

6. Streutheorie

Als Streuprozesse verstehen wir solche, bei denen Teilchen aus einem einkauflenden Kontinuumszustand durch die Wirkung eines Potentials in einen auslaufenden Kontinuumszustand übergehen. Man kann diese Prozesse zur Untersuchung der Eigenschaften von Materie, also Elementarteilchen, Kernen, Atomen, Molekülen oder Festkörpern verwenden. Die relativistische Verallgemeinerung der hier behandelten Streutheorie ist wesentlicher Bestandteil der Quantenfeldtheorie und findet z.B. in der theoretischen Beschreibung der Teilchenphysikalischen Prozesse an Beschleunigerexperimenten oder im Kosmos ihre Anwendung.

6.1 Strahlung als zeitabhängige Störung

Wir zerlegen den Hamiltonoperator in einen kinetischen Term und ein Störpotential

$$H = H_0 + V(\vec{r}) \quad \text{wobei} \quad H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m}.$$

Die Eigenzustände von H_0 können wir durch die Wellenzahl \vec{k} charakterisieren, wobei die Energieniveaus $E_{\vec{k}} = \frac{t_1^2 \vec{k}^2}{2m}$ sind und wir die Eigenvektoren mit $|k\rangle$ bezeichnen.

Das gestraute Teilchen nimmt das Störpotential nur im Zeitraum wahr, in dem es sich in der Nähe des Streuzentrums aufhält. Wir benutzen daher wieder die zeitabhängige Störungstheorie im Wechselwirkungsbild und lassen $V(\vec{r})$ als Störpotential auf. Damit gilt allgemein für die Zeitentwicklung

$$|\alpha; t, t_0\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha; t_0, t_0\rangle$$

wobei $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0)$
 mit $U_I(t_0, t_0) = 1$ und $V_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$

Wir erinnern auch an die formale Lösung

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') U_I(t', t_0)$$

Sind $|i\rangle$ und $|m\rangle$ beide Eigenzustände von H_0 , dann ist die Übergangskoeffizienten gegeben durch

$$\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \sum_m \langle n | V | m \rangle \int_{t_0}^t dt' e^{i \omega_{nm} t'} \langle m | U_I(t', t_0) | i \rangle$$

Daher haben wir einen kompletten Satz von Zuständen zwischen V_I und U_I eingefügt, und es ist $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$. Wir haben hier noch diskrete Eigenzustände zu H_0 angenommen. Da letztlich H_0 der kinetischen Energie im dreidimensionalen Raum entsprechen soll, welche kontinuierliche Eigenzustände hat entspricht dies noch nicht der physikalischen Situation, welche wir betrachten wollen. Daher nehmen wir zunächst an, daß wir innerhalb eines großen Würfels der Kantenlänge L quantisieren. Die Eigenzustände sind dann $|\vec{k}\rangle$ mit

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle &= \int_V d^3x \langle \vec{k}' | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle \\ &= \frac{1}{L^3} \int_V d^3x e^{i (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}} = \delta_{\vec{k}', \vec{k}} \end{aligned}$$

wobei $k_i L = 2\pi n_i$ mit $n_i \in \mathbb{Z}$.

Die Zustände $|n\rangle$ und $|i\rangle$ existieren nur asymptotisch für $t \rightarrow \infty$ bzw. $t_0 \rightarrow -\infty$. Aufgrund dieser Tatsache

ist es nützlich, die T Matrix zu definieren:

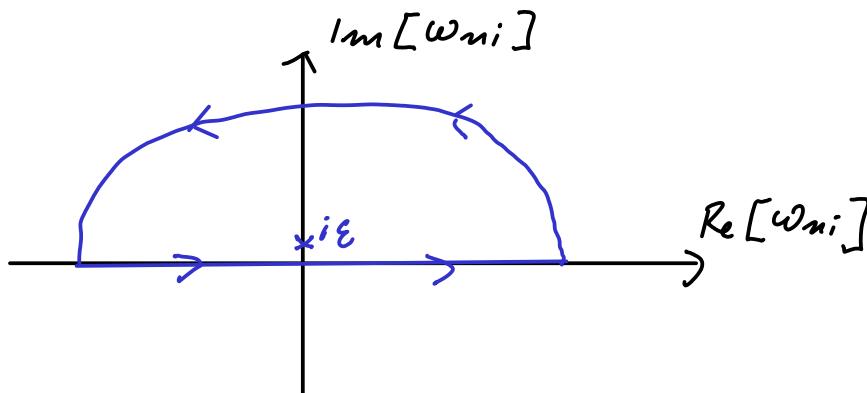
$$\langle u | U_I(t, t_0) | i \rangle = \delta_{ui} - \frac{i}{\hbar} T_{ui} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{ui} t' + \epsilon t'}.$$

Die Grenzwerte sollen dabei folgendermaßen gebildet werden:
Wir wählen $\epsilon > 0$ und $t \ll \frac{1}{\epsilon}$. Dann setzen wir
erst $t_0 \rightarrow -\infty$, dann $\epsilon \rightarrow 0$ und schließlich $t \rightarrow \infty$.
Diese Prozedur definiert die S Matrix

$$\begin{aligned} S_{ui} &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle u | U_I(t, -\infty) | i \rangle \right] \\ &= \delta_{ui} - \frac{i}{\hbar} T_{ui} \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{e^{i\omega_{ui} t + \epsilon t}}{i\omega_{ui} + \epsilon} \right]_{-\infty}^t \\ &= \delta_{ui} - \frac{i}{\hbar} T_{ui} \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{e^{i\omega_{ui} t + \epsilon t}}{i\omega_{ui} + \epsilon} \end{aligned}$$

Wir fassen den letzten Term im Distributionssinn auf,
d.h. wir untersuchen das Verhalten unter einer Integration
über $d\omega_{ui}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_{ui} \frac{e^{i\omega_{ui} t + \epsilon t}}{i\omega_{ui} + \epsilon} f(\omega_{ui}) = 2\pi e^{i(i\epsilon) + \epsilon t} f(i\epsilon) \quad f(i\epsilon) \xrightarrow[\epsilon \rightarrow 0]{} f(0)$$



Die Kontur kann in der oberen komplexen Halbebene geschlossen werden und schließt den Pol mit ein.

Damit ist ($\omega_j = \frac{E_j}{\hbar}$):

$$S_{ni} = \delta_{ni} - \frac{2\pi i}{\hbar} \delta(\omega_{ni}) T_{ni} = \delta_{ni} - 2\pi i \delta(E_n - E_i) T_{ni}$$

Wir haben hier offenbar vorausgesetzt, dass $T_{ni}(\omega_{ni})$ selbst keine Pole auf der reellen Achse in der oberen komplexen Halbebene hat. Dies würde gebundenen Zuständen entsprechen, welche wir zunächst ausschließen wollen.

6.2 Übergangsrate und Wirkungsquerschnitte

Eine wichtige Observable in Streuexperimenten ist die effektive Fläche des Zielteilchens (welche im Allgemeinen von Projektil abhängig ist), die Wirkungsquerschnitt genannt wird. Je nachdem was für ein spezifisches Experiment betrachtet wird, ist auch vom Streuquerschnitt oder Absorptionsquerschnitt die Rede.

Typischerweise haben wir es mit N_T Zielteilchen zu tun, die über eine Fläche A verteilt sind. Anschaulich ist die Streuwahrscheinlichkeit P dann der Anteil von A , welcher von Zielteilchen „bedeckt“ ist.

$$P = \frac{N_T \sigma}{A}$$

Weiterhin verwendet man oft einen Strahl von Projektilen. Nehmen wir an, dieser Strahl enthält N_B Teilchen und der Einfallswinkel halber soll die Fläche des Strahls ebenfalls A sein. Eine Reskalierung kann im offensichtlicher Weise vorgenommen werden. Durchqueren diese Teilchen die Fläche A in der Zeit t , so ergibt sich die Rate

der Streuereignisse

$$R = \frac{N_B N_T \sigma}{A t} = j_B N_T \sigma = \sigma L$$

mit der Strahlstromdichte j_B und der Luminosität L .

Die Luminosität ist eine wichtige Charakteristik des experimentellen Aufbaus. Wenn der Strahl in Pakete mit N_B Teilchen unterteilt ist, wird diese auch definiert als

$$L = \frac{N_B N_T}{A} v,$$

wobei v die Frequenz ist, mit welcher Pakete mit N_B und N_T Teilchen aufeinandertreffen. Dabei spielt es keine Rolle, ob die Teilchen N_T nun im Ruhe sind oder in Bewegung. In Beschleunigerexperimenten ist typischerweise auch die Unterscheidung von „Strahl“ und „Ziel“ hinfällig (z.B. Proton-Proton Kollisionen am LHC).

In vielen Situationen (insbesondere bei elastischen Stößen) ist σ nicht wohldefiniert. Z.B. ist die Reichweite des elektrostatischen Potentials unendlich groß, so dass der Strahl immer gestreut wird, wenn auch um einen beliebig kleinen Winkel um so größer die Entfernung ist, in der dieser die Streuzentren passiert. Wohldefiniert ist dann jedoch die Frage nach der Rate, in der in einem bestimmten Winkelbereich gestreut wird. Daneben enthält die Winkelverteilung der Struktur selbst physikalische Informationen und ist daher von Interesse. Man definiert zu diesem Zweck also den differentialen Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, wobei $d\Omega$ ein Raumwinkel =

element ist. Sei j_B wiederum die Stromdichte des Projektilesstrahls, und $j_s(\Omega) d\Omega$ der Fluss gestreuter Teilchen durchs Winkellement $d\Omega$. Wir definieren also

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_s(\Omega)}{N_T j_B},$$

was konsistent mit unseren ursprünglichen Definitionen ist:

$$R = \int d\Omega j_s(\Omega) = j_B N_T \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = j_B N_T \sigma$$

Als nächstes wollen wir den differentiellen Wirkungsschnitt durch quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten ausdrücken.

Aus der Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{i \rightarrow n} = |\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle|^2$$

folgt die Übergangsrate

$$w_{i \rightarrow n} = \frac{d}{dt} |\langle n | U_I(t; -\infty) | i \rangle|^2.$$

Für $i \neq n$ folgt mit der $\underset{t}{\text{Definition}}$ der T-Matrix:

$$\langle n | U_I(t; -\infty) | i \rangle = -\frac{i}{\hbar} T_{ni} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_n i t' + \epsilon t'} = -\frac{i}{\hbar} T_{ni} \frac{e^{i\omega_n t + \epsilon t}}{i\omega_n + \epsilon}$$

und damit

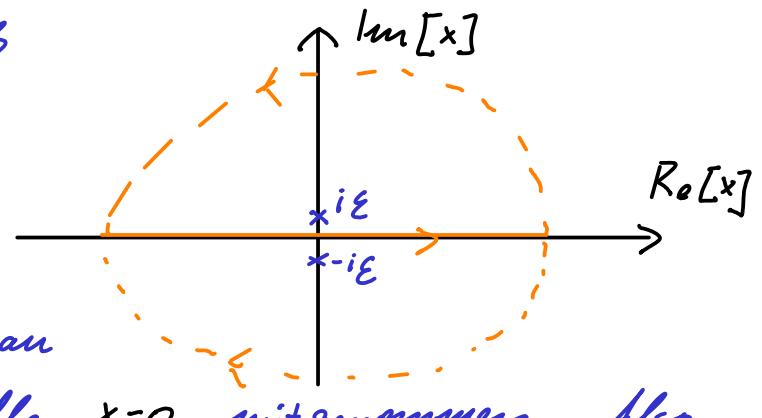
$$w_{i \rightarrow n} = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{\hbar^2} |T_{ni}|^2 \frac{e^{2\epsilon t}}{\omega_n^2 + \epsilon^2} \right] = \frac{1}{\hbar^2} |T_{ni}|^2 \frac{2\epsilon e^{2\epsilon t}}{\omega_n^2 + \epsilon^2}$$

Wir erinnern daran, daß

$$2\pi \delta(x) = \frac{i}{x+i\epsilon} - \frac{i}{x-i\epsilon}$$

Gleichgültig wie wir die Kontur schließen wird genau

das Residuum an der Stelle $x=0$ mitnehmen. Also



$$2\pi \delta(x) = \frac{2\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}$$

und somit

$$\omega_i \rightarrow n = \frac{1}{\hbar^2} |T_{ni}|^2 2\pi \delta(\omega_{ni}) = \frac{1}{\hbar} |T_{ni}|^2 2\pi \delta(E_n - E_i),$$

wobei wir abermals $\epsilon t \ll 1$ benutzt haben (Reihenfolge der Grenzwerte). Wir bemerken, daß diese Rate zeitunabhängig ist (d.h. unabhängig von t) und auch die Ähnlichkeit mit Fermis Goldener Regel.

Nun müssen wir noch über die Zustandsdichte integrieren, und erinnern daran, daß wir im einem Würfel der Kantenlänge L quantisieren. Für die Wellenzahlen $\vec{k} = (k^1, k^2, k^3)$ muß also gelten

$$n^i = \frac{L}{2\pi} k^i, \quad \text{wobei } n^i \in \mathbb{Z}.$$

$$\text{Somit ist } \vec{E}_n = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 |\vec{n}|^2$$

Im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ können wir zu kontinuierlichen \vec{n} übergehen. In sphärischen Koordinaten ist

$$d^3n = n^2 dn d\cos\theta d\varphi = 4\pi n^2 dn \frac{d\Omega}{4\pi} \quad \text{wobei wir schreiben} \\ n = |\vec{n}| \quad \text{und} \quad k = |\vec{k}|$$

Die Zustandsdichte ist damit

$$c(E_n) = \frac{d^3n}{dE} = n^2 dn \frac{m}{\hbar^2} d\Omega \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{ndn} \\ = k \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d\Omega$$

Wir überzeugen uns an dieser Stelle, daß diese korrektweise die Einheit einer inversen Energie hat.

Die über die Zustandsdichte der Endzustände $\langle n |$

gemittelte Übergangsrate ist also

$$\Gamma_{i \rightarrow n} = \int dE \, \ell(E) w_{i \rightarrow n}$$

$$= \int dE \, k \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{1}{\hbar} |T_{ni}|^2 2\pi \delta(E - E_i) d\Omega$$

$$= \frac{mkL^3}{(2\pi)^2 \hbar^3} |T_{ni}|^2 d\Omega \quad \text{mit} \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n$$

Die δ -Funktionsingularität ist nun lediglich, und wir bemerken, dass $\Gamma_{i \rightarrow n} \equiv f_s(\Omega) d\Omega$ gemäß unserer obigen Definitionen ist. Um einen quantenmechanischen Ausdruck für $\frac{d\Gamma}{d\Omega}$ zu erhalten, bleibt noch die Bestimmung von f_s . Die einlaufenden Teilchen fassen wir dazu als einen Strahl mit Geschwindigkeit $v = \frac{\hbar k}{m}$ auf. Ein Teilchen durchquert das Würfel-Volumen damit in der Zeit L/v . Damit ist die Teilchenstromdichte $j_B = \frac{1}{L^2} \frac{1}{\frac{L}{v}} = \frac{v}{L^3} = \frac{\hbar k}{m L^3}$

So ergibt sich:

$$\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \frac{f_s(\Omega)}{N_T j_B} = \frac{1}{N_T} \left(\frac{m L^3}{2\pi \hbar^2} \right)^2 |T_{ni}|^2$$

üblicherweise bezieht man den Wirkungsquerschnitt auf ein einzelnes Zielteilchen, $N_T = 1$.

6.3 Lippmann-Schwinger Gleichung

Wir leiten nun eine iterative, störungstheoretische Methode zur Berechnung der T-Matrix her. Dazu erinnern wir daran, dass aus deren Definition

$$\langle u | U_I(t, t_0) | i \rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} T_{ni} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_n t' + \epsilon t'}$$

folgt, dass

$$\langle n | U_I(t; -\infty) | i \rangle = \delta_{ni} + \frac{1}{\hbar} T_{ni} \frac{e^{i\omega_n t + \epsilon t}}{-\omega_n + i\epsilon}$$

(*)

Diese Definition war motiviert durch die Zerlegung

$$\langle n | U_I(t, -\infty) | i \rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \sum_m V_{nm} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{nm} t' + \epsilon t'} \langle m | U_I(t', -\infty) | i \rangle$$

mit $V_{nm} = \langle n | V | m \rangle$. Wir substituieren im Integranden obigen Ausdruck \circledast und erhalten:

$$\begin{aligned} \langle n | U_I(t, -\infty) | i \rangle &= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} V_{ni} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{ni} t' + \epsilon t'} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{1}{\hbar} \sum_m V_{nm} \int_{-\infty}^t dt' \frac{T_{ni}}{-\omega_{ni} + i\epsilon} e^{i\omega_{ni} t' + i\omega_{nm} t' + \epsilon t'} + \dots \\ &= \delta_{ni} + \frac{1}{\hbar} \frac{V_{ni} e^{i\omega_{ni} t + \epsilon t}}{-\omega_{ni} + i\epsilon} + \frac{1}{\hbar^2} \sum_m V_{nm} \frac{T_{ni}}{-\omega_{ni} + i\epsilon} \frac{1}{-\omega_{ni} + i\epsilon} e^{i\omega_{ni} t + \epsilon t} + \dots \end{aligned}$$

Der Vergleich mit \circledast ergibt:

$$T_{ni} = V_{ni} + \frac{1}{\hbar} \sum_m V_{nm} \frac{T_{ni}}{-\omega_{ni} + i\epsilon} = V_{ni} + \sum_m V_{nm} \frac{T_{ni}}{E_i - E_m + i\epsilon}$$

Für bekannte V_{nm} können wir dieses Gleichungssystem nun im Prinzip nach T auflösen.

An dieser Stelle ist es nützlich, Vektoren $|\psi^{(+)}\rangle$ einzuführen, welche folgende Eigenschaft haben sollen:

$$T_{ni} = \sum_j \langle n | V | j \rangle \langle j | \psi^{(+)} \rangle = \langle n | V | \psi^{(+)} \rangle$$

Wir erhalten damit

$$\langle n | V | \psi^{(+)} \rangle = \langle n | V | i \rangle + \sum_m \langle n | V | m \rangle \frac{\langle m | V | \psi^{(+)} \rangle}{E_i - E_m + i\epsilon}$$

und

$$\begin{aligned} |\psi^{(+)}\rangle &= |i\rangle + \sum_m |m\rangle \frac{\langle m | V | \psi^{(+)} \rangle}{E_i - E_m + i\epsilon} \\ &= |i\rangle + \sum_m \frac{1}{E_i - E_m + i\epsilon} |m\rangle \langle m | V | \psi^{(+)} \rangle \end{aligned}$$

und letztlich die Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V |\psi^{(+)}\rangle$$

Wir merken an, daß das inverse eines Operators A formal durch $\frac{1}{A} A = \mathbb{1}$ definiert ist und daß wir dies hier praktisch durch das Einfügen von Eigenzuständen auswerten können.

Setzen wir die Vektoren $|\psi^{(+)}\rangle$ in die Formel für den differentiellen Wirkungsquerschnitt (mit $N_f=1$) ein, dann ergibt sich:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m L^3}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\langle n | V | \psi^{(+)} \rangle|^2$$

Wir fassen nun T als Operator auf, so daß

$$\langle n | T | i \rangle = T_{ni} \quad \text{und} \quad T | i \rangle = V |\psi^{(+)}\rangle$$

Olige Gleichung für die Matrixelemente schreibt sich dann:

$$T = V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} T$$

Wenn V klein ist, ergibt sich in führender Ordnung:

$$T = V + \mathcal{O}(V^2)$$

Eingesetzt in olige Gleichung erhalten wir zur Ordnung V^2 :

$$T = V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V + \mathcal{O}(V^3)$$

Wiederholtes Einsetzen liefert die höheren Ordnungen:

$$T = V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V + \dots$$

Wir betrachten noch die Situation der Zeitumkehr mit $t_0 > t$ und dem Grenzfall $t_0 \rightarrow \infty$. Dann schreiben wir

$$U_I(t, t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_t^{t_0} dt' V_I(t') U_I(t', t_0)$$

und

$$\langle u | U_I(t, t_0) | i \rangle = \delta_{ui} + \frac{i}{\hbar} T_{ui} \int_t^{t_0} dt' e^{i\omega_n t'' - Et'}$$

wobei wir das Vorzeichen des regulierenden Terms nun so gewählt haben, daß wir den Grenzwert $t_0 \rightarrow \infty$ bilden können. Im Allgemeinen ist der T-Operator nun durch andere Zustände $|\psi^{(\pm)}\rangle$ definiert, welche wiederum die formale Eigenschaft $T|i\rangle = V|\psi^{(\pm)}\rangle$ besitzen.

6.4 Stramplitude

Wir ersetzen nun im der Lippmann-Schwinger Gleichung $t \epsilon \rightarrow \epsilon$. Außerdem betrachten wir elastische Prozesse, für welche die Energie des Anfangs- und des Endzustands $E = E_i$ sei. Für (zeitliche) Vorwärts- und Rückwärtstreue erhalten wir so:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E - H_0 \mp i\epsilon} V |\psi^{(\pm)}\rangle$$

Wir sehen nun, daß $|\psi^{(\pm)}\rangle$ formal eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - E \right] \psi^{(\pm)} = (E - E_i) |i\rangle - V |\psi^{(\pm)}\rangle + V |\psi^{(\pm)}\rangle = 0$$

Wir führen den Übergang in den Ortsraum durch Linksmultiplikation mit $\langle \vec{x}' |$ durch und fügen einen kompletten Satz von Ortseigenzuständen ein, wodurch wir erhalten:

$$\langle \vec{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x}' | i \rangle + \int d^3x' \langle \vec{x}' | \frac{1}{E - H_0 \mp i\epsilon} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle$$

Dies ist eine Integralgleichung für $|\psi^{(\pm)}\rangle$. Für deren Lösung betrachten wir zunächst die Funktion

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \vec{x} \right| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \left| \vec{x}' \right\rangle$$

Die Eigenzustände von H_0 sind gleichzeitig auch Impuls-eigenzustände. Zur Auswertung von G_{\pm} schreiben wir daher:

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{k}''} \left\langle \vec{x} \right| \vec{k}' \rangle \left\langle \vec{k}' \right| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \left| \vec{k}'' \right\rangle \left\langle \vec{k}'' \right| \vec{x}' \rangle$$

Die einzelnen Matrixelemente sind dabei

$$\left\langle \vec{k}' \right| \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \pm i\epsilon} \left| \vec{k}'' \right\rangle = \frac{i \vec{k}' \cdot \vec{k}''}{E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \pm i\epsilon},$$

$$\left\langle \vec{x} \right| \vec{k}' \rangle = \frac{e^{i \vec{k}' \cdot \vec{x}}}{L^{\frac{3}{2}}}, \quad \left\langle \vec{k}'' \right| \vec{x}' \rangle = \frac{-i \vec{k}'' \cdot \vec{x}'}{L^{\frac{3}{2}}}.$$

Weiterhin setzen wir $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, so daß wir erhalten

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}'} \frac{e^{i \vec{k}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{k'^2 - k'^2 \pm i\epsilon}$$

wobei $k' = |\vec{k}'|$ und wobei wir wiederum ϵ reskaliert haben. Wir bilden nun den Grenzwert $L \rightarrow \infty$. Wegen $\vec{k} = 2\pi \frac{\vec{n}}{L}$ ersetzen wir $\sum_{\vec{k}'} \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3 k'$, so daß

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i \vec{k}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{k'^2 - k'^2 \pm i\epsilon} = \int \frac{k'^2 dk'}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta d\vartheta \frac{e^{ik' |\vec{x} - \vec{x}'| \cos\vartheta}}{k'^2 - k'^2 \pm i\epsilon}$$

$$= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k'^2 dk' \int_1^{-1} d\cos\vartheta \frac{e^{ik' |\vec{x} - \vec{x}'| \cos\vartheta}}{k'^2 - k'^2 \pm i\epsilon}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{i|\vec{x} - \vec{x}'|} \int_0^{\infty} k'^2 dk' \frac{e^{ik' |\vec{x} - \vec{x}'|} - e^{-ik' |\vec{x} - \vec{x}'|}}{k'^2 - k'^2 \pm i\epsilon}$$

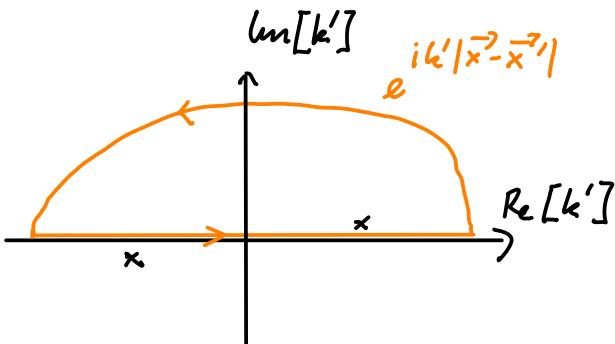
$$= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{i|\vec{x} - \vec{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} k'^2 dk' \frac{e^{ik' |\vec{x} - \vec{x}'|}}{k'^2 - k'^2 \pm i\epsilon}$$

Dieses Integral läßt sich mit Hilfe des Residuensatzes auswerten, indem die Kurve in der oberen Halbebene geschlossen wird. Wir müssen eine Fallunterscheidung nach Lage der Pole vornehmen und erhalten:

$$G_+(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi i^2} \frac{1}{i|\vec{x}-\vec{x}'|} \frac{2\pi i k}{2k} e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

$$k' = \pm \sqrt{k^2 + i\varepsilon} \approx \pm k \mp \frac{i\varepsilon}{2k}$$

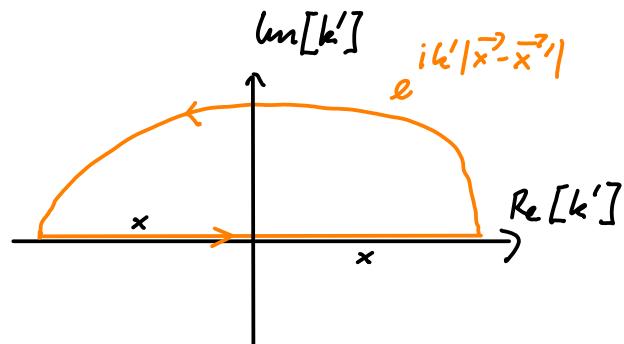
$$k^2 - k'^2 + i\varepsilon \approx -(k' + k + \frac{i\varepsilon}{2k})(k' - k - \frac{i\varepsilon}{2k})$$



$$G_-(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi i^2} \frac{1}{i|\vec{x}-\vec{x}'|} \frac{2\pi i(-k)}{-2k} e^{-ik|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

$$k' = \pm \sqrt{k^2 - i\varepsilon} \approx \pm k \mp \frac{i\varepsilon}{2k}$$

$$k^2 - k'^2 - i\varepsilon \approx -(k' + k - \frac{i\varepsilon}{2k})(k' - k + \frac{i\varepsilon}{2k})$$



Insgesamt ist also

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

Wir merken an, daß $G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}')$ die Eigenschaft einer Green'schen Funktion der freien Schrödinger-Gleichung besitzt:

$$\underbrace{E + \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m}}_{(\bar{E} - H_0)} \underbrace{\langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} | \vec{x}' \rangle}_{G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}')} = \frac{\hbar^2}{2m} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$\Rightarrow \left(\Delta + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) G_{\pm}(\vec{x} - \vec{x}') = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

Wir setzen das erhaltene Resultat in die Integralgleichung für $|\psi^{(\pm)}\rangle$ ein, was ergibt:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x} | i \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{1}{4\pi} \frac{\frac{tik|\vec{x}-\vec{x}''|}{\hbar}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \langle \vec{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle$$

Wir spezialisieren nun auf den Fall eines lokalen Potentials, d.h. wenn V folgende Form besitzt:

$$\langle \vec{x}' | V | \vec{x}'' \rangle = V(\vec{x}') \delta^3(\vec{x}' - \vec{x}'')$$

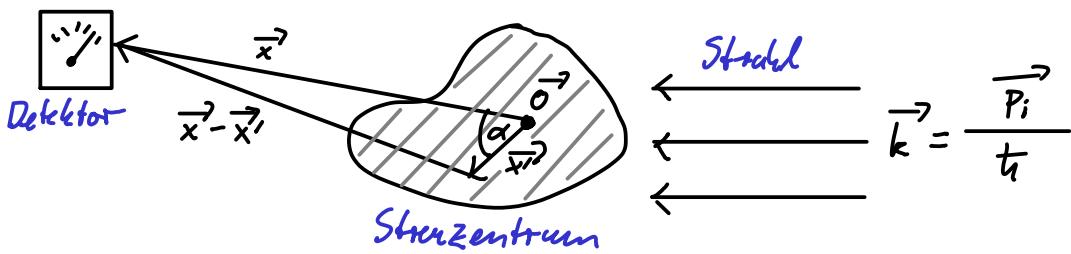
Damit ist

$$\langle \vec{x} | V | \psi^{(\pm)} \rangle = \int d^3x'' \langle \vec{x}' | V | \vec{x}'' \rangle \langle \vec{x}'' | \psi^{(\pm)} \rangle = V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle$$

und es ergibt sich

$$\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x} | i \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{\frac{tik|\vec{x}-\vec{x}''|}{\hbar}}{4\pi |\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle$$

Weiter nehmen wir an, daß die Beobachtung (Ort des Detektors) in großer Entfernung vom Streuzentrum gemacht werden soll, wodurch gegenüber dieser Distanz eine kleine Ausdehnung haben soll (zumindest in einer rechtfertigbaren Näherung).



Wählen wir den Ursprung des Koordinatensystems im Streuzentrum, dann können wir so nähern $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$. Weiterhin schreiben wir $\tau = |\vec{x}|$ und $\tau' = |\vec{x}'|$ und nähern

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = \sqrt{\tau^2 + \tau'^2 - 2\tau\tau' \cos\alpha} \approx \tau - \tau' \cos\alpha = \tau - \vec{x} \cdot \vec{x}'$$

mit $\vec{x} = \frac{\vec{x}'}{|\vec{x}'|}$. Weiterhin soll $|i\rangle = |\vec{k}\rangle$ gelten. Insgesamt erhalten wir

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle \approx \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\tau}}{\tau} \int d^3x' e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle$$

$$= \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \frac{e^{ik+}}{r} f(\vec{k}', \vec{k}'') \right]$$

Diese Gleichung definiert die Streampplitude

$$\begin{aligned} f(\vec{k}', \vec{k}'') &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{t_0^2} L^3 \int d^3x' \frac{e^{-ik'' \vec{x} \cdot \vec{x}'}}{L^{\frac{3}{2}}} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &= -\frac{m L^3}{2\pi t_0^2} \langle \underbrace{\vec{k} \vec{x}}_{=: \vec{k}'} | V | \psi^{(+)} \rangle \end{aligned}$$

Mit dem differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m L^3}{2\pi t_0^2} \right)^2 |\langle \vec{n} | V | \psi^{(+)} \rangle|^2$$

besteht dann folgender wichtiger Zusammenhang:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}, \vec{k}')|^2}$$

6.5 Das optische Theorem

Die Aussage des fundamentalen und in der Praxis bedeutenden optischen Theorems ist

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} [f(\theta=0)] = \frac{k \sigma}{4\pi}$$

Dabei ist $f(\theta=0) \equiv f(\vec{k}, \vec{k}')$ die Amplitude für „Vorwärtsstreuung“ und $\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$ der totale Wirkungsquerschnitt.

Qualitativ lässt sich das optische Theorem wie folgt interpretieren: Aufgrund der Erhaltung der Wahrscheinlichkeitsdichte muss der gestreute Intensität ($\propto \sigma$) ein Beitrag entsprechen, um welchen die einfallende Welle durch destruktive Interferenz abgeschwächt wird. Diese Interferenz ist aber nur in Vorwärtsrichtung möglich – es entsteht ein „Schatten“ hinter dem Streuzentrum. Der quantitative Zusammenhang folgt aus der im nachfolgenden vorgeführten Rechnung.

Zum Beweis gehen wir von der Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\hbar\varepsilon} V |\psi^{(\pm)}\rangle$$

aus, setzen $|i\rangle = |\vec{k}\rangle$, adjungieren die Gleichung und multiplizieren schließlich von rechts mit $V |\psi^{(+)}\rangle$, was ergibt

$$\langle \vec{k} | V |\psi^{(+)}\rangle = \left[\langle \psi^{(+)} | - \langle \psi^{(+)} | V \frac{1}{E - H_0 - i\varepsilon} \right] V |\psi^{(+)}\rangle, E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

In dieser Gleichung interessiert uns nur der Imaginärteil.

Der Imaginärteil der linken Seite ist unmittelbar proportional zum uns interessierenden Ausdruck. Da V hermitesch ist, ist $\text{Im} [\langle \psi^{(+)} | V | \psi^{(+)} \rangle] = 0$.

Für den verbleibenden Term erinnern wir an die oben besprochene sehr nützliche Formel

$$2\pi \delta(x) = \frac{i}{x+i\varepsilon} - \frac{i}{x-i\varepsilon}$$

Andererseits definiert

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} + \frac{1}{x-i\varepsilon} = 2PV \frac{1}{x}$$

den Cauchyschen Principalwert. Eine andere anschauliche Definition ist, wenn $f(x)$ eine Singularität bei $x=b$ hat

$$PV \int_a^c dx f(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_a^{b-\varepsilon} dx f(x) + \int_{b+\varepsilon}^c dx f(x) \right\}$$

Wir können also auch zusammenfassen:

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = PV \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \psi^{(+)} | V \frac{1}{E - H_0 - i\varepsilon} V | \psi^{(+)} \rangle &= \pi \langle \psi^{(+)} | V \delta(E - H_0) V | \psi^{(+)} \rangle \\ &= \pi \langle \vec{k} | T^+ \delta(E - H_0) T | \vec{k} \rangle, \end{aligned}$$

wobei wir $T |\vec{k}\rangle = V |\psi^{(+)}\rangle$ benutzt haben.

Insgesamt erhalten wir so

$$\begin{aligned} \ln [f(\vec{k}, \vec{k}')] &= -\frac{m L^3}{2\pi\hbar^2} \ln [\langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle] \\ &= \frac{m L^3}{2\pi\hbar^2} \pi \langle \vec{k}' | T^+ \delta(E - H_0) T | \vec{k}' \rangle \\ &= \frac{m L^3}{2\pi\hbar^2} \sum_{\vec{k}'} \langle \vec{k}' | T^+ \delta(E - H_0) | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | T | \vec{k}' \rangle \end{aligned}$$

Der Übergang ins Kontinuum wird wieder mit $\sum_{\vec{k}'} \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3 k'$ gebildet, so daß wir erhalten

$$\begin{aligned} \ln [f(\vec{k}, \vec{k}')] &= \frac{m L^3}{2\pi\hbar^2} L^3 \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \underbrace{|\langle \vec{k}' | T | \vec{k}' \rangle|^2}_{\delta(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})} \\ &= \langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m L^3} f(\vec{k}', \vec{k}') \\ &= \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m (2\pi)^3} \int d^3 k' |f(\vec{k}', \vec{k}')|^2 \delta(E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}) \\ &= \frac{\hbar^2}{4\pi m} \frac{m}{\hbar^2 k} k^2 \int d\Omega_{\vec{k}'} \frac{d\sigma}{d\Omega_{\vec{k}'}} = \frac{k}{4\pi} \sigma, \end{aligned}$$

was zu beweisen war.

Wir merken noch an, daß die relativistische Variante des optischen Theorems von zentraler Bedeutung und großer Nützlichkeit im der Quantenfeldtheorie und im Theoretischen Teilchenphysik ist.

6.6 Bornsche Näherung

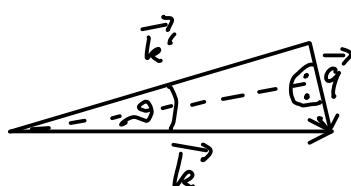
Um zu spezifischen Resultaten zu kommen, steht immer noch aus $f(\vec{k}', \vec{k}')$ und damit $\langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle = \langle \vec{k}' | T | \vec{k}' \rangle$ zu bestimmen. Üblicherweise gibt es für diese keine geschlossenen analytischen Resultate, so daß wir an dieser Stelle Störungstheoretische Näherungen vornehmen. Als dazu geeignet haben wir bereits folgende Reihenentwicklung identifiziert:

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots$$

Brechen wir diese Reihe in der ersten Ordnung ab, dann erhalten wir mit $T=V$ die sogenannte Bornsche Näherung in erster Ordnung. Diese impliziert sofort, dass $|\psi^{(+)}\rangle = |\vec{k}'\rangle$, und somit die Streuamplitude

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} L^{\frac{3}{2}} \int d^3x' e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}'} =_{\vec{k}'=\vec{k}} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \end{aligned}$$

Dabei weist das Superskript (1) auf die Näherung 1. Ordnung hin. In dieser Näherung ist die Streuamplitude also proportional zur Fouriertransformierten des Streupotentials bezüglich $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$. Ein wichtiger Spezialfall ergibt sich für ein sphärisch symmetrisches Potential. Dann ist $f^{(1)}$ eine Funktion, welche allein von $q = |\vec{q}|$ abhängt. Dieser Parameter lässt sich experimentell einfach über den Streuwinkel ϑ bestimmen:



$$|\vec{k}'| = |\vec{k}'| = k$$

$$q = |\vec{k}' - \vec{k}| = \sqrt{2k'^2 - 2k'^2 \cos \vartheta} = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}$$

Wir erhalten so

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vartheta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^1 d\cos\vartheta' e^{iqr \cos\vartheta'} V(r) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r dr \sin(qr) V(r) \end{aligned}$$

Als einfaches Beispiel betrachten wir den Potentialprofil

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{für } r \leq a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases}$$

$$\Rightarrow f^{(1)}(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} V_0 \int_0^a r dr \sin(qr) = -\frac{2m}{\hbar^2 q^2} V_0 \left[\frac{\sin qr}{q} - r \cos qr \right]_0^a$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0 a^3}{(qa)^2} \left[\frac{\sin qa}{qa} - \cos qa \right]$$

Die Nullstellen dieser Funktion befinden sich bei $qa = 4,49; 7,73; 10,9; \dots$. Man kann also deren gemessene Positionen zur Bestimmung des Radius a heranziehen.

In L. Ray et.al., Phys. Rev C 23, 828 wird über die elastische Streuung von Protonen an Calciumisotopen berichtet. In Fig. 1 sind die Minima klar sichtbar. Außerdem treten bei schwereren Isotopen die Minima im geringeren Winkelabständen auf, was sich mit der Erwartung eines größeren Radius a deckt.

Ein weiteres interessantes Beispiel ist das des Yukawa potentials

$$V(r) = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r},$$

wobei V_0 eine Konstante ist und $\frac{1}{\mu}$ der Reichweite dieses Potentials entspricht (exponentielle Unterdrückung). Es folgt für die Streuamplitude

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vartheta) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0}{\mu q} \int_0^\infty dr \sin(qr) e^{-\mu r} \\ &= \frac{2m V_0}{\mu q \hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2} \left[e^{-\mu r} (q \cos qr + \mu \sin qr) \right]_0^\infty = -\frac{2m V_0}{\mu \hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2} \end{aligned}$$

Wir erinnern an den Zusammenhang $q^2 = 2k^2(1 - \cos \vartheta)$, so daß

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2m V_0}{\mu \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[2k^2(1 - \cos \vartheta) + \mu^2]^2}$$

Im Grenzfall $\mu \rightarrow 0$ erhalten wir das Coulombpotential — vorausgesetzt wir halten dabei $\frac{V_0}{\mu} = ZZ' e^2$ fest. Wir erhalten dann

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2m)^2 (ZZ' e^2)^2}{\hbar^4} \frac{1}{16 k^4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} = \frac{1}{16} \left(\frac{ZZ' e^2}{E_{kin}} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}$$

Dabei ist $E_{kin} = \frac{t_0^2 k^2}{2m}$ die kinetische Energie des einlaufenden Teilchens. Alle Faktoren t_0 kürzen sich in dieser Formel, die in der Tat dem Rutherford'schen Streuquerschnitt entspricht, welcher auch in der klassischen Mechanik und Elektrodynamik hergeleitet werden kann.

Wir wollen noch die Systematik und Gültigkeit der Bornschen Näherung genauer untersuchen. Dazu betrachten wir die Integralgleichung für $|\psi^{(+)}\rangle$:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle - \frac{2m}{t_0^2} \int d\vec{x}' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi} \langle \vec{x}' | V | \psi^{(+)} \rangle$$

Die Näherung $T \approx V$ bedeutet wegen $T |\vec{k}\rangle = V |\psi^{(+)}\rangle$, daß $|\psi^{(+)}\rangle \approx |\vec{k}\rangle$. Daher muß der zweite Term auf der rechten Seite sehr viel kleiner sein als der erste. Nehmen wir an, das Potential V habe typische Werte V_0 und eine typische Reichweite a . Wir schreiben $\tau' = |\vec{x} - \vec{x}'|$, schätzen das Integral ab und erhalten somit für die Gültigkeit der Näherung die Bedingung

$$\left| \frac{2m}{t_0^2} \frac{4\pi}{3} a^3 \frac{e^{ik\tau'}}{4\pi a} V_0 \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}}{L^{\frac{3}{2}}} \right| \ll \left| \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}}{L^{\frac{3}{2}}} \right|$$

für kleine Energien ist $ka \ll 1$ und wir können die Exponentialfunktionen durch Faktoren eins ersetzen. Außerdem ignorieren wir konstante Koeffizienten von der Ordnung eins. Dann folgt die Bedingung

$$\frac{m |V_0| a^2}{t_0^2} \ll 1$$

Für den Fall des Yukawa-Potentials ist $a \sim \frac{1}{\mu}$, so daß wir fordern $\frac{m |V_0|}{t_0^2 \mu^2} \ll 1$. Andererseits kann man zeigen, daß gebundene Zustände existieren, sofern $\frac{m |V_0|}{t_0^2 \mu^2} \geq 2,7$ und $V_0 < 0$. Wenn das

Potential stark genug ist, um gebundene Zustände zu bilden, ist also auch die Bornsche Näherung nicht gültig. Für hohe Energien ist $kq \gg 1$ und die Exponentialfaktoren sind stark oszillatorisch. Es läßt sich dann zeigen, daß die Bornsche Näherung zur 1. Ordnung gültig ist, sofern

$$\frac{2m|V_0/a}{\hbar^2 k} \log(kq) \ll 1$$

Die Bornsche Näherung wird also besser bei höheren Energien. Betrachten wir nun T zur zweiten Ordnung im V, d.h.

$$T = V + V \frac{1}{E - H_{\text{tot}}} V$$

und entsprechend schreiben wir

$$f(\vec{k}', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k})$$

Wir erinnern an

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle$$

$\underbrace{\quad}_{\text{so wie}} \quad =: \vec{k}'$

$$T|\vec{k}\rangle = V|\psi^{(+)}\rangle$$

und auch daran, daß die Scramplitude in der ersten Ordnung der Fouriertransformation des Stelpotentials entspricht:

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}')$$

Zur zweiten Ordnung erhalten wir damit:

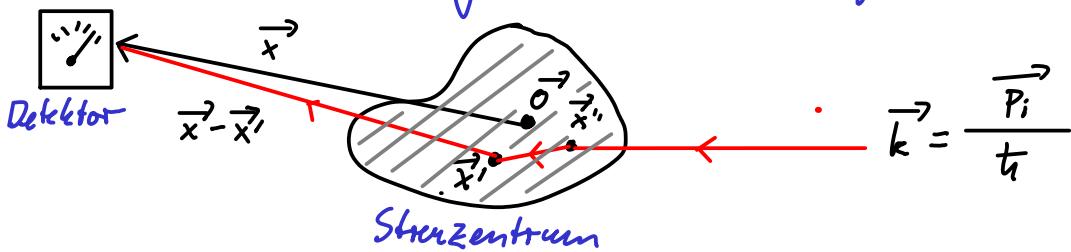
$$f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' \langle \vec{k}' | \vec{x}' \rangle V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \frac{1}{E - H_{\text{tot}} + E} | \vec{x}'' \rangle V(\vec{x}'') \langle \vec{x}'' | \vec{k} \rangle$$

$$= -\frac{m^2}{\pi\hbar^4} \int d^3x' \int d^3x'' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') G_T(\vec{x}', \vec{x}'') V(\vec{x}'') e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}''}$$

Dies kann offensichtlich in höheren Ordnungen fortgesetzt werden.

Die Amplitude $f^{(2)}$ entspricht offenbar einem Teilchen, welches zunächst bei \vec{x}'' wechselwirkt, dann entsprechend der

greenschen Funktion für die freie Schrödingergleichung nach \vec{x}' propagiert und dort abermals wechselwirkt. Schließlich wird die Welle im Richtung $\vec{k}' \parallel \vec{x}'' \approx \vec{x} - \vec{x}'$ gestreut.



6.7 Freie Kugelwellen

Oft ist es von Interesse, die Streuung von Teilchen in Eigenzuständen des Drehimpuls zu betrachten. Wir bestimmen nun daher die Drehimpuseigenzustände für freie Teilchen.

Der freie Hamiltonoperator $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ kommutiert mit \vec{L}^2 und L_z , so daß zu diesen Operatoren simultane Eigenzustände $|E, l, m\rangle$ existieren, welche wir Kugelwellen nennen.

Wir betrachten nun die Funktion $\langle \vec{k}' | E, l, m \rangle$, mittels welcher wir den Basiswechsel von Kugelwellen zu ebenen Wellen vollziehen können. Dabei sollen die Kugelwellenzustände in der üblichen Weise normiert sein:

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(E - E')$$

Es ist nützlich, zunächst einen Zusammenhang zwischen den sphärisch harmonischen Funktionen und Drehungen herzustellen.

Wir suchen einen Operator D mit der Eigenschaft $|\vec{n}\rangle = D(R) |\vec{z}\rangle$

Dabei geht \vec{n} aus \vec{z} durch Drehungen hervor:

$$D(R) = D(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

Wir können hier die erste Drehung um die z -Achse offenbar ignorieren und betrachten daher

$$D(R) = D(\alpha=\varphi, \beta=\vartheta, \gamma=0)$$

Mit der Vollständigkeit des Drehimpulseigenzustände erhalten wir:

$$|\hat{u}\rangle = \sum_l \sum_m D(R) |l, m\rangle \langle l, m | \hat{z} \rangle$$

Die Drehung D kommutiert mit dem Gesamt-drehimpuls \vec{L} .

Bei Linksmultiplikation mit $|l, m\rangle$ ist daher nur ein Term in der l -Summe nicht verschwindend, und wir erhalten:

$$\langle l, m' | \hat{u} \rangle = \sum_m D_{m'm}^{(l)} (\alpha=\varphi, \beta=\vartheta, \gamma=0) \langle l, m | \hat{z} \rangle$$

wobei $D_{m'm'}^{(l)}(R) = \langle l m' | D(R) | l m \rangle$.

Nun ist $\langle l, m | \hat{z} \rangle = Y_l^m (\vartheta=0, \varphi)$ (für $\vartheta=0$ ist Y_l^m unabhängig von φ). Außerdem ist

$$L_z | \hat{z} \rangle = (x p_y - y p_x) | \hat{z} \rangle = 0 \quad \text{und deshalb}$$

$$\langle l, m | L_z | \hat{z} \rangle = \text{tr}_m \langle l, m | \hat{z} \rangle = 0 = \text{tr}_m Y_l^m (\vartheta=0, \varphi).$$

Damit erhalten wir

$$\langle l, m | \hat{z} \rangle = Y_l^m (\vartheta=0, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta) \Big|_{\cos \vartheta = 1} * \delta_{m0} = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \delta_{m0}$$

Setzen wir dies oben ein, so ergibt sich

$$Y_l^{m'*} (\vartheta, \varphi) = \langle l, m' | \hat{u} \rangle = D_{m'0}^{(l)} (\alpha=\varphi, \beta=\vartheta, \gamma=0) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

oder

$$D_{m'0}^{(l)} (\alpha, \beta, \gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m'*} (\vartheta=\beta, \varphi=\alpha)$$

Im Spezialfall $m=0$ ist

$$D_{00}^{(l)} (\beta) = P_l(\cos \vartheta) \Big|_{\vartheta=\beta}$$

Für den Transformationskoeffizienten zwischen eisernen Wellen und Kugelwellen machen wir nun den Ansatz

$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle = g_{\ell E}(|\vec{k}|) Y_l^m (\vec{k}),$$

wobei wir $g_{lE}(\vec{k})$ weiter unten bestimmen werden.

Wir überprüfen nun die Winkelabhängigkeit im obigen Ansatz.

Wir schreien dazu $k = |\vec{k}|$ und stellen fest, daß

$$L_z |k \hat{z}\rangle = (x p_y - y p_x) |k \hat{z}\rangle = 0$$

Damit können wir entwickeln:

$$|k \hat{z}\rangle = \sum_{l'} \int dE' |E', l', m' = 0\rangle \langle E', l', m' = 0 | k \hat{z}\rangle$$

Eine ebene Welle, welche in eine Richtung verschieden von \hat{z} propagiert, ist dann gegeben durch

$$|\vec{k}\rangle = D(\alpha = \varphi, \beta = \vartheta, \gamma = 0) |k \hat{z}\rangle$$

Linksmultiplikation mit $\langle E, l, m |$ ergibt

$$\begin{aligned} \langle E, l, m | \vec{k} \rangle &= \sum_{l'} \int dE' \langle E, l, m | D(\alpha = \varphi, \beta = \vartheta, \gamma = 0) | E', l', m' = 0 \rangle \langle E', l', m' = 0 | k \hat{z} \rangle \\ &= \sum_{l'} \int dE' D_{m0}^{(l')} (\alpha = \varphi, \beta = \vartheta, \gamma = 0) \delta_{ll'} S(E - E') \langle E', l', m' = 0 | k \hat{z} \rangle \\ &= \underbrace{D_{m0}^{(l)} (\alpha = \varphi, \beta = \vartheta, \gamma = 0)}_{=: \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^m(\vartheta, \varphi)} \langle E, l, m = 0 | k \hat{z} \rangle \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^m(\vartheta, \varphi) =: \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} g_{lE}^*(k) \end{aligned}$$

Mit dieser Definition von g_{lE} folgt also obiger Ansatz.

Wir können $g_{lE}(k)$ noch explizit ausarbeiten. Dazu bemerken wir

$$(H_0 - E) |E, l, m\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle \vec{k} | (H_0 - E) = \left(\frac{t_1^2 k^2}{2m} - E \right) \langle \vec{k} |$$

Also muß

$$\left(\frac{t_1^2 k^2}{2m} - E \right) \langle \vec{k} | E, l, m \rangle = 0$$

sein, so daß

$$g_{lE}(k) = N \delta \left(\frac{t_1^2 k^2}{2m} - E \right)$$

ist. Die Normierung N bestimmen wir folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \langle E, l', m' | E, l, m \rangle &= \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} \langle E, l', m' | k'' \rangle \langle k'' | E, l, m \rangle \\ E'' &:= \frac{\hbar^2 k''^2}{2m} \quad = \int \frac{k''^2 dk''}{(2\pi)^3} \int d\Omega_{k''} |N|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) Y_{l'}^{m''*}(k'') Y_l^m(k'') \\ k' &:= \frac{\sqrt{2m E'}}{\hbar} \quad = \int \frac{k''^2}{(2\pi)^3} \frac{dE''}{dk''} |N|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ &= \frac{mk'}{(2\pi)^3 \hbar^2} |N|^2 \delta(E - E') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \stackrel{!}{=} \delta(E - E') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ \Rightarrow N &= \frac{\hbar (2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{mk}} \Rightarrow g_{l'E}(k) = \frac{\hbar (2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \end{aligned}$$

Schließlich also

$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar (2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_l^m(k)$$

Damit können wir eine ebene Welle als Superposition von Kugelwellen entwickeln:

$$\begin{aligned} |\vec{k}\rangle &= \sum_l \sum_m \int dE |E, l, m\rangle \langle E, l, m | \vec{k} \rangle \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |E, l, m\rangle \Big|_{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} * \frac{\hbar (2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{mk}} Y_l^m(k) \end{aligned}$$

Wir merken an, dass die ebene Welle in transversaler Richtung nicht lokalisiert ist. Es ist daher ein konsistentes Resultat, dass in dieser Entwicklung Kugelwellen für alle Werte von l beitragen.

Nun verfügen wir also über Kugelwellen im Impultraum, $\langle \vec{k} | E, l, m \rangle$. Der Wechsel in den Ortsraum kann im Prinzip natürlich mittels einer Fouriertransformation durchgeführt werden. Einfacher ist die direkte Lösung der freien Schrödinger-Gleichung im Ortsraum unter Verwendung der Kugelkoordinaten. Da sphärisch symmetrische Bedingungen vorliegen, ist wie für

das Wasserstoffatom folgender Ansatz gültig:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi)$$

mit $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Wiederum definieren wir $R(r) = \frac{u(r)}{r}$, so dass

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r)$$

Für freie Teilchen ist $V(r)=0$ und wir schreiben die allgemeine Lösung als

$$R(r) = c_1 j_l(l) + c_2 y_l(l) \quad \text{mit } l = kr, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{und}$$

$$j_l(l) = \sqrt{\frac{\pi}{2l}} J_{l+\frac{1}{2}}(l), \quad y_l(l) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2l}} Y_{l+\frac{1}{2}}(l)$$

Da l ganzzahlig ist, gilt auch

$$y_l(l) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2l}} J_{-l-\frac{1}{2}}(l).$$

Die Lösung j_l ist normierbar,

$$\int_0^\infty dl |j_l(l)|^2 = \frac{\pi}{4(l+\frac{1}{2})},$$

während $y_l(l)$ für $l \rightarrow 0$ singulär und nicht integrierbar ist.

Daher ist $\langle \vec{x} | E, l, m \rangle = c_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{r})$. Zur Bestimmung von c_l vergleichen wir

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle &= e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}} = \sum_l \sum_m \int dE \langle \vec{x} | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \vec{k} \rangle \\ &= \sum_l \sum_m \int dE c_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{r}) \frac{\hbar(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{mk}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_l^m(\hat{k}) \\ &= \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{k} \cdot \hat{r}) \frac{\hbar(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{mk}} c_l j_l(kr), \end{aligned}$$

wobei wir das Additionstheorem $P_l(\hat{k} \cdot \hat{r}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k})$

benutzt haben. Außerdem ist

$$\begin{aligned}
 \sum_l (2l+1) i^l \underbrace{j_l(k\tau)}_1 P_l(\vec{k} \cdot \vec{\tau}) &= \sum_l \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 d\cos\vartheta e^{ik\tau \cos\vartheta} P_l(\cos\vartheta) P_l(\vec{k} \cdot \vec{\tau}) \\
 &= \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 d\cos\vartheta e^{ik\tau \cos\vartheta} P_l(\cos\vartheta) \\
 &\stackrel{\uparrow}{=} \int_{-1}^1 d\cos\vartheta e^{ik\tau \cos\vartheta} \delta(\vec{k} \cdot \vec{\tau} - \cos\vartheta) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{\tau}} \\
 \sum_l \frac{2l+1}{2} P_l(z) P_l(z') &= \delta(z-z')
 \end{aligned}$$

Also folgt

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{4\pi\sqrt{mk}} i^{-l} c_l e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \Rightarrow c_l = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}}$$

Zusammengefaßt haben wir also die Koeffizienten

$$\langle \vec{k}' | E, l, m \rangle = \frac{\hbar(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - E\right) Y_l^m(\vec{k}')$$

$$\langle \vec{x} | E, l, m \rangle = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_l(k\tau) Y_l^m(\vec{\tau})$$

Diese Ausdrücke sind von großem Nutzen für die Entwicklung nach Partialwellen. Aus dem bisher Hergeliebtem können wir bereits folgenden Schluss ziehen: Hat ein Ausgangszustand (z.B. ein zerfallendes Teilchen) die Quantenzahlen l, m und geht dieser in einen Zwischenzustand über, so ist die Wellenfunktion dieses Endzustands (als Funktion der Relativkoordinate der zwei Teilchen) proportional zu Y_l^m . Umgekehrt kann man von der Winkelverteilung des Endzustands auf die Drehimpulskonfiguration des Ausgangszustands schließen.

6.8 Entwicklung nach Partialwellen

Wenn wir ein kugelsymmetrisches Streupotential V betrachten, dann ist der Übergangsooperator $T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots$ ebenso kugelsymmetrisch. Wir können also schreiben

$$\langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle = T_l(E) \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Für die Strenamplitude folgt damit

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m L^3}{2\pi \hbar^2} \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$$

$$\text{Würfel: } \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}}}{L^{\frac{3}{2}}}$$

$$\text{Kontinuum: } \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}}$$

$$\xrightarrow{\text{Kontinuum}} -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \sum_{l, m, l', m'} \int dE \int dE' \langle \vec{k}' | E', l', m' \rangle \langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \vec{k} \rangle$$

$$= -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{\hbar^2 (2\pi)^3}{mk} \sum_{l, m} T_l(E) \Big|_{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} Y_l^m(\vec{k}') Y_l^{m*}(\vec{k})$$

$$= -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{l, m} T_l(E) \Big|_{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} Y_l^m(\vec{k}') Y_l^{m*}(\vec{k})$$

Wir wählen nun \vec{k} parallel zur \hat{z} -Richtung und bezeichnen $\vec{k} \cdot \vec{k}' = \cos \vartheta$. Dann ist

$$Y_l^m(\vec{k}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{lm} \quad (\text{siehe Definition von } P_{lm})$$

$$Y_l^0(\vec{k}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta)$$

Wir definieren nun die Partialwellenamplitude $f_l(k) = -\frac{\pi T_l(E)}{k}$,

so daß wir schreiben können:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(k, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \vartheta)$$

Zur Interpretation von f_l erinnern wir daran, daß im groben

Entfernung vom Streuzentrum gilt:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle \approx \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(k, \vec{k}) \right]$$

Außerdem ist für $k\tau = k|\vec{x}| \gg 1$:

$$j_e(k\tau) \xrightarrow{k\tau \gg 1} \frac{e^{i(k\tau - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(k\tau - \frac{l\pi}{2})}}{2ik\tau}$$

Wir benutzen, dass

$$\begin{aligned} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} &= \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\vartheta) i^l (2\pi)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_l(k\tau) \\ &= \sum_l (2l+1) i^l P_l(\cos\vartheta) j_l(k\tau) \\ &\longrightarrow \sum_l (2l+1) P_l(\cos\vartheta) \frac{e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)}}{2ik\tau} \end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle &\longrightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + f(k, \vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \sum_l (2l+1) P_l(\cos\vartheta) \frac{e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)}}{2ik\tau} + \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos\vartheta)}{2ik} \left[(1 + 2ik f_l(k)) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr - l\pi)}}{r} \right] \end{aligned}$$

In Abwesenheit eines Streuzentrums zerfällt die ebene Welle also in eine einlaufende Welle $\sim \frac{e^{-i(kr - l\pi)}}{r}$ und eine auslaufende Welle $\sim \frac{e^{ikr}}{r}$. Das Streuzentrum ändert den Koeffizienten der auslaufenden Welle gemäß $1 \longrightarrow 1 + 2ik f_l(k)$.

6.9 Unitarität und Stoßphasen

Wir betrachten nun die Konsequenzen aus der Erhaltung

von Wahrscheinlichkeiten, was oft auch als Unität bezeichnet wird. Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{x} zu messen, ist $C(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2$, wobei $\psi(\vec{x}, t)$ die Wellenfunktion bezeichnet. Dann ist

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} C(\vec{x}, t) &= \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} = \frac{1}{-i\hbar} (\hat{H} \psi^*) \psi + \frac{1}{i\hbar} \psi^* (\hat{H} \psi) \\ &= \frac{\hbar}{2m_i} [(\vec{\nabla}^2 \psi^*) \psi - \psi^* (\vec{\nabla}^2 \psi)]\end{aligned}$$

Wenn wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2m_i} [\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi]$$

definieren, dann erhalten wir die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$$

Da unsere Lösungen stationär sind, ist $\frac{\partial}{\partial t} C(\vec{x}, t) = 0$. Also muß für beliebige geschlossene Flächen S gelten:

$$\int_S dS \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0$$

Insbesondere gilt dies auch für das Struzentrum umschließende Flächen, so daß der Koeffizient der einlaufenden Welle $\frac{e^{-ikr}}{r}$ gleich dem Koeffizienten von $\frac{e^{ikr}}{r}$, der auslaufenden Welle, sein muß. Wegen der Drehimpulserhaltung muß dies darüberhinaus für jede Partielle separate gelten. Definieren wir $S_e(k) = 1 + 2ik f_e(k)$, muß also $|S_e(k)| = 1$ sein. Dies ist die Unitätsbedingung für das S -Matrixelement der l -ten Partielle.

Wir bemerken also, daß die einzige durch Streuung hervorgerufene Änderung der Wellenfunktion bei großen Abständen vom Struzentrum eine Phasenverschiebung der auslaufenden Partielle ist. Wir nennen diese Phase $2\delta_l$,

so dass $S_\ell = e^{2i\delta_\ell}$. Dabei ist δ_ℓ eine Funktion von k , wobei wir dieses Argument in unserer Notation unterdrücken. Für die Partialwellenamplituden ergibt sich damit

$$f_\ell(k) = \frac{S_\ell(k)-1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_\ell}-1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} = \frac{\sin \delta_\ell}{k \cos \delta_\ell - ik \sin \delta_\ell} = \frac{1}{k \cot \delta_\ell - ik}$$

und für die Streuamplitude

$$f(k, \vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell(k) P_\ell(\cos \vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \vartheta)$$

Der totale Streuquerschnitt ergibt sich damit als

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega |f(k, \vartheta)|^2 = \frac{1}{k^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\cos \vartheta \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\ell'=0}^{\infty} (2\ell+1)(2\ell'+1) e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})} \sin \delta_\ell \sin \delta_{\ell'} P_\ell P_{\ell'} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell, \end{aligned}$$

wobei wir die Orthonormalitätsrelation für Legendre-Polynome

$$\int_{-1}^1 d\cos \vartheta P_\ell(\cos \vartheta) P_{\ell'}(\cos \vartheta) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'}$$

benutzt haben.

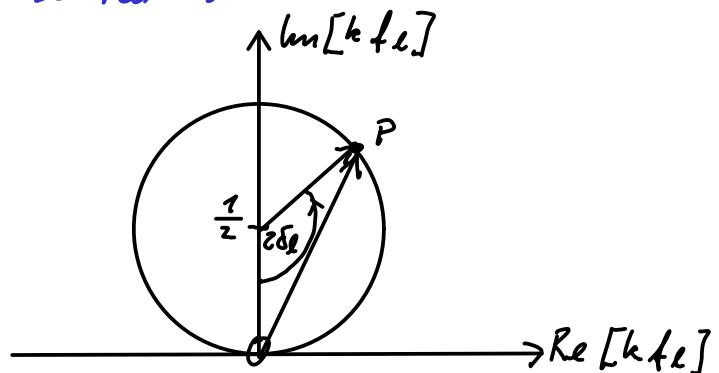
Wir können an dieser Stelle das optische Theorem verifizieren:

$$\ln [f(k, \vartheta=0)] = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{\sin \delta_\ell}{k} \ln e^{i\delta_\ell} \underbrace{P_\ell(1)}_{=1} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{k} \sin^2 \delta_\ell = \frac{k}{4\pi} \sigma$$

Wir betrachten noch den Zusammenhang zwischen Streuquerschnitt und Partialwellenamplitude. Wir schreiben

$$k f_\ell = \frac{i}{2} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{\pi}{2} + 2i\delta_\ell}. \quad \text{Der Wert}$$

$k f_\ell$ liegt also auf einem sogenannten Unitaritätskreis. Wenn δ_ℓ klein ist, dann ist $k f_\ell$ am unteren Rand des Kreises und damit nahezu reell:



$$f_\ell = \frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} \approx \frac{(1+i\delta_\ell)\delta_\ell}{k} \approx \frac{\delta_\ell}{k}$$

Wenn dagegen $\delta_\ell \approx \frac{\pi}{2}$, dann ist f_ℓ nahezu imaginär und $|k f_\ell| \approx i$ nahezu maximal. Dies kann im Falle resonanter Streuung erreicht werden. In einem solchen Fall ist $B_\ell^{\max} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1)$. Wir kommen nun zur Berechnung der Streuphasen für ein gegebenes Potential V . Dazu nehmen wir an oder nehmen die Näherung vor, daß V für $r > R$ verschwindet. Somit ist R die Reichweite des Potentials. Für $r > R$ ist die Lösung der Schrödingergleichung somit durch eine Superposition freier Kugelwellen gegeben. Dabei kann auch die Lösung $y_\ell(r)$ beitragen, da der Ursprung des Koordinatensystems nun in der Wechselwirkungsregion liegt.

Wir bilden die Lösung für $r > R$ daher als Linearkombination der sphärischen Hankelfunktionen

$$h_\ell^{(1)} = j_\ell + i y_\ell \quad \text{und} \quad h_\ell^{(2)} = j_\ell - i y_\ell.$$

In großer Entfernung vom Streuzentrum haben diese die asymptotische Form

$$h_\ell^{(1)}(kr) \xrightarrow{kr \gg 1} \frac{e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})}}{ikr} \quad \text{und} \quad h_\ell^{(2)}(kr) \xrightarrow{kr \gg 1} -\frac{e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})}}{ikr}.$$

Für beliebige r entwickeln wir die Wellenfunktionen als

$$\langle \vec{x} | \psi^{(t)} \rangle = \sum_l i^l (2l+1) A_l(r) P_l(\cos\vartheta),$$

wobei für $r > R$

$$A_l(r) = C_l^{(1)} h_\ell^{(1)}(kr) + C_l^{(2)} h_\ell^{(2)}(kr)$$

Für $kr \gg 1$ ist also

$$\langle \vec{x} | \psi^{(t)} \rangle \approx \sum_l (2l+1) P_l(\cos\vartheta) \left[C_l^{(1)} \frac{e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})}}{ikr} - C_l^{(2)} \frac{e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})}}{ikr} \right]$$

Wir können dies vergleichen mit dem Resultat

$$\langle \vec{x} | \psi_k^{(t)} \rangle = \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos \vartheta)}{2ik} \left[\underbrace{[(1+2i\delta_\ell)(k)]}_{=e^{2i\delta_\ell}} \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right]$$

Es folgt also

$$C_l^{(1)} = \frac{1}{2} e^{2i\delta_\ell} \quad \text{and} \quad C_l^{(2)} = \frac{1}{2}.$$

Damit ist

$$\begin{aligned} A_\ell(r) &= \frac{1}{2} (e^{2i\delta_\ell} + 1) j_\ell(kr) + \frac{1}{2} (e^{2i\delta_\ell} - 1) i g_\ell(kr) \\ &= e^{i\delta_\ell} [\cos \delta_\ell j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell g_\ell(kr)] \end{aligned}$$

An der Stelle $r=R$ wollen wir diese freie Lösung an die Lösung in der Wechselwirkungsregion anschließen. Es ist dann nützlich, die logarithmische Ableitung zu bilden:

$$\beta_\ell := \frac{d \log A_\ell}{d \log r} \Big|_{r=R} = \frac{1}{A_\ell} \frac{d r}{d \log r} \frac{d A_\ell}{d r} \Big|_{r=R} = \frac{1}{A_\ell} \frac{d e^{\log r}}{d \log r} \frac{d A_\ell}{d r} \Big|_{r=R} = \frac{r}{A_\ell} \frac{d A_\ell}{d r} \Big|_{r=R}$$

$$= kR \left[\frac{j'_\ell(kR) \cos \delta_\ell - g'_\ell(kR) \sin \delta_\ell}{j_\ell(kR) \cos \delta_\ell - g_\ell(kR) \sin \delta_\ell} \right] = kR \left[\frac{j'_\ell(kR) - g'_\ell(kR) \tan \delta_\ell}{j_\ell(kR) - g_\ell(kR) \tan \delta_\ell} \right]$$

$$\Rightarrow \tan \delta_\ell = \frac{\beta_\ell j_\ell(kR) - kR j'_\ell(kR)}{\beta_\ell g_\ell(kR) - kR g'_\ell(kR)}$$

Ein ' bedeutet hier die Ableitung bezgl. des gesamten Arguments.

Um die Phasenverschiebung δ_ℓ zu bestimmen kann man daher zunächst β_ℓ berechnen.

Nun müssen wir die Schrödingergleichung für $r \leq R$ lösen,

$$\frac{\partial^2 u_\ell}{\partial r^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) u_\ell = 0 \quad \text{mit} \quad u_\ell(r) = r A_\ell(r)$$

Eine bei $r=0$ reguläre Lösung muss die Randbedingung $u_\ell(0)=0$ erfüllen. Da wir uns für die logarithmische Ableitung von A_ℓ zur Bestimmung der Streuphase

interessieren reicht es aus, eine Randbedingung für A_ℓ zu wissen — die Normierung hat keinen Einfluss auf β_ℓ . Wir können die Streuphase also durch Integration der Schrödinger-Gleichung ausgehend von $r=0$ bestimmen.

6.10 Streuung an einer harten Kugel

Die harte Kugel ist durch folgendes Potential beschrieben:

$$V = \begin{cases} \infty & \text{für } r < R \\ 0 & \text{für } r \geq R \end{cases}$$

Da die Wellenfunktion im inneren der Kugel verschwindet, sehen wir unmittelbar, daß $A_\ell(r=R) = 0$ ist. Damit folgt unmittelbar, daß

$$\cos \delta_\ell j_\ell(kR) - \sin \delta_\ell g_\ell(kR) = 0 \iff \tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(kR)}{g_\ell(kR)}$$

Bis zu diesem Punkt haben wir noch keine Näherung vorgenommen.

Beachten wir zunächst die S-Wellen Streuung ($\ell=0$). Mit

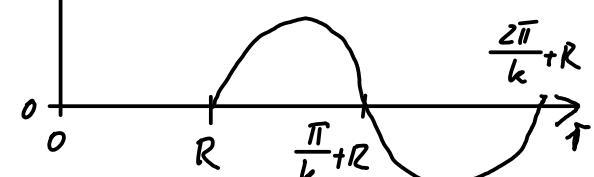
$$j_0(kR) = \sqrt{\frac{\pi}{2kR}} \underbrace{J_{\frac{1}{2}}(kr)}_{= \sqrt{\frac{2}{\pi kR}} \sin(kR)} \quad \text{und} \quad g_0(kR) = \sqrt{\frac{\pi}{2kR}} \underbrace{Y_{\frac{1}{2}}(kr)}_{= -\sqrt{\frac{2}{\pi kR}} \cos(kR)} = -\sqrt{\frac{2}{\pi kR}} \cos(kR)$$

folgt $\tan \delta_0 = -\tan kR \Rightarrow \delta_0 = -kR$.

Wir finden also für die S-Wellenfunktion:

$$\begin{aligned} A_0(r) &= e^{-ikR} \left[\cos(kr) \frac{\sin(kr)}{kr} - \sin(kr) \frac{\cos(kr)}{kr} \right] \\ &= e^{-ikR} \frac{1}{kr} \left[\frac{1}{2} \sin(kr-kR) + \frac{1}{2} \sin(kr+kR) - \frac{1}{2} \sin(kR-kr) - \frac{1}{2} \sin(kr+kR) \right] \\ &= e^{-ikR} \frac{1}{kr} \sin(kr-kR) \quad e^{ikR} + A_0(r) \uparrow \end{aligned}$$

Für allgemeines ℓ betrachten wir die Grenzfälle niedriger ($kR \ll 1$) und hoher Energien ($kR \gg 1$).



Für $\ell = kR \ll 1$ gelten folgende Näherungen für die sphärischen Besselfunktionen:

$$f_{\ell+\frac{1}{2}}(e) = \left(\frac{e}{2}\right)^{\ell+\frac{1}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(\ell + \frac{1}{2} + k + 1)} \left(\frac{e}{2}\right)^k$$

$$\approx \left(\frac{e}{2}\right)^{\ell+\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\pi} \frac{1}{2} \frac{3}{2} \dots \frac{2\ell+1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\ell+\frac{1}{2}} \frac{1}{1 \cdot 3 \dots (2\ell+1)}$$

Mit $(2n+1)!! = (2n+1)(2n-1)(2n-3)\dots \cdot 1$ ist also

$$j_\ell(e) = \sqrt{\frac{\pi}{2e}} f_{\ell+\frac{1}{2}}(e) \approx \frac{e^\ell}{(2\ell+1)!!}$$

In ähnlicher Weise können wir nähern

$$y_\ell(e) = (-1)^{\ell+1} \sqrt{\frac{\pi}{2e}} f_{-\ell-\frac{1}{2}}(e) \approx -\frac{(2\ell-1)!!}{e^{\ell+1}}$$

Es ist also

$$\tan \delta_\ell \approx -\frac{(kR)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)[(2\ell-1)!!]^2}$$

In der Niedrigenergiennäherung $kR \ll 1$ können wir also alle Partialwellen mit $\ell > 0$ vernachlässigen, da die S-Wellenstreuung dominiert. So erhalten wir

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx |f_{\ell=0}(k, \Omega)|^2 = \left| \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \right|^2 = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} \approx \frac{k^2 R^2}{k^2} = R^2$$

und $G = 4\pi R^2$. Dies ist das Vielfache des geometrischen Streuquerschnitts πR^2 . Für die Streuung im hochenergetischen Fall betrachten wir die eikonale Näherung.

6.11 Eikonale Näherung

Wir schreiben dazu die Wellenfunktionen als

$$\psi(\vec{x}, t) = \sqrt{e(\vec{x}, t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)} \quad \text{mit } e(\vec{x}, t), S(\vec{x}, t) \in \mathbb{R}$$

und setzen dies ein in die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = - \frac{\hbar^2 \vec{V}^2}{2m} \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)$$

und erhalten

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \sqrt{e'} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{e'} \frac{\partial}{\partial t} S \right) \\ = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{V}^2 \sqrt{e'} + \frac{2i}{\hbar} (\vec{V} \sqrt{e'}) \cdot (\vec{V} S) \right) \end{aligned}$$

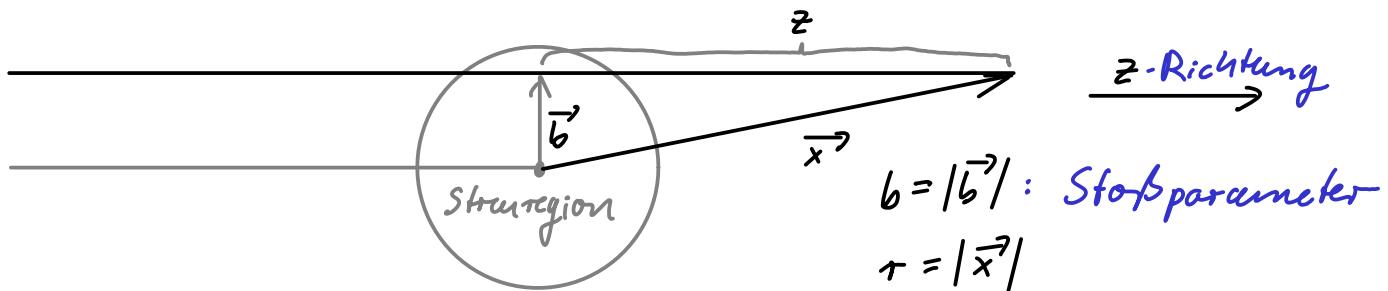
$$- \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{e'} |\vec{V} S|^2 + \frac{i}{\hbar} \sqrt{e'} \vec{V}^2 S + V \sqrt{e'}$$

Zur Ordnung \hbar^0 ergibt sich näherungsweise „Eikonalgleichung“

$$-\sqrt{e'} \frac{\partial}{\partial t} S = -\frac{1}{2m} \sqrt{e'} |\vec{V} S|^2 + V \sqrt{e'} \Rightarrow \frac{1}{2m} |\vec{V} S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

In derselben Näherung können wir auch noch $E = -\frac{\partial S}{\partial t}$ ersetzen. Mit dieser Gleichung können wir S entlang eines klassischen Pfades bestimmen und erhalten für $S \gg \hbar$ eine semiklassische Wellenfunktion.

Dazu zeichnen wir die klassische Trajektorie als eine gerade Linie, folgendem Diagramm entsprechend:



Wir integrieren entsprechend die Gleichung

$$\frac{\vec{V} S}{\hbar} = \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V} \quad |\vec{V} S|^2 = 2m(E - V) = 2m \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V \right)$$

zu

$$\frac{S}{\hbar} = \int_{-\infty}^z dz' \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2})} + \text{const.}$$

$$\begin{aligned} \vec{V}^2 e^{\frac{i}{\hbar} S} &= \frac{i}{\hbar} \vec{V} \cdot \vec{V} S e^{\frac{i}{\hbar} S} \\ &= \left(-\frac{|\vec{V} S|^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar} \vec{V}^2 S \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} \end{aligned}$$

Die Integrationskonstante soll gemäß $\frac{S}{\hbar} \rightarrow kz$ für $V \rightarrow 0$ gewählt werden, so daß bei verschwindendem Potential die Wellenfunktion mit der Lösung im Form ebener Wellen übereinstimmt. Damit ist also

$$\frac{S}{\hbar} = kz + \int_{-\infty}^z dz' \left[\sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2})} - k \right]$$

$$\approx kz - \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z dz' V(\sqrt{b^2 + z'^2})$$

Für die Näherung haben wir dabei $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \gg V$ angenommen.

Die Wellenfunktion ist damit in der eikonalen Näherung

$$\psi^{(+)}(\vec{x}) = \psi^{(+)}(\vec{b} + z \hat{z}) \approx e^{ikz} e^{-i \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z dz' V(\sqrt{b^2 + z'^2})}$$

Dies setzen wir ein in den Ausdruck für die Streuamplitude (im Kontinuum)

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle$$

$$= -\underbrace{\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\sqrt{b^2 + z'^2})}_{\text{Bornische Näherung 1. Ordnung}} e^{ik \cdot \vec{x}'} e^{-i \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{z'} dz'' V(\sqrt{b^2 + z''^2})}$$

Bornische Näherung 1. Ordnung

Zur Integration benutzen wir zylindrische Koordinaten

$d^3x' = b db d\varphi_b dz'$ und benutzen, daß

$$(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}' = (\vec{k} - \vec{k}') \cdot (\vec{b} + z' \hat{z}) = -\vec{k}' \cdot \vec{b} + (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \hat{z} z' = -\vec{k}' \cdot \vec{b} + kz' (1 - \cos \vartheta)$$

$$= -\vec{k}' \cdot \vec{b} + kz' \Theta(\vartheta^2)$$

Den letzten Term ignorieren wir für kleine Streuwinkel ϑ .

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit betrachten wir jetzt die Streuung in der xz -Ebene und schreiben

$$\vec{k}' \cdot \vec{b} = (k \sin \vartheta \hat{x} + k \cos \vartheta \hat{z}) \cdot (b \cos \varphi_b \hat{x} + b \sin \varphi_b \hat{y}) \approx kb \vartheta \cos \varphi_b$$

Es ergibt sich dann

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty b db \int_0^{2\pi} d\varphi_b e^{-ikb\vartheta \cos\varphi_b} \int_{-\infty}^\infty dz V(\sqrt{b^2 + z^2}) e^{-i\frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z dz' V(\sqrt{b^2 + z'^2})}$$

Dies werden wir weiter aus mit Hilfe von

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_b e^{-ikb\vartheta \cos\varphi_b} = 2\pi f_0(kb\vartheta)$$

und

$$\int_{-\infty}^\infty dz V(\sqrt{b^2 + z^2}) e^{-i\frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z dz' V(\sqrt{b^2 + z'^2})} = \frac{i\hbar^2 k}{m} \left[e^{-i\frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z dz' V(\sqrt{b^2 + z'^2})} \right]_{z=-\infty}^{z=\infty}$$

Somit erhalten wir

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -ik \int_0^\infty b db f_0(kb\vartheta) \left[e^{zi\Delta(b)} - 1 \right] \quad \text{mit } \Delta(b) = -\frac{m}{2k\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty dz V(\sqrt{b^2 + z^2})$$

Wegen des kleinen Strahlwinkels ϑ tragen nun viele Partialwellen bei. Wir fassen daher im Folgenden b als eine kontinuierliche Variable auf. Semiklassisch gilt $\hbar l = p_b = \hbar k b$.

Wir führen daher $l_{\max} = kR$ ein und nehmen folgende Näherungen vor:

$$l_{\max} = kR \quad \begin{cases} \vartheta \ll 1 \\ l \gg 1 \end{cases} \quad \sum_{l=0}^{\infty} \longrightarrow k \int db \quad \text{und} \quad P_l(\cos\vartheta) \approx f_0(l\vartheta) = f_0(kb\vartheta)$$

Die zweite Ersetzung zeigen wir folgendermaßen. Die Legendre-Polynome erfüllen die Differentialgleichung

$$(1-z^2) \frac{d^2 u}{dz^2} - 2z \frac{du}{dz} + l(l+1)u = 0 \implies u = P_l(z)$$

Wir transformieren die Variable

$$z = 1 - \frac{y^2}{2l^2}, \quad y = l\sqrt{z'}\sqrt{1-z'}, \quad \frac{d}{dz} = -\sqrt{\frac{1}{2(1-z)}} \quad l \quad \frac{d}{dy} = -l^2 \frac{1}{y} \frac{d}{dy},$$

$$\frac{d^2}{dz^2} = l^4 \frac{1}{y^2} \frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{[2(1-z)]^{\frac{3}{2}}} \quad l \quad \frac{d}{dy} = l^4 \frac{1}{y^2} \frac{d^2}{dy^2} - l^4 \frac{1}{y^3} \frac{d}{dy}$$

so daß wir folgende Gleichung erhalten:

$$\left(1 - 1 + \frac{y^2}{l^2} - \frac{y^4}{4l^4}\right) \left(l^4 \frac{1}{y^2} \frac{d^2}{dy^2} - l^4 \frac{1}{y^3} \frac{d}{dy}\right) u + 2 \left(1 - \frac{y^2}{2l^2}\right) l^2 \frac{1}{y} \frac{d}{dy} u + l(l+1) u = 0$$

Für $y \ll l$ erhalten wir

$$\frac{d^2}{dy^2} l^2 u + \frac{1}{y} \frac{d}{dy} l^2 u + l(l+1) u = 0$$

Dies vergleichen wir mit der Besselschen Differentialgleichung

$$\frac{d^2 Z_\nu}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dZ_\nu}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) Z_\nu = 0,$$

so daß wir obige Näherung verifizieren. Dabei folgt noch die Normierung aus $P_\ell(0) = J_0(0) = 1$.

Diese Näherungen wenden wir auf die Streuamplitude an:

$$f(k, \omega) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_\ell(\cos \omega)$$
$$\approx \int_0^R db zkb \frac{1}{2i} (e^{zib\delta_l} - 1) f_0(kb, \omega)$$

Durch Vergleich mit obigem Resultat finden wir also

$$\delta_l = \Delta(b) \text{ für } l=kb \text{ (ikonale Näherung)}$$

Für niedrigergetische Strömung hatten wir gefunden, daß der Struquerschnitt dem vierfachen des geometrischen Querschnitts entspricht. Aufgrund der semiklassischen Näherung erwarten wir, daß bei hohen Energien der Struquerschnitt dem klassischen geometrischen Querschnitt entspricht, was wir nun überprüfen.

Dazu benutzen wir aus 6.9 die Formel

$$\bar{\sigma} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l \approx kR} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

sowie die für $kR \gg 1$ gültigen Näherungen (vgl. Gradshteyn, Ryzhik 8.451):

$$j_\ell(kR) \approx \frac{1}{kR} \sin\left(kR - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad \text{und} \quad y_\ell(kR) \approx -\frac{1}{kR} \cos\left(kR - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

Damit folgt zunächst

$$\sin^2 \delta_\ell = \frac{\tan^2 \delta_\ell}{1 + \tan^2 \delta_\ell} = \frac{j_\ell^2(kR)}{j_\ell^2(kR) + y_\ell^2(kR)} \approx \sin^2\left(kR - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

↑
harte Kugel

Es ist daher

$$\sin^2 \delta_\ell + \sin^2 \delta_{\ell+1} = \sin^2 \delta_\ell + \cos^2 \delta_\ell = 1$$

und wir ersetzen unter der Summe $\sin^2 \delta_\ell \rightarrow \frac{1}{2}$. So erhalten wir

$$\bar{F} = \frac{4\pi}{k^2} k \int_0^R db \cdot 2kb \cdot \frac{1}{2} = 4\pi \int_0^R b db = 2\pi R^2$$

Dies ist immer noch das zweifache des geometrischen Querschnitts. Um dies zu verstehen, zerlegen wir die Stromplitude wie folgt:

$$\begin{aligned} f(k, \vartheta) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta) \\ &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l(\cos \vartheta) + \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) \\ &=: f_{\text{Reflexion}} + f_{\text{Schatten}} \end{aligned}$$

Berechnen wir $\int d\Omega |f_{\text{Reflexion}}|^2$, so gibt es aufgrund der Orthogonalität der P_l keine Interferenzterme für verschiedene l :

$$\begin{aligned} \int d\Omega |f_{\text{Reflexion}}|^2 &= \frac{2\pi}{4k^2} \sum_{l=0}^{kR} \int_{-1}^1 d\cos \vartheta (2l+1)^2 |P_l(\cos \vartheta)|^2 \\ &= \frac{1}{2\ell+1} \int_{-1}^1 dx P_\ell(x) P_{\ell+1}(x) \\ &\approx \frac{\pi}{k^2} \int_0^R kb db = \pi R^2 \end{aligned}$$

Um Schatten auszuwerten, bemerken wir, dass $P_\ell(\cos \vartheta) = 1$ für $\vartheta=0$ ist, während für größere Werte von ϑ die verschiedenen ℓ -Beiträge im inkohärenter Weise beitragen, was zu destruktiver Interferenz führt. Wir können also wieder die Näherung für $\ell \gg 1, \vartheta \ll 1$ verwenden und erhalten so

$$\text{Schatten} \approx \frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{kR} (2\ell+1) f_0(\ell\vartheta) \approx ik \int_0^R b db f_0(kb\vartheta) = i \frac{R f_1(kR\vartheta)}{\vartheta}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \int d\Omega |\text{Schatten}|^2 &= 2\pi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \frac{R^2 f_1^2(kR\vartheta)}{\vartheta^2} \approx 2\pi R^2 \int_0^\infty d\vartheta \frac{f_1^2(kR\vartheta)}{\vartheta} \\ &= 2\pi R^2 \int_0^\infty d\xi \frac{f_1^2(\xi)}{\xi} = \pi R^2 \end{aligned}$$

Da aufgrund $2S_{\ell+1} = 2S_\ell - \pi$ die Phase von im Integranden von Reflexion oszilliert, mittelt sich der Interferenzterm vom Reflexions- und Schattenanteil zu Null: $\text{Re}[f_{\text{Reflexion}}^* \text{Schatten}] \approx 0$. Wir können daher zerlegen:

$$\begin{aligned} S_{\text{tot}} &= \underbrace{\pi R^2}_S + \underbrace{\pi R^2}_R \\ &= S_{\text{Reflexion}} = S_{\text{Schatten}} \end{aligned}$$

Der Schattenanteil ist genau jener Beitrag der Vorwärtssierung, der durch destruktive Interferenz mit der ungestreuten Welle den tatsächlichen Schatten erzeugt. Damit stimmt dieses quantenmechanische Resultat letztlich doch mit der klassischen Erwartung überein. Wir prüfen noch, ob diese Interpretation im Einklang mit dem optischen Theorem $\lim [f(\vec{k}, \vec{k})] = \frac{i}{4\pi} S_{\text{tot}}$ ist. Aufgrund des oszillatorischen Verhaltens $e^{i\ell\vartheta}$ ist der Imaginärteil von f_{Schatten} dominierend, so daß

$$\frac{4\pi}{k} \lim [f(\vec{k}, \vartheta=0)] \approx \frac{4\pi}{k} \lim [f_{\text{Schatten}}(\vec{k}, \vartheta=0)] = \frac{4\pi}{k} R \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \frac{f_1(kR\vartheta)}{\vartheta}$$

$$= \frac{4\pi}{k} R \frac{kR}{2} = 2\pi R^2 = 5_{\text{tot}}$$

6.12 Streuung am Potenzialtopf und Resonanzen

Ist die Wellenlänge $\frac{2\pi}{k}$ von der gleichen Ordnung oder größer als die Reichweite R , so ist die Streuung durch die S-Welle mit $l=0$ dominiert und die Partialwellen mit höherem l können vernachlässigt werden.

Als Beispiel betrachten wir nun eine Kugel mit endlichem Potential, nämlich

$$V = \begin{cases} V_0 = \text{const.} & \text{für } r < R \\ 0 & \text{für } r \geq R \end{cases}$$

Für $V_0 < 0$ ($V_0 > 0$) ist dieses Potential anziehend (abstoßend).

Wir erinnern daran, daß für $r \geq R$ die Wellenfunktion die Form hat:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)}) \rangle = \sum_l i^l (2l+1) A_l(r) P_l(\cos\vartheta)$$

$$A_l(r) = e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l g_l(kr)]$$

Für konstantes V_0 ergibt sich $A_l(r) = \frac{u(r)}{r}$ für $r < R$ in einfacher Weise aus

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V_0 \right] u(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} u(r)$$

$$A_l(r) = j_l(qr) \quad \text{mit} \quad q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

wobei wir die Randbedingung $u(0) = 0$ benutzt haben.

Ausdrücklich gilt diese Lösung auch wenn $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0 < 0$ und damit q imaginär ist.

Zur Bestimmung der Streuphase berechnen wir

$$\beta_\ell := \frac{d \log A_\ell}{d \log r} \Big|_{r=R} = \frac{\sigma}{A_\ell} \frac{d A_\ell}{d r} \Big|_{r=R} = R q \frac{j_\ell'(qR)}{j_\ell(qR)}$$

und damit $\tan \delta_\ell = \frac{\beta_\ell j_\ell(kR) - kR j_\ell'(kR)}{\beta_\ell y_\ell(kR) - kR y_\ell'(kR)}$

Um analytische Näherungen zu erhalten, betrachten wir die niedenergetische ($kR \ll 1$) Streuung an einem tiefen ($qR \gg 1$) Potentialtopf.

Relevante Entwicklungen sind also für $\ell \ll 1$ wieder

$$j_\ell(\ell) \approx \frac{e^\ell}{(2\ell+1)!!} = \frac{e^\ell}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2\ell+1)}$$

und

$$y_\ell(\ell) \approx -\frac{(2\ell-1)!!}{e^{\ell+1}} = -\frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2\ell-1)}{e^{\ell+1}}$$

während für $\ell \gg 1$

$$j_\ell(\ell) \approx \frac{1}{\ell} \sin\left(\ell - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad \text{und} \quad y_\ell(\ell) \approx -\frac{1}{\ell} \cos\left(\ell - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

Damit ist also

$$\begin{aligned} \tan \delta_\ell &\approx \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{(\beta_\ell - \ell)(kR)^\ell}{(-\beta_\ell - \ell - 1)(kR)^{-\ell-1}} \\ &= \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} (kR)^{2\ell+1} \frac{\ell - \beta_\ell}{\ell + 1 + \beta_\ell} \end{aligned}$$

Für $kR \rightarrow 0$ ist also $\delta_\ell \propto (kR)^{2\ell+1}$, so dass wir noch einmal explizit die Dominanz der S-Wellenstreuung bei niedrigen Energien feststellen. Wir sehen auch, dass für $\ell + 1 + \beta_\ell = 0$ Resonanzen entstehen, für welche $\tan \delta_\ell \rightarrow \pm \infty$ und damit $\delta_\ell \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}$ gilt, so dass der Partialwellen-Streuquerschnitt maximal wird:

$$\tilde{\sigma}_\ell = \frac{4\bar{\ell}}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \xrightarrow{\delta_\ell \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} \frac{4\bar{\ell}}{k^2} (2\ell+1)$$

Ist δ_ℓ dagegen ein Vielfaches von π , so verschwindet der Streuquerschnitt

Für $qR \gg 1$ erhalten wir noch

$$\beta_\ell \approx -1 + qR \cot\left(qR - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

Durch die Wahl der Energie der einfallenden Teilchen kann für bestimmte Partialwellen also entweder rezonante Strömung oder ein verschwindender Streuquerschnitt beobachtet werden.

Die Resonanzbedingung ist $-\arccot \frac{\ell}{qR} = \frac{\ell}{qR} + \frac{2n+1}{2}\pi + \frac{\pi}{2}$

$$\ell + qR \cot\left(qR - \frac{\ell\pi}{2}\right) = 0 \Rightarrow qR - \frac{\ell\pi}{2} \approx \frac{2n+1}{2}\pi + \frac{\ell}{qR}$$

Wir betrachten nun eingehender die Phasenverschiebung und den Streuquerschnitt in der Nähe der Resonanzenergie E_R (d.h. die Energie, für welche $\ell+1+\beta_\ell$)

$$\tan \delta_\ell \approx \frac{2\ell+1}{[(2\ell+1)!!]^2} (kR)^{2\ell+1} \frac{\ell - \beta_\ell}{\ell + 1 + \beta_\ell} \approx \frac{(2\ell+1)^2}{[(2\ell+1)!!]^2} (kR)^{2\ell+1} \frac{1}{\ell + 1 + \beta_\ell}$$

\uparrow
nahe Resonanz

$$\approx \frac{(kR)^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{1}{(E-E_R) \frac{\partial \beta_\ell}{\partial E} \Big|_{E=E_R}} = - \frac{\gamma (kR)^{2\ell+1}}{E-E_R} = - \frac{1}{2} \frac{\Gamma_k^2}{E-E_R}$$

mit $\gamma = -\frac{1}{[(2\ell+1)!!]^2 \frac{\partial \beta_\ell}{\partial E} \Big|_{E=E_R}}$ und $\Gamma_k^2 = 2(kR)^{2\ell+1} \gamma$.

Die Phase δ_ℓ unterscheidet an der Resonanz also einen Sprung von $-\frac{\pi}{2}$ nach $\frac{\pi}{2}$ (oder umgekehrt). Außerdem ist

$$\tilde{\sigma}_\ell = \frac{4\bar{\ell}}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell = \frac{4\bar{\ell}}{k^2} (2\ell+1) \frac{1}{1 + \frac{4(E-E_R)^2}{\Gamma_k^2}}$$

$$\tan^2 x = \frac{\sin^2 x}{\cos^2 x} = \frac{\sin^2 x}{1 - \sin^2 x}$$

$$\Rightarrow \sin^2 x = \frac{\tan^2 x}{1 + \tan^2 x}$$

$$= \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{\frac{1}{2}\Gamma_k^2}{(E-E_R)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_k)^2}$$

Dies ist die Breit-Wigner-Formel für die Resonanzstreuung, welche die für Resonanzen typische Cauchy-Lorentz Form hat.

Für die Streuamplitude finden wir

$$f_l(k) = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} = \frac{\tan \delta_l}{k(1-i\tan \delta_l)} = \frac{-\frac{1}{2k}\Gamma_k}{E-E_R + \frac{i}{2}\Gamma_k},$$

so dass diese einen Pol in der unteren komplexen Hälle=ebene hat. Wegen der l -Abhängigkeit der Breite $\gamma(kR)^{2l+1}$ sind die Resonanzen für $l>1$ sehr scharf, während für S-Wellen nicht immer eine Resonanz auftritt.

Wir betrachten nun noch einmal die S-Wellenstreuung, welche für $kR \ll 1$ dominiert und für welche sich der die Streuphase besonders einfach verhält:

$$\tan \delta_0 = -kR \frac{\beta_0}{1+\beta_0} \quad \text{und} \quad \beta_0 \approx 1 + qR \cot(qR)$$

Außerdem nähern wir (wegen $kR \ll 1$)

$$\sin^2 \delta_0 = \frac{\tan^2 \delta_0}{1+\tan^2 \delta_0} = \frac{kR^2 \frac{\beta_0^2}{(1+\beta_0)^2}}{1+kR^2 \frac{\beta_0^2}{(1+\beta_0)^2}} \approx k^2 R^2 \left[\frac{qR \cot(qR)-1}{qR \cot(qR)} \right]^2 \longrightarrow$$

$$\Gamma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = 4\pi R^2 \left[\frac{qR \cot(qR)-1}{qR \cot(qR)} \right]^2 = 4\pi R^2 \left[\frac{\tan(qR)}{qR} - 1 \right]^2$$

Mit dieser Formel lässt sich der Rutherford-Townsend Effekt der Streuung von Elektronen an den Edelgasen Ar, Kr, Xe erklären. Die abgeschlossenen Schalen stellen zusammen mit dem Kern ein attraktives, kurzreichweitiges Potential dar.

Für $E \approx 0.7 \text{ eV}$ ist die Bedingung $\tan(qR) = qR$ erfüllt und Γ_0 verschwindet. Diese Beobachtung aus dem Jahr 1920 gilt als der erste Nachweis der Wellennatur der Elektronen.

6.13 Streuung bei niedrigen Energien und gebundenem Zustände

Wir betrachten nun sehr geringe Energien, so daß für $r > R$ und $l=0$ die Wellenfunktion die Schrödingergleichung

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = 0$$

erfüllt, welche offensichtlich die Lösung $u(r) = \text{const.} * (r-a)$ hat. Dies ist im Einklang mit dem Grenzfall großer Wellenlängen für die üblichen äußeren Wellenfunktionen:

$$A_0(r) \propto \frac{1}{kr} \sin(kr + \delta_0) \quad (\text{Kapitel 6.10})$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} r A_0(r) \propto \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{k}$$

was obiger Form entspricht, sofern $\delta_0(k) = 0 + \delta'_0(k=0)k + \dots$ (für die harte Kugel ist z.B. $\delta_0 = -kR$). Wir finden also

$$\frac{u'}{u} = k \cot \left[k \left(r + \frac{\delta_0}{k} \right) \right] \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{1}{r-a}$$

Um a zu bestimmen, setzen wir $r=0$, so daß

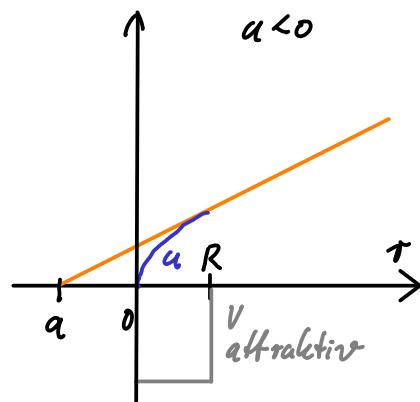
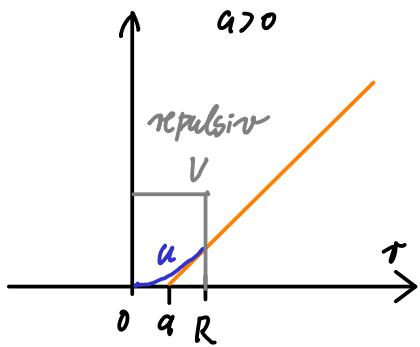
$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a}$$

Man bezeichnet a als die Streulänge. Für $k \rightarrow 0$ ergibt sich für den Streuquerschnitt

$$\sigma_0 = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_0} = \frac{4\pi}{\frac{1}{a^2}} = 4\pi a^2$$

Wir merken an, daß für die harte Kugel $a=R$ ist, so daß sich dieses Resultat mit obigem deckt.

Der Parameter a läßt sich geometrisch als der Schnittpunkt von r und der äußeren Wellenfunktion mit der r -Achse interpretieren. Für repulsive Potentiale ist a positiv und $a < R$. Für schwach attraktive Potentiale ist a zunächst



r mal äußere
Wellenfunktion
(extrapoliert für $r < R$)

r mal innere
Wellenfunktion

negativ. Wird das Potential verstärkt, werden zunächst größere $|a|$ mit $a < 0$ erreicht, bis a schließlich das Vorzeichen wechselt.

In diesem Grenzfall gibt es einen interessanten Zusammenhang mit gebundenen Zuständen. Die äußere Schrödingergleichung für S-Wellen ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = E u(r) \quad (r > R),$$

wobei $E < 0$ ($E > 0$) für gebundene (freie) Zustände ist.
Für $r > R$ ist also

$$u(r) \propto e^{-\kappa r} \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

Ist E sehr nahe bei Null, ist die Wellenfunktion näherungsweise konstant. Vergrößern wir E ein wenig, so dass $E > 0$ wird, so geht dies kontinuierlich in die Lösung $u(r) = \text{const.} * (r - a)$ für ein sehr großes a (und sehr kleines const.) über. Wir merken auch an, dass die inneren Wellenfunktionen sich in den Grenzfällen $E \rightarrow 0^-$ und $E \rightarrow 0^+$ nicht unterscheiden. Um κ und a zu vergleichen,

bilden wir die logarithmischen Ableitungen der obigen Lösungen an der Stelle $r=R$:

$$\frac{u'}{u} = \frac{1}{R-a} = -\chi \frac{e^{-\chi r}}{e^{-\chi r}}.$$

Im Falle, daß $R \ll a$, folgt $\chi \approx \frac{1}{a}$.

Im Falle eines schwach gebundenen Zustandes können wir also von der Streulänge auf die Bindungsenergie schließen:

$$E_{BE} = \frac{\hbar^2}{2m} \chi^2 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

Dieser Zusammenhang kann z.B. auf Neutronen-Protonen ($n p$) Streuung angewandt werden. Der ${}^{35}_{11} \xrightarrow{\text{Bahn}} \xrightarrow{\text{gesamt}}$ (d.h. parallele Spins) Zustand des $n p$ -Systems hat einen gebundenen Zustand – das Deuteron – mit $E_{BE} = 2,22 \text{ MeV}$. Die Streulänge wird experimentell als $a = 5,4 * 10^{-13} \text{ cm}$ gefunden. Eingesetzt in obige Formel ergibt sich ($\mu = \frac{m_N}{2}$ die reduzierte Masse)

$$\frac{\hbar}{2ma^2} = \frac{\hbar}{m_N a^2} = 1,4 \text{ MeV} \quad (m_N = 938 \text{ MeV}).$$

Die Diskrepanz ergibt sich letztlich aus der Tatsache, daß $a \gg R$ hier keine sehr akkurate Näherung ist und daß die inneren Wellenfunktionen für die Streuung und für den gebundenen Zustand daher deutlich unterscheiden. Eine Verbesserung kann durch Mitnahme des nachfolgenden Terms in der Entwicklung von δ_0 erreicht werden, d.h. $k \cot \delta_0 \approx -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} \tau_0 k^2$. Man bezeichnet τ_0 als die Effektive Reichweite des Potentials.

6.14 Gebundene Zustände als Pole der Strommatrix

Betrachten wir die Wellenfunktion im großen Abstand vom Streuzentrum für $\ell=0$ (vgl. Abschnitt 6.8)

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{2ik} \left[(1 + 2ik f_0(k)) \frac{e^{ik\tau}}{\tau} - \frac{e^{-ik\tau}}{\tau} \right]$$

$$= \frac{1}{2ik\tau} \left[S_0(k, \vartheta) e^{ik\tau} - e^{-ik\tau} \right]$$

Zum Vergleich ist der Realteil der Wellenfunktion für einen gebundenen Zustand

$$R(\tau) = \frac{U(\tau)}{\tau} = \frac{e^{-k\tau}}{\tau} = \frac{e^{ik\tau}}{\tau},$$

wobei wir für letztere Identität k als imaginär auffassen.

Wir erinnern daran, daß gebundene Zustände nur für diskrete Werte von λ auftreten.

Wir nehmen also an, daß wir die Wellenfunktion für das Sturmproblem zu komplexen Werten für k fortsetzen können, wobei für den gebundenen Zustand keine einfallende Welle auftritt. Das Verhältnis zwischen „gestreuter“ und einfallender Welle muß also für $k \rightarrow i\lambda$ gegen ∞ gehen. Es kann gezeigt werden, daß dies einem Pol 1. Ordnung entspricht.

Wir erinnern daran, daß $S_{k=0}(k) = e^{2i\delta_0}$ und daß $\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{q}$ ist. Für $k \rightarrow 0$ muß also $\delta_0 = 0, \pm \pi, \dots$ und damit $S_{k=0}(k \rightarrow 0) = 1$ sein.

Eine Funktion, welche folgende Eigenschaften hat:

- es gibt einen einfachen Pol für $k = i\lambda$
- $|S_{k=0}| = 1$ für $k > 0$ (Unitarität)
- $S_{k=0} = 1$ für $k = 0$

ist z.B. gegeben durch

$$S_{k=0}(k) = \frac{-k - iK}{k - i\lambda}$$

Die exakte Scrummatrix hat ein komplizierteres Verhalten, allerdings dieselben drei obigen Eigenschaften, welche für die Streuung bei niedrigen Energien wesentlich sind, wie wir nun noch kurz nachprüfen. Wir erhalten nämlich

$$f_{l=0} = \frac{S_{l=0} - 1}{2ik} = \frac{-2k}{2ik(k-i\chi)} = \frac{1}{-\chi - ik}$$

Der Vergleich mit (Abschnitt 6.9)

$$f_l(k) = \frac{1}{k \cot \delta_l - ik}$$

führt uns zu

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\chi = -\frac{1}{q},$$

im Übereinstimmung mit dem Resultat des vorigen Abschnitts. Durch Benutzung der Unität und Analytizität von $S_l(k, \vartheta)$ können wir also wesentliche Informationen über Streuungen rekonstruieren, auch wenn das Streupotential nicht genau bekannt ist.