

# Streutheorie

Literatur: Grawert,

Cohen-Tannoudji:

Taylor: "Scattering Theory"

## 1) Motivation

Typische Experimente der Hochenergiephysik sind Streuexperimente: Teilchen werden auf Target geschossen, oder Teilchen auf Teilchen.

Wir betrachten hier nur Potentialstreuung, d. h. Streuung von Teilchen an einem (festen) Potential.

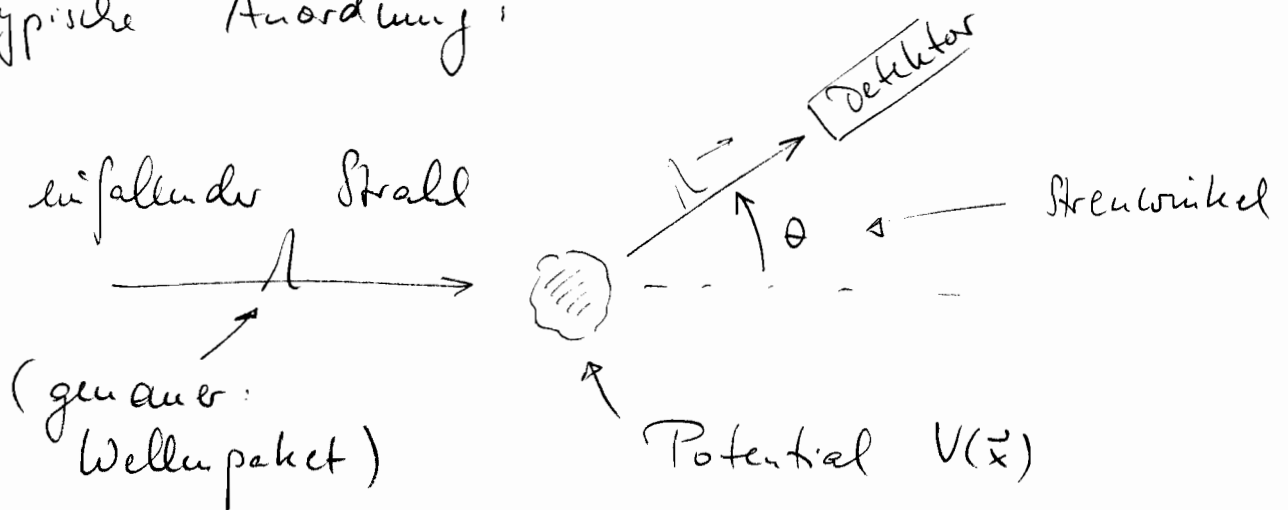
Historisch wichtigstes Beispiel:

### Rutherford-Experiment:

- $\alpha$ -Teilchen auf dünne Goldfolie
- Streuung mit hohen Impulsüberträgen ( $\approx$  großen Streuwinkeln) gefunden
- Entdeckung der Atomkerne ( $\approx$  Potential)

D.h. wird die Winkelverteilung der auslaufenden (gestreuten) Teilchen durch die Struktur des Potentials bestimmt.

Typische Anordnung:



In praktischen Fällen kann die Sache komplizierter werden als mit reiner Potentialstreuung zu beschreiben ist:

Anregung, Teilchenerzeugung / -vernichtung, Absorption etc.

→ elastische und inelastische Streuung

Potentialstreuung, wie hier zu betrachten, ist per definitionem elastisch.

Ähnliches Problem aus klassischer Mechanik bekannt. Dort: berechne Bahnkurve



In QM: berechne Entwicklung der Wellenfunktion unter Einfluß des Potentials + statistische Interpretation.

Wir werden in folgenden folgenden Annahmen machen:

- i) Betrachte nur Teilchen ohne Spin  
(nicht immer eine gute Annahme)
- ii) Betrachte nur elastische Streuung,  
d.h. Energie des gestreuten Teilchens  
erhalten
- iii) keine Wechselwirkung zwischen Teilchen  
im Strahl (→ keine Kohärenzeffekte)
- iv) Eigenschaften des Potentials  $V(\vec{x})$ .

$V(\vec{x})$  räumlich begrenzt, d.h. freie  
Teilchen dort, wo wir Strahl  
präparieren, und dort, wo wir sie  
im Detektor messen wollen.

Wir bezeichnen die Reichweite des  
Potentials mit  $R_0$ .

Technisch präziser ist für unseren  
Formalismus erforderlich (formuliert  
für  $V(\vec{x}) = V(r)$ , wie oft der Fall  
sein wird):  $r = |\vec{x}|$

- \*  $V(r) \approx O(r^{-(3+\varepsilon)})$  für  $r \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  
d.h.  $V$  fällt schneller ab als  $r^{-3}$ .
- \*  $V(r) \approx O(r^{-\frac{3}{2}+\varepsilon})$  für  $r \rightarrow 0$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  
d.h.  $V$  weniger singular als  $r^{-\frac{3}{2}}$   
am Ursprung.
- \*  $V(r)$  stetig bis auf endlich viele Stellen  
Andernfalls: keine freien Zustände  
vor und nach der Streuung, Integrale  
wie  $\int_0^\infty r^2 V(r) dr$  nicht konvergent, etc.

Beachte: Das Coulomb-Potential  $\sim \frac{1}{r}$   
fällt nicht darunter  
→ "schwierig" zu behandeln, bzw.  
nur mit großer Vorsicht.

Theoretisch besonders gut geeignet ist  
dagegen das Yukawa-Potential

$$V = A \frac{e^{-r/f}}{r},$$

und solche, die sich als Summe (oder  
auch manche, die sich als Grenzwert)  
davon schreiben lassen.

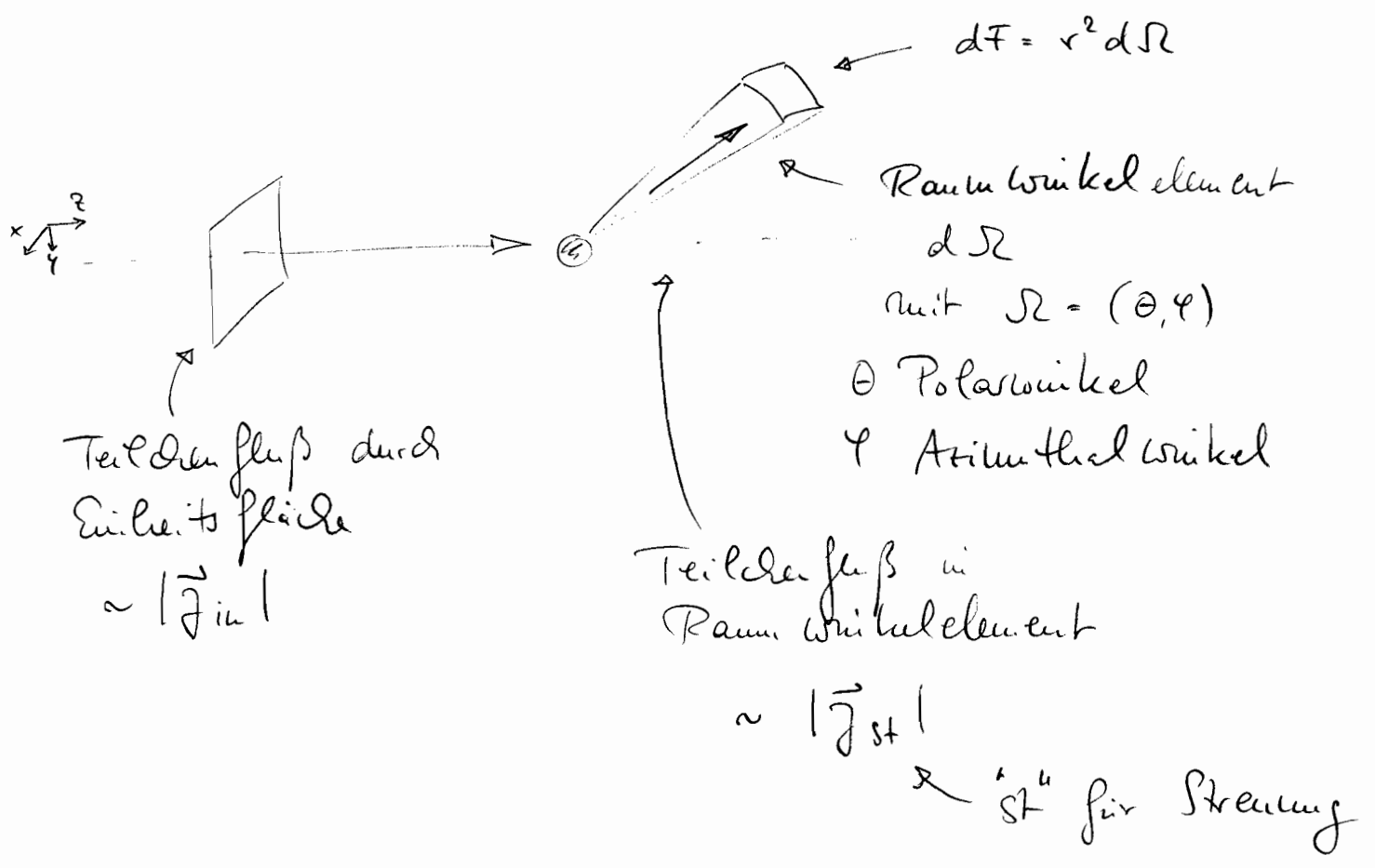
(Ursprung d. Yukawa-Pot.: Pion austausch  
zwischen Nukleonen)

Bei Potentialen mit obigen Eigenschaften (z.B. beim Yukawa-Potential) spricht man von endlicher Reichweite, obwohl mathematisch streuungsummer  $V \neq 0$  überall.

Das Coulomb-Potential kann man als Grenzwert  $A \rightarrow Z_1 Z_2 e$ ,  $a \rightarrow \infty$  des Yukawa-Potentials erhalten.

## 2) Wirkungsquerschnitt

Wir definieren den differentiellen Wirkungsquerschnitt  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  wie folgt.



Damit definieren wir

$$d\sigma = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\# \text{ der pro Zeiteinheit in } d\Omega \text{ gestreute Teilchen}}{\# \text{ der einlaufenden Teilchen pro}} \\ \text{Flächen- und Zeiteinheit}$$

Also

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \frac{|\vec{J}_{st}|}{|\vec{J}_{in}|} \cdot r^2$$

Offenbar hat  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  die Dimension Fläche.  
Typische Einheit ist "Barn",

$$1 \text{ Barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$$

Den totalen Wirkungsquerschnitt erhält man durch Winkelintegration:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) d\Omega$$

Bemerkung: Betrachte nur gestreute Teilchen!

In Vorwärtsrichtung ( $\theta=0$ ) kann man gestreute nicht von durchlaufenden Teilchen unterscheiden.

→  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta=0)$  ist nur "durch Extrapolation" meßbar!

### 3) Stationäre Streuzustände, Streuamplitude

Betrachte Hamiltonoperator

$$H = H_0 + V(\vec{x})$$

mit

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (\text{freie Bewegung})$$

Verwende ebene Wellen statt (eigentlich korrekter) Wellenpakete, da letztere deutlich komplizierter zu behandeln

→ Annahme: Streuung  $\Delta z$  im Wellenpaket größer als Ausdehnung des Potentials:  $\Delta z \gg R_0$ .

Freie Lösungen: ebene Wellen (in  $z$ -Richtung)

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = e^{ikz}, \quad k = |\vec{k}|$$

mit Energie

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$$

( $E < 0$  entspräche Bindungszuständen, die uns hier nicht interessieren)

Wir suchen dann zeitabhängige Lösung der Schrödingergleichung mit Potential,

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-iEt/\hbar}$$

mit  $\psi(\vec{x})$  stationäre Lösung von

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$$

Definiere  $u(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x})$ , so daß

$$[\Delta + k^2 - u(\vec{x})] \psi(\vec{x}) = 0$$

Die Lösung dieser Gleichung ist i.a. unendlichfach entartet (selbes  $k^2$  für jede Richtung von  $\vec{k}$ ).

→ Suche geeignete Lösung für unser Streuproblem (→ Randbedingungen).

Diese Eigenzustände  $\psi(\vec{x})$  nennen wir dann stationäre Streuzustände oder

Streu Lösungen.

Betrachte asymptotisches Verhalten von  $\psi(\vec{x})$ , um Randbedingung für Streulösung zu finden.



In der oben beschriebenen experimentellen Situation haben wir bei  $(t \rightarrow \pm \infty$  entspricht  $r \rightarrow \infty)$

$t \rightarrow -\infty$  :

einlaufende ebene Welle bei großen Abständen

→ Term der Form  $e^{ikz}$

$t \rightarrow \infty$  :

gestreuter Zustand, enthält transmittierte ebene Welle, → wieder Term  $\sim e^{ikz}$ , plus gestreute Welle.

Für gestreute Welle :

\* in gegebener Richtung Radialabhängigkeit  $\sim \frac{e^{ikr}}{r}$ ,

d.h. auslaufende Welle mit selber Energie (Faktor  $\frac{1}{r}$  kommt aus

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{ikr}}{r} = 0 \quad \text{für } r > 0, \text{ siehe unten)}$$

\* Streuung i.a. nicht isotrop

→ Abhängigkeit von Richtung  $(\theta, \varphi)$ .

Also ist  $\psi(\vec{x})$  Lösung von

$$[\Delta + k^2 - U(\vec{x})] \psi(\vec{x}) = 0$$

mit asymptotischem Verhalten

$$\left[ \psi(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

$f(\theta, \varphi)$  heißt Streuamplitude.

┌ Eigentlich haben wir  $\psi_k(\vec{x})$  und  $f_k(\theta, \varphi)$ ,  
 beide hängen von  $k$  bzw.  $E$  ab —  
 was wir aber in der Notation  
 └ unterdrücken.

#### 4) Berechnung des Wirkungsquerschnitts

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte zur Wellenfunktion  $\psi$  was allgemein

$$\vec{j}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Re} \left( \psi^* \frac{1}{i} \nabla \psi \right)$$

Damit haben wir für die einlaufende Welle  $e^{ikz}$ .

$$|\vec{j}_{in}| = \frac{\hbar k}{m}$$

Für die auslaufende Welle benutzt  
Kugelkoordinaten,  $\nabla$  in diesen hat die  
Komponenten

$$(\nabla)_r = \frac{\partial}{\partial r}$$

$$(\nabla)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

$$(\nabla)_\varphi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Damit werden die sphärischen Komponenten  
von  $\vec{J}_{st}$  (erhalten aus  $\psi = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$ )

$$(\vec{J}_{st})_r = \frac{tk}{m} \frac{1}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2$$

$$(\vec{J}_{st})_\theta = \frac{tk}{m} \frac{1}{r^3} \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} f(\theta, \varphi) \right]$$

$$(\vec{J}_{st})_\varphi = \frac{tk}{m} \frac{1}{r^3 \sin \theta} \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} f(\theta, \varphi) \right]$$

Für große  $r$  daher

$$(\vec{J}_{st})_\theta \text{ und } (\vec{J}_{st})_\varphi \ll (\vec{J}_{st})_r$$

→ gestreuter Strom fließt dominant  
in radialer Richtung

Damit wird aber der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \frac{|\vec{j}_{st}|}{|\vec{j}_{in}|} r^2 = \frac{\frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2}{\frac{\hbar k}{m}} r^2$$

d.h.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist gleich dem Betragsquadrat der Streuamplitude

5) Lippmann - Schwinger - Gleichung  
für die Streulösung

\* Greensche Funktion der Helmholtz - Gleichung

Satz: Ist  $\mathbb{D}$  ein linearer Differentialoperator und gilt

$$\mathbb{D}G(\vec{x}) = \delta(\vec{x})$$

$$\mathbb{D}\phi_0(\vec{x}) = 0$$

So heißt  $G(\vec{x})$  Greensche Funktion zu  $\mathbb{D}$  und es gilt:

$$\psi(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \int d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}') f(\vec{x}')$$

ist Lösung von

$$\mathbb{D} \psi(\vec{x}) = f(\vec{x})$$

Beweis:  $\mathbb{D} \psi(\vec{x}) = \underbrace{\mathbb{D} \psi_0(\vec{x})}_{=0} + \int d^3x' \mathbb{D} G(\vec{x} - \vec{x}') f(\vec{x}')$

$\psi_0$  homogene Lösung  $\rightarrow$

$$= \int d^3x' \delta(\vec{x} - \vec{x}') f(\vec{x}')$$

$$= f(\vec{x})$$

□

Die Gleichung

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{x}) = f(\vec{x})$$

heißt Helmholtz-Gleichung.

Die Lösung  $G(\vec{x})$  mit

$$(\Delta + k^2) G(\vec{x}) = \delta(\vec{x})$$

ist die Greensche Funktion der Helmholtz-Gl.

Es gilt (Beweis als Übung, mit  $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\vec{L}^2}{r^2}$ )

$$(\Delta + k^2) \left( -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \right) = \delta(\vec{x})$$

$$= G_{\pm}(\vec{x})$$

$G_+$  ist auslaufende Greensche Funktion,  
 $G_-$  ist einlaufende " " " "

Für unsere Randbedingungen der Lösung  
 von

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{x}) = U(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \quad (*)$$

benötigen wir  $G_+ = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r}$ .

Also ist

$$\psi(\vec{x}) = e^{ikz} + \int d^3x' G_+(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') \psi(\vec{x}')$$

Streu Lösung von (\*)

Diese Integralgleichung für  $\psi(\vec{x})$

heißt Lippmann - Schwinger - Gleichung

In folgenden schreiben wir

$$e^{ikz} = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}}$$

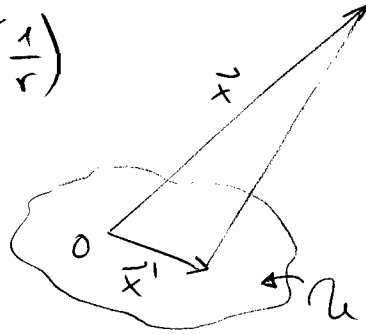
mit  $\vec{k}_i$  dem Wellenvektor der einlaufenden  
 Welle,  $|\vec{k}_i| = k$ .

Zum Integral tragen nur  $\vec{x}'$  im Bereich des Potentials bei, wo  $U(\vec{x}') \neq 0$   
 Für  $|\vec{x}| \gg R_0$  also  $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$ ,  
 d.h. wir können entwickeln

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = r - \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right)$$

und damit

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



$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r(1 + \mathcal{O}(\frac{1}{r}))} \exp\left[ ikr - ik \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right) \right]$$

$$\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\vec{n} \cdot \vec{x}'}$$

worin  $\vec{n} = \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} = \frac{\vec{x}}{r}$

Damit wird die Streulösung bei großen  $r$

$$f(\vec{x}) \rightarrow e^{ik\vec{z} \cdot \vec{x}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int d^3x' e^{-ik\vec{n} \cdot \vec{x}'} U(\vec{x}') f(\vec{x}')$$

und das heißt für die Streuamplitude

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' e^{-ik\vec{n} \cdot \vec{x}'} U(\vec{x}') f(\vec{x}')$$

$$\left( U = \frac{2m}{\hbar^2} V \right) \rightarrow = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-ik\vec{n} \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') f(\vec{x}')$$

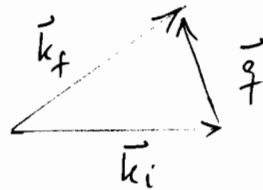
Damit haben wir aber noch keine Lösung der Lippmann-Schwinger-Gl. gefunden! Aber: wenn wir eine finden, hat sie automatisch die richtige Form für eine Streulösung.

Wir haben also

$$\psi(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} - \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}')$$

Wir definieren den Streuvektor  $\vec{q}$ ,

$$\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$$



## Allgemeine Darstellung der Lippmann-Schwinger-Gleichung

Es war in Ortsdarstellung

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' G_+(\vec{x} - \vec{x}') V(\vec{x}') \psi(\vec{x}')$$

Mit der freien Lösung

$$\phi(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$



können wir das schreiben als

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \langle \vec{x} | G_+ | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | V \psi \rangle$$

Es ist aber (vgl. Pfadintegrale)

$$\frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{x} | G_{\pm} | \vec{x}' \rangle = - \langle \vec{x} | \frac{1}{H_0 - E_{\vec{x}} \pm i\varepsilon} | \vec{x}' \rangle$$

→ Wir erhalten Lippmann-Schwinger-Gl. in abstrakter Form als (wir brauchen hier  $G_+$ , analoges gilt aber für  $G_-$ )

$$\boxed{|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V |\psi^\pm\rangle}$$

bzw. in Impulsdarstellung

$$\langle \vec{p} | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - \frac{p^2}{2m} \pm i\varepsilon} \langle \vec{p} | V \psi^\pm \rangle$$

Alle drei Formen der Lippmann-Schwinger-Gleichung werden oft in der Literatur verwendet.

## 6) Bornsche Reihe

Wir können die Lippmann-Schwinger-Gl. störungstheoretisch behandeln, wenn das Potential  $V$  "klein" ist. Dazu führen wir einen Buchhaltungsparameter  $\lambda$  als Koeffizient des Potentials ein und entwickeln die Lösung  $\psi$  in  $\lambda$ :

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} - \frac{\lambda}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} U(\vec{x}') \psi(\vec{x}')$$

Mit dem Ansatz

$$\psi = \psi_0 + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i \psi_i$$

Einsetzen ergibt

$$\begin{aligned} \psi_0(\vec{x}) + \lambda \psi_1(\vec{x}) + \dots &= \\ &= e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} - \frac{\lambda}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} U(\vec{x}') (\psi_0(\vec{x}') + \lambda \psi_1(\vec{x}') + \dots) \end{aligned}$$

Durch Koeffizientenvergleich:

$$\psi_0(\vec{x}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}}$$

$$\psi_1(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} U(\vec{x}') e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}'}$$

etc.

— Bornsche Reihe

Anderes ausgedrückt:

$$\psi_n(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} u(\vec{x}') \psi_{n-1}(\vec{x}')$$

d.h. wir können die Integralgleichung durch Iteration lösen.

Aus der Reihenentwicklung von  $f(\vec{x})$  erhalten wir auch eine Reihenentwicklung für die Streuamplitude  $f(\theta, \varphi)$ .

Der erste Term dieser Reihe wird als

erste Bornsche Näherung oder auch einfach als "Bornsche Näherung" bezeichnet:

$$f(\theta, \varphi) \approx f^{(1)}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{x}'} u(\vec{x}') e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}'}$$

$$\left( \vec{k}_i = \vec{k}_f \right) \rightarrow = -\frac{2m}{4\pi \hbar^2} \int d^3x' e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}')$$

Also

$$\boxed{f^{(1)}(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int d^3x' e^{-i\vec{q} \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}')} \\ = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} V\left(\frac{\vec{q}}{\hbar}\right) =: V\left(\frac{\vec{q}}{\hbar}\right)$$

Für ein kugelsymmetrisches Potential,  
 $V(\vec{r}) = V(r)$ , findet man ( $\rightarrow$  Übungen)

$$f^{(1)}(\theta, \varphi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty dr V(r) r \sin(qr)$$

### Eigenschaften der Bornschen Näherung

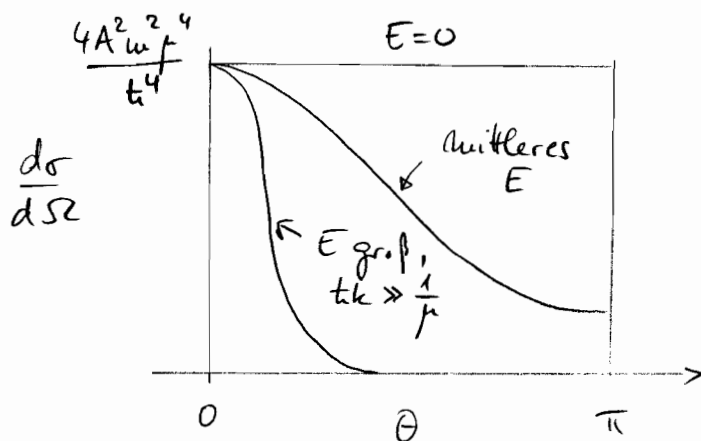
#### \* Vorwärts - Amplitude

Für  $\vec{k}_f = \vec{k}_i$ , d.h.  $\vec{q} = 0$ , ist

$$f^{(1)}(\theta=0, \varphi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 V(r) dr$$

unabhängig von der Energie.

Für das Yukawa-Potential  $V(r) = A \frac{e^{-r/\lambda}}{r}$   
 findet man z.B. für  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$



Beachte: Vorwärtsamplitude in Bornscher Näherung ist reell.

→ Später wichtig beim optischen Theorem  
 ("Bornsche Näherung verletzt Unitarität")

\* Für verschwindende Energie,

$$q = 0, \quad |\vec{k}_f| = |\vec{k}_i| = 0$$

gilt

$$f^{(1)}(\theta, \varphi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 V(r) dr,$$

d.h.  $f^{(1)}$  ist dann unabhängig von  $\theta$ . (Siehe auch Skizze oben.)

→ Die Streuung ist isotrop. Das gilt bei verschwindender Energie auch für die exakte Amplitude  $f(\theta, \varphi)$

Vorsicht: Die Bornsche Näherung ist aber für kleine Energie i.a. nicht gut.

## \* Vorwärts - Peak

Für großes  $q$  verschwindet die Born - Amplitude  $f^{(1)}$ , wie man am Faktor  $\frac{\sin(qr)}{q}$  darin erkennt.

Da aber

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2},$$

fällt die Amplitude bei hohen Energien, wenn  $\theta$  von 0 nach  $\pi$  anwächst, siehe auch Skizze oben.

Je höher die Energie, desto schneller fällt die Amplitude ab.

→ Bei sehr hohen Energien bleibt nur ein schmales Peak in Vorwärtsrichtung.

( - wie man intuitiv erwarten würde - )

Beachte: bei hohen Energien ist Bornsche Näherung i.a. recht gut.

Schließlich noch eine Bemerkung zur Struktur der höheren Terme in der

Bornsche Reihe:

Wir haben

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) = & e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} + \int d^3x' G_+(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}'} \\ & + \int d^3x' \int d^3x'' G_+(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') G_+(\vec{x}' - \vec{x}'') U(\vec{x}'') e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}''} \\ & + \dots \end{aligned}$$

Dies ist genau dieselbe Formel, die wir auch in der Pfadintegralformulierung der QM gefunden hatten!

## 7) Partialwellenanalyse

Für das Zentralpotential  $V(\vec{x}) = V(r)$  ist der Bahndrehimpuls  $\vec{L}$  eine Konstante der Bewegung.

→ Man kann stationäre Streuzustände mit wohldefinierten Drehimpuls finden.

Die simultanen Eigenfunktionen  $\varphi_{klm}$  zu  $L^2$ ,  $L_z$  und  $H$  mit Eigenwerten  $l(l+1)\hbar^2$ ,  $m\hbar$  und  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  heißen Partialwellen.

Ihre Winkelabhängigkeit ist durch Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}$  bestimmt,  $V(r)$  beeinflusst nur die Radialwellenfunktion, wir erwarten also Kugelwellen.

Wir betrachten zunächst freie Kugelwellen, bezeichnet mit  $\varphi_{klm}^{(0)}$ .

Mit dem Separationsansatz

$$\varphi_{klm}^{(0)}(\vec{x}) = R_{kl}^{(0)}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

bleiben wir für  $R_{kl}^{(0)}$

$$E = E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r} \right] R_{kl}^{(0)}(r) = E R_{kl}^{(0)}(r)$$

Wir setzen  $R_{kl}^{(0)}(r) = \frac{u_{kl}^{(0)}(r)}{r}$ ,

so daß

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] u_{kl}^{(0)}(r) = 0$$

Für im Ursprung reguläre Lösungen benötigen wir  $u_{kl}^{(0)}(0) = 0$ .



Für große  $r$  wird der Term  $-\frac{l(l+1)}{r}$  klein gegen  $k^2$ , so daß

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{ke}^{(0)}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{=} 0$$

mit der Lösung  $\sim e^{\pm ikr}$  für große  $r$ , entsprechend aus- bzw. einlaufenden Kugelwellen  $\mathcal{R}_{ke}^{(0)}$ .

Um exakte (und nicht nur asymptotische) Lösungen zu finden, ist es günstig, die Gleichung für  $\mathcal{R}_{ke}^{(0)}(r)$  zu betrachten,

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r} + k^2 \right) \mathcal{R}_{ke}^{(0)}(r) = 0.$$

Diese ist äquivalent zur Besselschen Differentialgleichung.

⇒ Allgemeine Lösungen sind sphärische Hankelfunktionen  $h_l^{(\pm)}$

$$h_l^{(\pm)}(x) = (-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{e^{\pm ix}}{x}$$

(Aus gewöhnlicher Differentialgleichung 2. Ordnung resultieren zwei linear unabhängige Lösungen)

Aus den sphärischen Hankelfunktionen läßt sich eine im Ursprung reguläre Lösung und eine dort singuläre Lösung erhalten, so daß man die allgemeine Lösung schreiben kann als

$$R_{ke}^{(0)}(r) = A j_e(kr) + B n_e(kr),$$

wobei

$j_e =$  sphärische Besselfunktion

$n_e =$  sphärische Neumannfunktion

Die  $j_e$  erhält man als

$$j_e(x) = \frac{1}{2i} (h_e^{(+)}(x) - h_e^{(-)}(x)).$$

Die  $j_e$  sind regulär im Ursprung,

$$j_e \sim \frac{x^e}{(2l+1)!!} \quad \text{für } r \rightarrow \infty,$$

die  $n_e$  dagegen singulär

$$n_e \sim - \frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}$$

Explizit für  $l=0,1$ :

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad n_0(x) = - \frac{\cos x}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = - \frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$$

→ Für uns sind nur die im Ursprung regulären je relevant.

Allgemein sind die je gegeben durch

$$j_\ell(x) = (-1)^\ell x^\ell \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\sin x}{x}$$

Die normierten freien Kugelwellen sind dann

$$\varphi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

Mit der Orthogonalitätsrelation

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{k\ell m}^{(0)} | \varphi_{k'\ell'm'}^{(0)} \rangle &= \frac{2}{\pi} k k' \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(kr) j_{\ell'}(kr) * \\ &\quad * \int d\Omega Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) \\ &= \delta(k-k') \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \end{aligned}$$

Das asymptotische Verhalten der sphärischen Besselfunktionen für  $r \rightarrow \infty$  ist

$$j_\ell(x) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right),$$

und damit für die freie Kugelwelle  $\varphi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{x})$

$$\varphi_{k\ell m}^{(0)}(r, \theta, \varphi) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr} e^{-i\frac{\ell\pi}{2}} - e^{-ikr} e^{i\frac{\ell\pi}{2}}}{2ikr}$$

$\varphi_{\text{ken}}^{(0)}$  ist also asymptotisch Überlagerung von einlaufender und auslaufender Kugelwelle mit Phasenverschiebung  $\pi$ .

Die freien Kugelwellen bilden ein vollständiges System. Wir können daher die ebene Welle  $e^{ik \cdot \vec{x}}$  in Kugelwellen entwickeln.

### Entwicklung der ebenen Welle in freie Kugelwellen

$e^{ik \cdot \vec{x}}$  hängt nicht vom Winkel  $\varphi$  ab  
 → erwartet nur Beiträge mit  $m=0$ .

Man kann zeigen:

$$\begin{aligned} e^{ik \cdot \vec{x}} &= e^{ikr \cos \theta} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_{l0}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Es ist aber

$$Y_{l0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

mit Legendre - Polynom  $P_l$

Die Legendre - Polynome sind definiert durch

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell,$$

mit den Eigenschaften

$$P_\ell(1) = 1$$

$$P_\ell(-x) = (-1)^\ell P_\ell(x)$$

$$\int_{-1}^1 dx P_\ell(x) P_{\ell'}(x) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'}$$

Damit erhalten wir für  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$

$$\| e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta), \quad \|$$

wobei die Summe über die Drehimpulse  $\ell$  läuft.

Asymptotisch war für  $r \rightarrow \infty$

$$j_\ell(x) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \\ = \frac{1}{2ix} (-i)^\ell (e^{ix} - (-1)^\ell e^{-ix})$$

und daher

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{1}{2i\ell r} (e^{i\ell r} - (-1)^\ell e^{-i\ell r}) P_\ell(\cos\theta)$$

## Partialwellen im Potential $V(r)$

Betrachte kugelsymmetrisches Potential  $V(r)$ .

Sei  $\vec{k} = (0, 0, k)$ , d.h. das Problem ist rotationssymmetrisch um die  $z$ -Achse.

→ Die Streuamplitude  $f(\theta, \varphi)$  ist von  $\varphi$  unabhängig,

$$f(\theta, \varphi) = f(\theta)$$

Wir können dann  $f(\theta)$  in Legendre-Polynome entwickeln (da diese ein vollständiges System bilden), d.h.

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta)$$

mit Koeffizienten  $f_l$ .

Das asymptotische Verhalten der Streulösung war aber

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Setzen wir hier die Entwicklung von  $f(\theta)$  nach den  $P_l$  und die oben gefundene Asymptotik der ebenen Welle ein, so wird

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{x}) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2ikr} (e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}) P_l(\cos \theta) \\
 &\quad + \frac{1}{r} e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta) \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2ikr} \left[ (1 + 2ik f_l) e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right] P_l(\cos \theta)
 \end{aligned}$$

Worin die einzelnen Summanden in der Summe über  $l$  den einzelnen Drehimpulsen entsprechen.

Für  $V(\vec{x}) = V(r)$  ist aber der Drehimpuls bei der Streuung erhalten.

→ Für jedes  $l$  muß der Betrag des Faktors der einlaufenden Kugelwelle gleich dem der auslaufenden Kugelwelle sein ( $\leftrightarrow$  Wahrscheinlichkeitserhaltung!)

Daher

$$|1 + 2ik f_l| = |(-1)^l| = 1,$$

d. h.

$$1 + 2ik f_l = e^{2i\delta_l}$$

bzw.

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = e^{i\delta_l} \cdot \frac{\sin \delta_l}{k}$$

Die  $\delta_l$  heißen Streuphasen.

Wir können dann die Streuamplitude durch die Streuphasen ausdrücken.

$$\| f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad \|$$

Dabei wird

$$T_l = e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

oft als Partialwellenamplitude bezeichnet.

Die Streuphasen enthalten die gesamte Information über die Streuung.

Mit obiger Streuamplitude erhalten wir für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \times \\ \times \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \sin \delta_{l'} P_{l'}(\cos \theta)$$

und für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad \text{wegen der Orthogonalität}$$

der Legendre-Polynome (beachte:  $d\Omega$  enthält  $d\cos\theta$ )

$$\| \sigma_{\text{tot}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad \|$$

$$\text{mit } \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad \|$$



Offenbar gilt die sog. Unitaritätsbedingung für die Partialwellen,

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1).$$

### Optisches Theorem

Aus obiger Formel für  $f(\theta)$  folgt mit  $e^{i\delta_l} = \cos \delta_l + i \sin \delta_l$  und  $P_l(1) = 1$ .

$$\begin{aligned} \text{Im } f(\theta=0) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \\ &= \frac{k}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \\ &= \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}} \end{aligned}$$

d.h.

$$\boxed{\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(\theta=0)}$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist  $\frac{4\pi}{k}$  mal dem Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude.

Dieses optische Theorem ist Konsequenz der Unitarität (bzw. Wahrscheinlichkeits-erhaltung, die wir oben benutzt haben).

Bemerkung:

In Bornscher Näherung ist das optische Theorem nicht erfüllt, denn offenbar gilt für reelles  $V(r)$

Im  $f^{(1)} = 0$ ,  
wie man erkennt an

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^{\infty} dr \, r V(r) \sin(qr).$$

Es ist aber

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Born}} = |f^{(1)}|^2 \neq 0.$$

Das optische Theorem kann aber in dieser Näherung auch gar nicht gelten: Die Reihe für  $f$  beginnt in  $O(V^1)$ , die für  $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2$  aber in  $O(V^2)$ .

Bedeutung der Streuphasen

In der Situation mit Potential  $V(r)$  wollen wir gemeinsame Eigenfunktionen  $\psi_{k\ell m}(\vec{x})$  zu  $H$ ,  $L^2$  und  $L_z$  bestimmen.

Mit dem Separationsansatz

$$\psi_{klm}(\vec{x}) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{u_{kl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

bleiben wir die Radialgleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)}_{\text{effektives Potential}} \right] u_{kl}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_{kl}(r)$$

Mit der Randbedingung  $u_{kl}(0) = 0$ .

Für große  $r$  gilt daher

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{kl}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} 0$$

Aus  $u_{kl}(0) = 0$  folgt daraus eine eindeutige Lösung bei großen  $r$  von der Form

$$u_{kl}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} C_e \sin(kr - \beta_e)$$

Die freie Lösung war

$$u_{kl}^{(0)}(r) = C_e \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

Wir schreiben daher

$$u_{kl}(r) \approx C_e \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_e\right)$$

Darin ist  $\delta_e$  gerade unsere Streuphase von oben, wie man durch Vergleich der asymptotischen Amplituden findet.

Die Streuphase  $\delta_e$  ist also die Phasenverschiebung der zu  $l$  gehörenden Kugelwelle gegenüber der freien Lösung bei großen  $r$ .

### Berechnung der Streuphasen

- \* In einigen Fällen kann man die Streuphasen analytisch berechnen, z.B. für das Potential einer "harten Kugel",  $V(r) = V_0 \theta(R_0 - r)$ .
- \* Eine numerische Bestimmung der Streuphasen ist durch numerische Lösung der Radialgleichung möglich: Man sucht eine Lösung mit dem Verhalten  $r^l$  bei  $r=0$  und findet bei großen  $r$  dann die Phasenverschiebung  $\delta_e$ .

- \* Für schwache Potentiale kann man die Streuphasen näherungsweise bestimmen, z.B. in Bornischer Näherung für die Streuphasen:

Man kann zeigen, daß in Bornischer Näherung für  $V(\vec{x}) = V(r)$

$$\| \sin \delta_e \approx -\frac{2m}{\hbar^2} k \int_0^{\infty} dr r^2 |j_e(kr)|^2 V(r), \quad \|$$

und für hinreichend schwaches  $V$  ist  $\delta_e$  klein, d.h.  $\delta_e \approx \sin \delta_e$ .

- \* Brauchen wir alle (d.h. unendlich viele) Streuphasen?

Nein! Dies erkennt man z.B. mit Hilfe eines semiklassischen Arguments:

Für eine Reichweite  $R_0$  von  $V$  ist der größte Drehimpuls, der noch mit  $V$  in Berührung kommt, gegeben durch

$$\hbar k R_0 = \hbar l_{\max}$$

bzw.

$$l_{\max} = k R_0.$$

- \* Insbesondere gilt für Niederenergiestreuung,  
d.h. für  $k \rightarrow 0$ ,

$$f(\theta) \rightarrow \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0$$

und

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2},$$

d.h. wir haben reine s-Wellenstreuung.

- \* Falls  $l_{\max} = 1$ , so wird

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left[ \sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1) \cos \theta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta \right]$$

d.h. von der Form

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = a + b \cos \theta + c \cos^2 \theta,$$

also ein Polynom vom Grad  $2l_{\max}$ .

Umgekehrt kann man  $l_{\max}$  auch aus den Daten bestimmen: falls exp.

Daten gut beschreibbar durch ein Polynom vom Grad  $2L$ , so ist

$$l_{\max} = L.$$

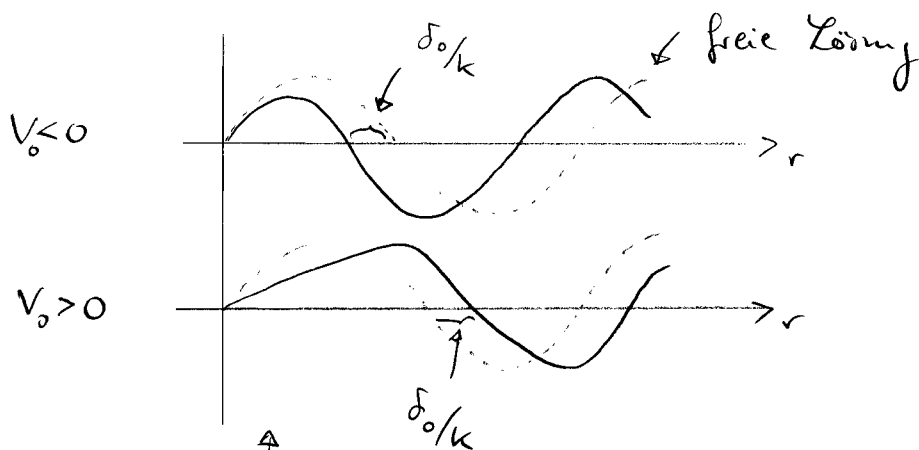
\* Für die Streuung am Kastenpotential  
 $V = V_0 \theta(R_0 - r)$  findet man:

$V_0 < 0$  (Potential attraktiv)

→  $\delta_0 > 0$ , d.h. Welle "nach innen gezogen"

$V_0 > 0$  (Potential repulsiv)

→  $\delta_0 < 0$ , d.h. Welle "nach außen gedrückt".



Bei kleinen  $r$  ist die Sinusform durch das Potential deformiert ( $\leftrightarrow$  exakte Lösung der Radialgleichung).

Diese Beobachtung lässt sich verallgemeinern:  
 Ist  $V(r)$  im Mittel positiv (negativ),  
 so wird  $\delta_e$  kleiner (größer) Null.

Dies erkennt man auch an der Formel  
 für  $\delta_e$  in der Bornschen Näherung.

\* Es ist möglich, daß das Potential so stark attraktiv ist, daß die  $l=0$ -Partialwelle um  $\delta_0 = \pi$  nach innen gezogen wird.

Dann ist aber  $\sin \delta_0 = 0$ , d.h.  $f_0$  verschwindet, und es gilt

$$\sigma_{l=0} = 0,$$

und das trotz eines starken Potentials!

Für kleine Energie, wo nur  $l=0$  beiträgt, haben wir dann perfekte Transmission!

Dies nennt man den Ramsauer-Townsend-Effekt, der experimentell auch beobachtet wurde.