral kann nun in die zwei Fälle $E_r < 0$ und $E_r > 0$ unterschieden werden, welche nacheinander betrachtet werden sollen:

- 1. Fall: $E_r < 0$

In diesem Fall liegt der Pol in der komplexen Ebene bei $\rightarrow E_{1 \text{ Pol}} = E_n - E_r - i\epsilon$. Das obige Energieintegral wird durch Hinzuaddieren und Subtrahieren umgeschrieben zu

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int_{-\infty}^0 \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{-iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 + i\epsilon} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 + i\epsilon} \\
 &\quad - \int_{-\infty}^0 \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 + i\epsilon} \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{iE_1 r_{12}} - e^{-iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n - E_1 + i\epsilon} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 + i\epsilon}.
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Das zweite Integral wird aufgrund des Exponenten über die obere Halbebene der komplexen E -Ebene geführt. Jedoch befindet sich der Pol in der unteren Halbebene, so daß diese Integral verschwindet. Damit folgt

$$I_1 = 2i \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{E_r - E_n - E_1}, \tag{A.3}$$

wobei die $i\epsilon$ -Vorschrift fallengelassen wurde, da keine Pole auftreten (solange n der Grundzustand ist).

• 2. Fall: $E_r > 0$

In diesem Fall liegt der Pol in der komplexen Ebene bei $\rightarrow E_{1 \text{ Pol}} = E_n - E_r + i\epsilon$. Das obige Energieintegral wird auch in diesem Fall wieder durch Hinzuaddieren und Subtrahieren umgeschrieben zu

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{-iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 - i\epsilon} - \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{-iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 - i\epsilon} \\ &\quad + \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 - i\epsilon} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{-iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n - E_1 - i\epsilon} + \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{e^{iE_1 r_{12}} - e^{-iE_1 r_{12}}}{E_r - E_n + E_1 - i\epsilon}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Das erste Integral wird aufgrund des Exponenten über die untere Halbebene der komplexen E -Ebene geführt. Jedoch befindet sich jetzt der Pol in der oberen Halbebene, so daß dieses Integral verschwindet. Somit folgt

$$I_1 = 2i \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{E_r - E_n + E_1}, \quad (\text{A.5})$$

wobei die $i\epsilon$ -Vorschrift fallengelassen wurde, da abermals keine Pole auftreten (wenn n der Grundzustand ist).

Werden nun beide Fälle zusammengefaßt, so folgt für das betrachtete Integral insgesamt:

$$I_1 = 2i \int_0^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{\sin(E_1 r_{12})}{E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)}. \quad (\text{A.6})$$

Die Energieintegrale im Zwei-Schleifen-Fall können auf das soeben betrachtete Grundintegral durch eine Partialbruchzerlegung reduziert und dann mit denselben Umformungen behandelt werden. Zu bemerken sei noch, daß das Integral I_2 nicht durch eine Partialbruchzerlegung, sondern durch eine Differentiation auf das Grundintegral reduziert werden muss. Es folgen mit dieser Methode die in der Arbeit angegeben umgeformten Integrale. Die zusätzlichen Terme in den Integralen I_3 , I_4 und I_5 lauten:

$$\begin{aligned} S^{\text{in}}(E_1, E_2) &= \left(\frac{E_1}{E_r - E_t} [\text{sign}(E_t) - \text{sign}(E_s)] \frac{E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)}{E_t - E_s - E_2 \text{sign}(E_s)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{E_1}{E_r - E_t} [\text{sign}(E_r) - \text{sign}(E_s)] \frac{E_t - E_n + E_1 \text{sign}(E_t)}{E_r - E_s - E_2 \text{sign}(E_s)} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

bzw.

$$\begin{aligned}
 S^{\text{cr}}(E_1, E_2) = & \left[E_1 \frac{\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_r)}{E_s - E_r + E_2 \text{sign}(E_s)} + E_2 \frac{\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_t)}{E_s - E_t + E_1 [\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_t)]} \right. \\
 & + E_1 E_2 \frac{\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_t)}{E_s - E_t - E_r + E_n} \left(\frac{\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_r)}{E_s - E_r + E_2 \text{sign}(E_s)} + \frac{\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_t) - \text{sign}(E_r)}{E_s - E_t + E_1 (\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_t))} \right) \\
 & \left. + E_1 E_2 \frac{\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_t)}{E_s - E_t - E_r + E_n} \left(\frac{-\text{sign}(E_t) [E_r - E_n + E_1 \text{sign}(E_r)]}{[E_s - E_t + E_1 (\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_t))] [E_t - E_n + E_2 \text{sign}(E_s)]} \right) \right]
 \end{aligned}
 \tag{A.8}$$

und

$$S^{\text{ac}}(E_1) = E_1 \frac{\text{sign}(E_s) - \text{sign}(E_r)}{E_s - E_r}.
 \tag{A.9}$$

Anhang B Energieintegrale der Zwei-Photonen- Vakuumpolarisation

In diesem Anhang seien die Energieintegrale der Zwei-Photonen-Selbstenergie und ihre analytischen Lösungen, welche durch Partialbruchzerlegung des Integranden und anschließende Anwendung des Residuensatzes gelöst werden können, angegeben (dabei gilt wieder $k' \equiv |\mathbf{k}'|$).

$$\begin{aligned}
 I_1(E_r, E_s, E_t, k') &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\
 &\quad \times \frac{1}{E_2^2 - k'^2 + i\epsilon [E_1 - E_r(1 - i\epsilon)][E_1 - E_2 - E_s(1 - i\epsilon)][E_1 - E_t(1 - i\epsilon)]} \\
 &= -\frac{1}{2} \frac{1}{k'} \frac{1}{E_r - E_t} \left((\text{sign}(E_r) - \text{sign}(E_s)) \frac{1}{E_r - E_s - k' \text{sign}(E_s)} \right) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{k'} \frac{1}{E_r - E_t} \left((\text{sign}(E_t) - \text{sign}(E_s)) \frac{1}{E_t - E_s - k' \text{sign}(E_s)} \right). \tag{B.1}
 \end{aligned}$$

Es ist klar, daß dieser Ausdruck keine Pole aufweist. Auch der Fall $k' \rightarrow 0$ ist nicht problematisch (es wird über $dk' k'^2$ integriert.) Diese Eigenschaft der infraroten Konvergenz ist in den anderen Energieintegralen ebenfalls in ähnlicher Weise erfüllt, ohne im folgendem weiter darauf zu verweisen.

$$\begin{aligned}
 I_2(E_{p_1}, E_{p_2}, E_{p_3}, E_{p_4}, k') &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\
 &\quad \times \frac{1}{E_2^2 - k'^2 + i\epsilon [E_1 - E_2 - E_{p_3}(1 - i\epsilon)][\omega - E_{p_1}(1 - i\epsilon)][\omega - E_{p_2}(1 - i\epsilon)][\omega - E_{p_4}(1 - i\epsilon)]} \\
 &= -\frac{1}{2k'} \left(\frac{1}{E_{p_3} - k' \text{sign}(E_{p_3}) - E_{p_1}} \frac{\text{sign}(E_{p_3}) - \text{sign}(E_{p_1})}{(E_{p_1} - E_{p_2})(E_{p_1} - E_{p_4})} \right) \\
 &\quad + \frac{1}{2k'} \left(\frac{1}{E_{p_3} - k' \text{sign}(E_{p_3}) - E_{p_2}} \frac{\text{sign}(E_{p_3}) - \text{sign}(E_{p_2})}{(E_{p_2} - E_{p_4})(E_{p_1} - E_{p_2})} \right) \\
 &\quad - \frac{1}{2k'} \left(\frac{1}{E_{p_3} - k' \text{sign}(E_{p_3}) - E_{p_4}} \frac{\text{sign}(E_{p_3}) - \text{sign}(E_{p_4})}{(E_{p_2} - E_{p_4})(E_{p_1} - E_{p_4})} \right), \tag{B.2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3(E_{p_1}, E_{p_2}, E_{p_3}, E_{p_4}, k') &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi} \\
&\times \frac{1}{E_2^2 - k'^2 + i\epsilon} \frac{1}{[E_1 - E_{p_1}(1 - i\epsilon)][E_1 - E_{p_4}(1 - i\epsilon)]} \\
&\times \frac{1}{[E_1 - E_2 - E_{p_2}(1 - i\epsilon)][E_1 - E_2 - E_{p_3}(1 - i\epsilon)]} \\
&= -\frac{1}{2k'} \frac{1}{E_{p_2} - E_{p_3}} \frac{1}{E_{p_1} - E_{p_4}} \\
&\times \left[\left(\frac{\text{sign}(E_{p_1}) - \text{sign}(E_{p_2})}{E_{p_1} - E_{p_2} - k' \text{sign}(E_{p_2})} - \frac{\text{sign}(E_{p_1}) - \text{sign}(E_{p_3})}{E_{p_1} - E_{p_3} - k' \text{sign}(E_{p_3})} \right) \right. \\
&\left. + \left(\frac{\text{sign}(E_{p_2}) - \text{sign}(E_{p_4})}{E_{p_4} - E_{p_2} - k' \text{sign}(E_{p_2})} - \frac{\text{sign}(E_{p_3}) - \text{sign}(E_{p_4})}{E_{p_4} - E_{p_3} - k' \text{sign}(E_{p_3})} \right) \right], \quad (\text{B.3})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_4(E_r, E_t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \frac{1}{[\omega - E_r(1 - i\epsilon)][\omega - E_t(1 - i\epsilon)]} \\
&= -i \frac{1}{E_r - E_t} [\text{sign}(E_r) - \text{sign}(E_t)], \quad (\text{B.4})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_5(E_{p_1}, E_{p_2}, E_{p_3}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \\
&\times \frac{1}{[E_1 - E_{p_1}(1 - i\epsilon)][E_1 - E_{p_2}(1 - i\epsilon)][E_1 - E_{p_3}(1 - i\epsilon)]} \\
&= -i \frac{1}{E_{p_2} - E_{p_3}} \frac{1}{E_{p_1} - E_{p_2}} (\text{sign}(E_{p_1}) - \text{sign}(E_{p_2})) \\
&\quad + i \frac{1}{E_{p_2} - E_{p_3}} \frac{1}{E_{p_1} - E_{p_3}} (\text{sign}(E_{p_1}) - \text{sign}(E_{p_3})). \quad (\text{B.5})
\end{aligned}$$

Anhang C Energieintegral der Selbstenergie– Vakuumpolarisation

Das Energieintegral der Selbstenergie–Vakuumpolarisation kann ebenfalls analytisch gelöst werden und lautet

$$\begin{aligned}
 I(E_r, E_s, E_t) &= -\frac{\pi}{2k_1} \frac{1}{[E_t - E_s - E_r + E_n]} \frac{1}{k_1^2 - k_2^2} \\
 &\times \left([\text{sign}(E_t) - 1] \frac{1}{[E_n - E_r - \text{sign}(E_r)k_1]} + [\text{sign}(E_t) + 1] \frac{1}{[E_t - E_s - \text{sign}(E_s)k_1]} \right) \\
 &\quad + \frac{\pi}{2k_2} \frac{1}{[E_t - E_s - E_r + E_n]} \frac{1}{k_1^2 - k_2^2} \\
 &\times \left([\text{sign}(E_t) - 1] \frac{1}{[E_n - E_r - \text{sign}(E_r)k_2]} + [\text{sign}(E_t) + 1] \frac{1}{[E_t - E_s - \text{sign}(E_s)k_2]} \right).
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

Diese Integral besitzt keine Pole. Auch der Fall $k_1 \rightarrow k_2$ ist nicht problematisch, denn in diesem Limes würden sich beide Terme gegenseitig so wegheben, daß keine Divergenz entsteht.

Literaturverzeichnis

- [1] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. London A **117**, 610 (1928); A **118**, 341 (1928).
- [2] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. London A **114**, 243 (1927).
- [3] W. Heisenberg, W. Pauli, Z. Physik **56**, 1 (1929).
- [4] E. Fermi, Rev. Mod. Phys. **4**, 87 (1932).
- [5] E. Fermi, Rev. Mod. Phys. **4**, 125 (1932).
- [6] E. A. Uehling, Phys. Rev. **48**, 55 (1935).
- [7] W. E. Lamb, Jr., R. C. Retherford, Phys. Rev. **72**, 241 (1947).
- [8] R. S. Van Dyck, Jr., P. B. Schwinberg, H. G. Dehmelt, Phys. Rev. Lett. **59**, 26 (1987).
- [9] V. W. Hughes, T. Kinoshita, Rev. Mod. Phys. **71**, 133 (1999).
- [10] A.-M. Jeffrey, R. E. Elmquist, L. H. Lee, R. F. Dziuba, IEEE Trans. Inst. Meas. **46**, 264 (1997).
- [11] C. Schwob, L. Jozefowski, B. de Beauvoir, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, F. Biraben, Phys. Rev. Lett. **82**, 4960 (1999).
- [12] K. Pachucki, Hyp. Int. **114**, 55 (1998).
- [13] H. A. Bethe, Phys. Rev. **72**, 339 (1947).
- [14] G. Soff, I. Bedniakow, T. Beier, F. Erler, I. A. Goidenko, U. D. Jentschura, L. N. Labzowsky, A. V. Nefiodov, G. Plunien, R. Schützhold, S. Zschocke, *Effects of QED and beyond from the atomic binding energy*, preprint (2001), Hyp. Int., in press.
- [15] T. Beier, M. Beinker, E. Persson, S. Zschocke, G. Soff, Hyp. Int. **114**, 3 (1998).
- [16] G. Plunien, R. Schützhold, S. Zschocke, G. Soff, *Radiative Corrections in Highly Charged Ions*, International Conference "Trapped Charged Particles And Fundamental Physics", Asilomar, California, August-September 1998.
- [17] D. C. Ionescu, J. Reinhardt, B. Müller, W. Greiner, G. Soff, Phys. Rev. A **38**, 616 (1988).
- [18] G. Plunien, G. Soff, Phys. Rev. A **51**, 1119 (1995); G. Plunien, G. Soff, Phys. Rev. A **53**, 4614 (1996).

- [19] P. H. Mokler, *Hyp. Int.* **114**, 21 (1998).
- [20] A. V. Nefiodov, L. N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Lett. A* **222**, 227 (1996).
- [21] W. H. Furry, *Phys. Rev.* **81**, 115 (1951).
- [22] J. Eichler, W. E. Meyerhof, *Relativistic Atomic Collisions*, (Academic Press, California, 1995).
- [23] *Atomic Molecular and Optical Physics Handbook*, (Editor G.F. Drake, American Institute of Physics, New York, 1995).
- [24] P. J. Mohr, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rep.* **293**, 227 (1998);
G. Plunien, *Strahlungskorrekturen als Test der Quantenelektrodynamik starker Felder*, Habilitationsschrift, Technische Universität Dresden, (1997).
- [25] P. J. Mohr, *Ann. Phys.* **88**, 26 (1974).
- [26] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover, New York, 1965).
- [27] E. H. Wichmann, N. M. Kroll, *Phys. Rev.* **101**, 843 (1956).
- [28] P. J. Mohr, *Ann. Phys.* **88**, 26 (1974).
- [29] J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, (Walter de Gruyter, Berlin, 1981).
- [30] I. M. Gelfand, G. E. Schilow, *Verallgemeinerte Funktionen*, (Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1960).
- [31] W. Greiner, J. Reinhardt, *Feldquantisierung*, (Harry Deutsch, Frankfurt am Main, 1993).
- [32] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Quantenelektrodynamik*, (Akademie-Verlag, Berlin, 1991).
- [33] L. N. Labzowsky, G. L. Klimchitskaya, Yu. Yu. Dmitriev, *Relativistic Effects in the Spectra of Atomic Systems*, (IOP Publishing, Bristol, 1993).
- [34] M. Gell-Mann, F. Low, *Phys. Rev.* **84**, 350 (1951).
- [35] J. Sucher, *Phys. Rev.* **107**, 1448 (1957).
- [36] G. C. Wick, *Phys. Rev.* **80**, 268 (1950).
- [37] F. Dyson, *Phys. Rev.* **82**, 428 (1951).
- [38] S. S. Schweber, *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*, (Row-Peterson, Evanston, 1961).
- [39] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **84**, 123 (1951).
- [40] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **76**, 749 (1949).

-
- [41] J. Goldstone, Proc. Roy. Soc. London **A239**, 267 (1957).
- [42] V. M. Shabaev, *Many-Particle Effects in Atoms*, (edited by U. I. Safranova, AN SSSR, Nauchnyi Sovet po Spektroskopii, Moscow, 1988, p. 15 und 24).
- [43] A. A. Logunov, A.N. Tavkhelidze, Nuovo. Cim. **29**, 380 (1963).
- [44] D. J. Thouless, *The Quantum Mechanics in Many-Body Systems*, (Academic Press, New York, 1961).
- [45] V. M. Shabaev, Phys. Rev. **A 49**, 4489 (1994).
- [46] V. M. Shabaev, I. G. Fokeeva, Phys. Rev. **A 50**, 4521 (1994).
- [47] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistische Quantenfeldtheorie*, (Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1990).
- [48] G. Köpp, F. Krüger, *Einführung in die Quanten-Elektrodynamik*, (B.G. Teubner, Stuttgart, 1997).
- [49] V. A. Yerokhin, V. M. Shabaev, Phys. Rev. **A 60**, 800 (1999).
- [50] J. C. Ward, Phys. Rev. **78**, 182 (1950).
- [51] J. C. Ward, Phys. Rev. **77**, 293 (1950).
- [52] Y. Takahashi, Nuovo Cim. **6**, 371 (1957).
- [53] R. Jackiw, hep-th/9709090, *Evolution of (Ward-)Takahashi Relations and how I used them*.
- [54] W. Pauli, F. Villars, Rev. Mod. Phys. **21**, 434 (1949).
- [55] G. 't Hooft, M. Veltman, Nucl. Phys. **B 44**, 189 (1972).
- [56] J. Rayski, Phys. Rev. **75**, 1961 (1949).
- [57] J. M. Jauch, F. Rohrlich, *The Theory of Photons and Electrons*, (Addison-Wesley, Massachusetts, 1995).
- [58] L. M. Brown, *Renormalization: From Lorentz to Landau (and Beyond)*, (Springer, New York, 1993).
- [59] H. A. Lorentz, *The Theory of Electrons*, (B. G. Teubner, Stuttgart, 1916).
- [60] K. Johnson, M. Baker and R. S. Willey, Phys. Rev. **136**, B1111 (1964);
Th. A. J. Maris, V. E. Herscovitz and G. Jacob, Phys. Rev. Lett. **12**, 313 (1964);
K. Johnson, R. S. Willey, M. Baker, Phys. Rev. **163**, 1699 (1969);
S. L. Adler, Phys. Rev. **D 5**, 3021 (1972); D. Atkinson and D. W. E. Blatt, Nucl. Phys.
B 151, 342 (1979).
- [61] R. P. Feynman, Phys. Rev. **74**, 939 (1948); Phys. Rev. **74**, 1430 (1948).
- [62] J. Schwinger, Phys. Rev. **73**, 416 (1948); Phys. Rev. **75**, 898 (1949).

- [63] S. Tomonaga, *Phys. Rev.* **74**, 224 (1948).
- [64] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **75**, 486 (1949).
- [65] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **75**, 1736 (1949).
- [66] A. I. Achieser, V. B. Berestezki, *Quantum Electrodynamics*, (John Wiley, New York, 1962).
S. Schwinger, *Quantum Electrodynamics*, (Dover Publications, New York, 1958).
R. P. Feynman, *Quantum Electrodynamics*, (W.A. Benjamin, New York, 1962).
- [67] T.-P. Cheng, L.-F. Li, *Gauge theory of elementary particle physics*, (Clarendon Press, Oxford, 1983).
- [68] C. Itzykson, J.-B. Zuber, *Introduction to Quantum Field Theory*, (McGraw-Hill, New York, 1980).
- [69] T. Kugo, *Eichtheorie*, (Springer, Berlin, 1989).
- [70] N. Bohr, L. Rosenfeld, *Phys. Rev.* **78**, 794 (1950).
- [71] N. N. Bogoljubov, O. S. Parasiuk, *Acta Math.* **97**, 227 (1957).
- [72] K. Hepp, *Comm. Math. Phys.* **2**, 301 (1966).
- [73] W. Zimmermann, *Ann. Phys. (N.Y.)* **77**, 536 (1973).
- [74] N. N. Bogoljubov, D. V. Shirkov, *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, (Interscience, New York, 1959).
- [75] S. Weinberg, *Phys. Rev.* **118**, 838 (1960).
- [76] R. Karplus, M. Neumann, *Phys. Rev.* **80**, 380 (1950).
- [77] H. Euler, B. Kockel, *Naturwiss.* **23**, 246 (1935); H. Euler, *Ann. Phys.* **26**, 398 (1936);
- [78] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **75**, 1736 (1949).
- [79] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **72**, 339 (1947).
- [80] A. M. Desiderio, W. R. Johnson, *Phys. Rev. A* **3**, 1287 (1971).
- [81] G. E. Brown, J. S. Langer, G.W. Schaefer, *Proc. Roy. Soc. London A* **251**, 92 (1959).
- [82] P. J. Mohr, *Ann. Phys. (N.Y.)* **88**, 52 (1974).
- [83] P. J. Mohr, *Phys. Rev. A* **46**, 4421 (1992); P. J. Mohr, Y. K. Kim, *Phys. Rev. A* **45**, 2727 (1992).
- [84] S. A. Blundell, N. J. Snyderman, *Phys. Rev. A* **44**, R 1427 (1991).
- [85] P. J. Mohr, G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 158 (1993).
- [86] U. D. Jentschura, P. J. Mohr, G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 53 (1999); hep-ph/0009090.

-
- [87] J. K. Webb, V. V. Flambaum, C. W. Churchill, M. J. Drinkwater, J. D. Barrow, Phys. Rev. Lett. **82**, 884 (1999); V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, J. K. Webb, Phys. Rev. Lett. **82**, 888 (1999).
- [88] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, J. K. Webb, Phys. Rev. A **59**, 230 (1999).
- [89] W. J. Marciano, Phys. Rev. Lett. **52**, 489 (1984).
- [90] E. H. Wichmann, N. M. Kroll, Phys. Rev. **101**, 843 (1956).
- [91] J. Blomqvist, Nucl. Phys. **B 48**, 95 (1972).
- [92] M. Gyulassy, Phys. Rev. Lett. **32**, 1393 (1974); Phys. Rev. Lett. **33**, 921 (1974); Nucl. Phys. **A 244**, 497 (1975).
- [93] G. Soff, P. J. Mohr, Phys. Rev. **38**, 5066 (1988).
- [94] P. Sunnergren, H. Persson, S. Salomonson, S. M. Schneider, I. Lindgren, G. Soff, Phys. Rev. A **58**, 1055 (1998).
- [95] S. A. Blundell, Phys. Rev. A **47**, 1790 (1993).
- [96] A. O. Mitrushenkov, L. N. Labzowsky, I. Lindgren, H. Persson, S. Salomonson, Phys. Lett. A **200**, 51 (1995).
- [97] S. Mallampalli, J. Sapirstein, Phys. Rev. Lett. **80**, 5297 (1998).
- [98] I. A. Goidenko, L. N. Labzowsky, A. V. Nefiodov, G. Plunien, G. Soff, Phys. Rev. Lett. **83**, 2312 (1999).
- [99] S. Mallampalli, J. Sapirstein, Phys. Rev. A **57**, 1548 (1998).
- [100] H. Persson, I. Lindgren, S. Salomonson, P. Sunnergren, Phys. Rev. A **48**, 2772 (1993).
- [101] H. Persson, I. Lindgren, L. N. Labzowsky, G. Plunien, T. Beier, G. Soff, Phys. Rev. A **54**, 2805 (1996).
- [102] T. Beier, G. Plunien, M. Greiner, G. Soff, J. Phys. **B 30**, 2761 (1997).
- [103] G. Källén, A. Sabry, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **29**, 17 (1955).
- [104] R. Barbieri, E. Remiddi, Nuov. Cim. **13** (1973) 99; D. J. Broadhurst, J. Fleischer, O. V. Tarasov, Z. Phys. C **60** (1993) 287.
- [105] T. Beier, G. Soff, Z. Physik **D 8**, 129 (1988).
- [106] L. W. Fullerton, G. A. Rinker, Jr., Phys. Rev. A **13**, 1283 (1976).
- [107] S. M. Schneider, W. Greiner, G. Soff, J. Phys. **B 26**, L529 (1993).
- [108] G. Plunien, T. Beier, G. Soff, H. Persson, Eur. Phys. J. **D 1**, 177 (1998).
- [109] T. Beier, P. Mohr, H. Persson, G. Plunien, M. Greiner, G. Soff, Phys. Lett. A **236**, 329 (1997).

- [110] I. Lindgren, H. Persson, S. Salomonson, V. Karasiev, L. Labzowsky, A. Mitrushenkov, M. Tokman, *J. Phys. B* **26**, L503 (1993).
- [111] H. Persson, I. Lindgren, L. Labzowsky, G. Plunien, T. Beier, G. Soff, *Phys. Rev. A* **54**, 2805 (1996).
- [112] S. Mallampalli, J. Sapirstein, *Phys. Rev. A* **54**, 2714 (1996).
- [113] L. N. Labzowsky, A. O. Mitrushenkov, *Phys. Rev. A* **53**, 3029 (1996); *Phys. Lett. A* **198**, 333 (1995).
- [114] I. Lindgren, H. Persson, S. Salomonson, P. Sunnergren, *Phys. Rev. A* **58**, 1001 (1998).
- [115] T. Kinoshita, *J. Math. Phys.* **3**, 650 (1962); T. D. Lee, M. Nauenberg, *Phys. Rev.* **133**, 1549 (1964).
- [116] F. Bloch, A. Nordsieck, *Phys. Rev.* **52**, 54 (1937).
- [117] D. R. Yennie, S. C. Frautschi, H. Suura, *Ann. Phys.* **13**, 379 (1961);
- [118] G. Grammer, D. R. Yennie, *Phys. Rev. D* **8**, 4332 (1973).
- [119] L. Labzowsky, A. Mitrushenkov, V. Shelyuto, G. Soff, *Phys. Rev. A* **57**, 4038 (1998); *Phys. Lett. A* **240**, 225 (1998).
- [120] H. Persson, I. Lindgren, S. Salomonson, *Phys. Scr.* **T 46**, 125 (1993); I. Lindgren, H. Persson, S. Salomonson, A. Ynnerman, *Phys. Rev. A* **47**, R4555 (1993).
- [121] H. M. Quiney, I. P. Grant, *Phys. Scr.* **T 46**, 132 (1993); *J. Phys. B* **27**, L299 (1994).
- [122] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Tables of Series, Products and Integrals*, (Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 1981).
- [123] H. Persson, I. Lindgren, S. Salomonson, P. Sunnergren, *Phys. Rev. A* **48**, 2772 (1993).
- [124] S. A. Blundell, A. J. Snyderman, *Phys. Rev. A* **44**, R1427 (1991).
- [125] L. N. Labzowsky, I. A. Goidenko, A. V. Nefiodov, *J. Phys. B* **31**, L477 (1998).
- [126] H. Persson, *QED Effects in Highly Charged Ions*, PhD-Thesis, (Chalmers University of Technology, Göteborg, 1993).
- [127] S. M. Schneider, PhD Thesis, *Die Hyperfeinaufspaltung von Einelektronensystemen*, (J.-W.-Goethe-Universität, Frankfurt am Main, 1995).
- [128] V. Fock, *Z. Phys.* **63**, 855 (1930).
- [129] J. H. Epstein, S. T. Epstein, *Am. Journ. Phys.* **30**, 266 (1962).
- [130] V. M. Shabaev, *J. Phys. B* **24**, 4479 (1991).
- [131] L. Labzowsky, I. Goidenko, M. Tokman, P. Pyykkö, *Phys. Rev. A* **59**, 2707 (1999).
- [132] H. Persson, S. Salomonson, P. Sunnergren, *Advan. Quant. Chem.* **30**, 379 (1998).

-
- [133] I. A. Goidenko, G. Plunien, A. V. Nefiodov, S. Zschocke, L. N. Labzowsky, G. Soff, *No Regularisation Correction to the Partial-Wave Renormalization Procedure*, hep-ph/0006220.
- [134] A. V. Manohar, I. W. Stewart, *Phys. Rev. Lett.* **85** 2248 (2000).
- [135] I. Lindgren, J. Morrison, *Atomic Many-Body Theory*, (Springer, Berlin, 1985).
- [136] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*, (World Scientific, Singapore, 1988).
- [137] H. Margenau, G. M. Murphy, *Die Mathematik für Physik und Chemie*, (B.G. Teubner, Leipzig, 1966).
- [138] V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev, T. Beier, G. Plunien, V. M. Shabaev and G. Soff, *Phys. Rev. A* **60**, 3522 (1999).
- [139] H. M. Quiney, I. P. Grant, *Phys. Scr.* **T46**, 132 (1993).
- [140] I. P. Grant, H. M. Quiney, *J. Phys. A* **26**, 7547 (1993).
- [141] P. Sunnergren, *Complete One-Loop QED Calculations for Few-Electron Ions*, PhD-Thesis, (Chalmers University of Technology, Göteborg, 1998).
- [142] G. W. F. Drake, S. P. Goldman, *Phys. Rev. A* **23**, 2093 (1981).
- [143] I. P. Grant, H. M. Quiney, *Adv. At. Mol. Phys.* **23**, 37 (1988).
- [144] W. R. Johnson, S. A. Blundell, J. Sapirstein, *Phys. Rev. A* **37**, 307 (1988).
- [145] S. Salomonson, P. Öster, *Phys. Rev. A* **40**, 5548 (1989).
- [146] C. de Boor, *A Practical Guide to Splines*, Applied Mathematical Sciences, Vol **27**, (Springer, New York, 1978).
- [147] A. Chodos, R. L. Jaffe, K. Johnson, C. B. Thorn, V. W. Weisskopf, *Phys. Rev. D* **9**, 3471 (1974).
- [148] R. K. Bhaduri, *Models of the Nucleon*, (Addison-Wesley, Massachusetts, 1988).
- [149] J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Massachusetts, 1967).
- [150] C. W. A. Fletcher, *Computational Galerkin Methods*, (Springer, New York, 1984).
- [151] I. A. Goidenko, private Mitteilung.
- [152] L. N. Labzowsky, I. A. Goidenko, A. V. Nefiodov, *Journ. Phys.* **B 31**, L477 (1998).
- [153] L. N. Labzowsky, I. A. Goidenko, *J. Phys.* **B 30**, 177 (1997).
- [154] D. Yu Yu, T. A. Fedorova, D. M. Bogdanov, *Phys. Lett. A* **241**, 84 (1998).
- [155] I. Goidenko, L. Labzowsky, A. Nefiodov, G. Plunien, G. Soff, S. Zschocke, *Hyp. Int.* **127**, 293 (2000).

- [156] I. A. Goidenko, L. N. Labzowsky, A. V. Nefiodov, G. Plunien, S. Zschocke, G. Soff, *Second-Order Self energy Calculations for Tightly Bound Electrons in Hydrogenlike Ions*, Proceeding to the satellite meeting *Hydrogen atom II* in Castiglione della Pescaia of the ICAP conference in Florence/Italy, 01.-03. June 2000.
- [157] I. A. Goidenko, L. N. Labzowsky, A. V. Nefiodov, G. Plunien, G. Soff, S. Zschocke, GSI-Jahresbericht 1999, *Completion of QED-calculations for hydrogenlike uranium*.
- [158] G. Soff, T. Beier, I. A. Goidenko, L. N. Labzowsky, A. V. Nefiodov, G. Plunien, S. Zschocke, *Quantum Electrodynamics In Strong Fields*, International Conference "Quantization, Gauge Theory and Strings", Moskau, 05. 06. – 10. 06. 2000, to appear in World Scientific.
- [159] I. Goidenko, L. Labzowsky, A. Nefiodov, G. Plunien, G. Soff, S. Zschocke, *Evaluation of the two-photon self-energy correction for hydrogenlike ions*, preprint (2000), Hyp. Int., in press.
- [160] I. A. Goidenko, L. N. Labzowsky, A. V. Nefiodov, U. D. Jentschura, G. Plunien, S. Zschocke, *Radiative corrections in highly charged ions and tests of QED in strong electric and magnetic fields*, 10th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, California-Berkeley, 30. 06. – 03. 08. 2000, preprint (2000), Phys. Scr., in press.
- [161] V. M. Shabaev, *Theor. Math. Phys.* **63**, 588 (1985); *Sov. J. Nucl. Phys.* **47**, 69 (1988).
- [162] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, V. A. Yerokhin, *Phys. Rev.* **A52**, 1884 (1995); *J. Phys.* **B 28**, 5201 (1995).
- [163] Th. Stöhlker, P. H. Mokler, F. Bosch, R. W. Dunford, O. Klepper, C. Kozhuharov, T. Ludziejewski, F. Franzke, F. Nolden, H. Reich, P. Rymuza, Z. Stachura, M. Steck, P. Swiat, A. Warczak, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3109 (2000).
- [164] P. H. Mokler, Th. Stöhlker, C. Kozhuharov, R. Moshhammer, P. Rymuza, Z. Stachura, A. Warczak, *J. Phys.* **B 28**, 617 (1995).
- [165] E. H. Wichmann, N. M. Kroll, *Phys. Rev.* **101**, 843 (1956).
- [166] M. Gyulassy, *Nucl. Phys.* **A 244**, 497 (1975).
- [167] E. Borie, G. A. Rinker, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 67 (1982).
- [168] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, V. A. Yerokhin, *Phys. Rev.* **A 56**, 3529 (1997).
- [169] A. N. Artemyev, T. Beier, G. Plunien, V. M. Shabaev, G. Soff, V. A. Yerokhin, *Phys. Rev.* **A 60**, 45 (1999).
- [170] W. Greiner, J. Reinhardt, *Theoretische Physik, Bd. 7, Quantenelektrodynamik*, (Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1984).
- [171] B. Schutz, *Geometrical methods of mathematical physics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1990).

- [172] S. Zschocke, G. Plunien, G. Soff, *Renormalization of the two-photon vacuum polarization and the self-energy vacuum polarization for a tightly bound electron*, hep-ph/0107315, submitted to Europ. Phys. Journ. **D**.
- [173] K. Pachucki, Phys. Rev. A **48**, 2609 (1993).

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Gerhard Soff für die Möglichkeit zur Anfertigung dieser Dissertation, für seine ständige Unterstützung im Verlauf der Promotion und für die Herausgabe der interessanten Forschungsthematik bedanken. Seine wissenschaftlichen Kontakte zu anderen Arbeitsgruppen ermöglichten mir die Teilnahme an wissenschaftlichen Konferenzen über Atomphysik, und sie trugen auch wesentlich zu einem regen Gedankenaustausch und zu einer schöpferischen Arbeitsweise am Institut bei. Zudem sei ihm auch gedankt für seine hilfreichen Hinweise beim Korrekturlesen dieser Arbeit.

Mein Dank gilt auch besonders Herrn Dr. Günter Plunien. Ohne seine physikalischen Ideen und seinen drängenden Fragen würde die vorliegende Arbeit nicht in dieser Form zustande gekommen sein. Seine ständige Bereitschaft, über alle grundlegenden Fragen der Physik zu diskutieren und vor allem auch seine zuverlässige, faire und kollegiale Art schafften außerdem eine sehr angenehme Arbeitsatmosphäre in unserer Arbeitsgruppe.

Ebenso sei herzlichst Herrn Prof. Dr. Leonti N. Labzowsky gedankt. Die Mitarbeit in seiner Arbeitsgruppe, aber auch sein Ideenreichtum und seine tiefen physikalischen Kenntnisse erlaubten mir ein besseres Verständniss quantenelektrodynamischer Prozesse. Es war mir eine Ehre mit ihm zusammenarbeiten zu können.

Desweiteren möchte ich mich bei meinen Freunden und Kollegen Dr. Igor A. Goidenko und Dr. Andrei V. Nefiodov bedanken. Mit ihrem aufmunternden Optimismus und vor allem mit ihrer Bereitschaft, in selbstloser Weise Wissen zu vermitteln, verdienen sie meinen tiefen Respekt und Dank.

Ein besonderer Dank gebührt Herrn Prof. Dr. Vladimir M. Shabaev. Ihm verdanke ich unter anderem das Verständniss der Methode der Zwei-Zeiten-Green-Funktion, aber auch seine sympathische Art, komplizierte Zusammenhänge in der Physik darzulegen war sehr angenehm für mich. An dieser Stelle sei auch meinem Freund und Kollegen Dr. Vladimir A. Yerokhin gedankt. In zahlreichen Diskussionen fanden wir die Antworten auf viele Fragen. Herrn Dipl.-Physiker Ralf Schützhold sei für seine ständige Hilfsbereitschaft gedankt. In unzähligen Diskussionen mit ihm gelangte ich zu wichtigen physikalischen Einsichten.

Herrn Prof. Dr. Burkhard Kämpfer danke ich sehr herzlich für seine verständnisvolle Unterstützung während der abschließenden Phase meiner Promotion. Ebenso danke ich Dipl.-Physiker Ilja Bedniakov, Dr. Ulrich Jentschura und Dr. Thomas Beier für nützliche physikalische Diskussionen. Herrn Dr. Thomas Stöhlker sei gedankt für die Beleuchtung einiger experimenteller Hintergründe bei Messungen der Lamb-Verschiebung. Herrn Prof. Dr. Gerhard Diener und Herrn Prof. Dr. Walter John möchte ich ebenfalls meinen Dank aussprechen. Sie standen ständig grundlegenden physikalischen Diskussionen aufgeschlossen gegenüber. Bei Herrn Dr. Jörg Bergmann bedanke ich mich für seine Erläuterungen in LaTeX-, Computer- und Netscape-Fragen. An selber Stelle möchte ich mich bei Herrn Diplom-Physiker Jörg Binder und Herrn Dr. Peter Zahn bedanken, welche mir die Geheimnisse der Erstellung eines DIN A0-Posters erklärten. Denselben Dank verdient auch Herr Dr. Ralf Hetzel in bezug auf Computerfragen.

Nicht zu vergessen seien natürlich auch die drei Sekretärinnen, Frau Gundula Schädlich, Frau Gudrun Latus und Frau Ute Wächtler. Ihr nettes, unkompliziertes und stets freundliches Auftreten trugen zu einem guten Arbeitsklima bei.

Ganz herzlich möchte ich mich bei meinen Eltern bedanken, welche mir immer zur Seite standen. Schließlich sei auch meinen Freundinnen und Freunden gedankt. Ohne sie wäre der Weg schwerer gewesen.

Erklärung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.