

Quantenmechanik II

Vorlesung im Wintersemester 1997/98

Prof. JULIUS WESS

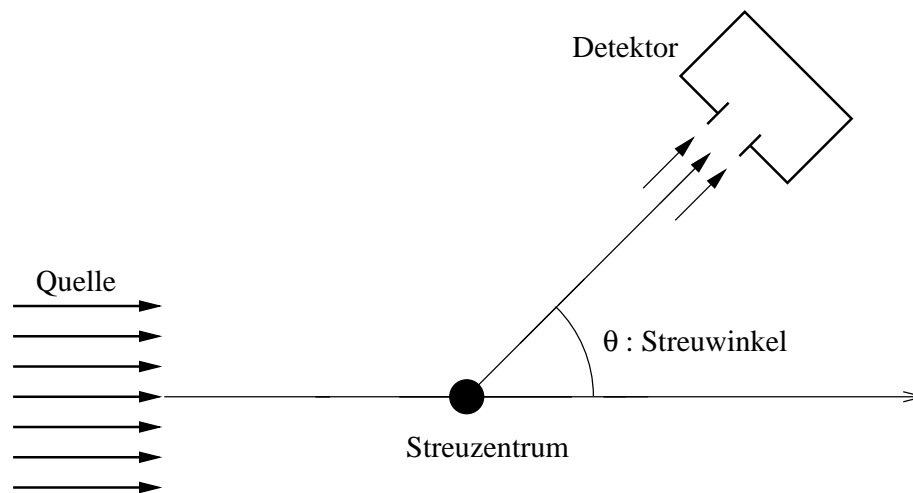
*Sektion Physik der Ludwig-Maximilians-Universität
Theresienstr. 37, D-80333 München*

Streutheorie

Unser Wissen über den Aufbau der Materie beruht zum größten Teil auf Ergebnissen von Streuexperimenten. Hier wollen wir nun Streutheorie im Rahmen der Quantenmechanik betrachten.

Den Experimenten gemeinsam ist das Vorhandensein einer Quelle für einen Teilchenstrahl, der dann an einem Streuzentrum gestreut wird. Mit Hilfe von Detektoren werden schließlich die in verschiedene Richtungen gestreuten Teilchen gemessen.

Schematisch sieht dies so aus:



Dabei denken wir uns die Quelle ins Unendliche verschoben und den einlaufenden Strahl als ebene Welle. Auch die Detektoren seien ins Unendliche verschoben, und die auslaufende Welle stellen wir uns als Kugelwelle vor. Dies ergibt ein statisches Bild einer homogen einlaufenden Welle und ebenfalls einer statischen auslaufenden Kugelwelle. Daher scheint die Behandlung dieses Systems mit der stationären Schrödingergleichung sinnvoll.

1 Stationäre Streutheorie

Die zeitabhängige Schrödingergleichung wird bei zeitunabhängigem Potential durch Separation der Zeit zur zeitunabhängigen oder stationären Wellengleichung.

Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = H\Psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.1)$$

Separation der Zeit:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\mathbf{x}) \quad (1.2)$$

Stationäre Schrödingergleichung für Hamiltonoperatoren, die nicht von der Zeit abhängen:

$$H\psi = E\psi \quad (1.3)$$

Wir nehmen an, daß sich der Hamiltonoperator aus dem kinetischen Teil und einem zeitunabhängigen Potential zusammensetzt, wobei der Einfachheit halber zunächst auch angenommen wird, daß das Potential bei großen Abständen ($r > R$) verschwindet.

$$H = -i\hbar^2 \frac{\Delta}{2m} + V(\mathbf{x}), \quad V(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{für} \quad r = |\mathbf{x}| = \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}} > R. \quad (1.4)$$

Dies entspricht recht gut realistischen physikalischen Systemen.

Die einlaufende Welle kommt aus einer Quelle, die außerhalb der Reichweite des Potentials liegt. Sie wird demnach durch eine Lösung der freien Schrödingergleichung beschrieben.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{ein} = E\psi_{ein} \quad (1.5)$$

Wir nehmen an, daß die Quelle eine ebenen Welle präpariert:

$$\psi_{ein} = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (1.6)$$

Aus (1.5) folgt:

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (1.7)$$

wobei $\hbar\mathbf{k}$ den Impuls der Welle darstellt.

Aus der Interpretation der Quantenmechanik wissen wir, daß

$$\rho = \Psi^* \Psi = A^* A \quad (1.8)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte ist, ein Teilchen an dem jeweiligen Ort vorzufinden. Diese Teilchendichte ist die Zahl der Teilchen per Volumeneinheit. A hat demnach die Dimension $[l^{-3/2}]$.

Den Teilchenstrom, d.h. die Zahl der pro Zeit und Flächeneinheit einlaufenden Teilchen, erhalten wir aus der Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$S_i = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x^i} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x^i} \psi \right) = \frac{\hbar k_i}{m} A^* A = v_i A^* A \quad (1.9)$$

wobei $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m}$ die Geschwindigkeit der einlaufenden Teilchen ist. Die Zahl n der pro Zeit und Flächeneinheit durch eine zur Geschwindigkeit senkrechten Fläche einlaufenden Teilchen ergibt sich zu $n = v A^* A$ und hat die Dimension $[l^{-2}t^{-1}]$. Die Teilchendichte $A^* A$ und der Impuls $\hbar\mathbf{k}$ sind die charakteristischen Größen für den von der Quelle erzeugten Teilchenstrom.

Die Detektoren stehen außerhalb der Reichweite des Potentials. Für die auslaufende Kugelwelle ist wiederum die freie Schrödingergleichung zuständig.

Die Zahl der in einen Winkelbereich $d\Omega$ gestreuten Teilchen dN wird proportional zur Fläche $r^2 d\Omega$ sein. Um einen konstanten Teilchenfluß in einen solchen Bereich zu erhalten, müssen wir annehmen, daß die Wellenfunktion wie $\frac{1}{r}$ abfällt. Wir suchen also eine Lösung der Gleichung (1.5) mit diesen Randbedingungen bei großem Radius r .

In Kugelkoordinaten:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi - \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \psi = E \psi \quad (1.10)$$

Die für $r \rightarrow \infty$ führenden Terme genügen der sich aus (1.10) für $\psi = \frac{1}{r} \chi$ ergebenden Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \chi = E \chi \quad (1.11)$$

mit der Lösung:

$$\chi = f(\theta, \varphi) e^{ikr}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.12)$$

Den Term mit e^{-ikr} haben wir weggelassen, da er eine einlaufende Kugelwelle darstellt. Dies folgt aus dem Wahrscheinlichkeitsstromvektor (1.9).

Das Flächenelement senkrecht zum Radius hat die Richtung $\frac{\mathbf{x}}{r}$. Die Zahl der pro Zeit und Winkeleinheit auslaufenden Teilchen ist demnach gegeben durch

$$\begin{aligned} dN &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x^i} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x^i} \psi \right) \frac{x^i}{r} r^2 d\Omega \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\partial \psi^*}{\partial r} \psi \right) r^2 d\Omega \\ &= A^* A v |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (1.13)$$

Dies ergibt sich durch Einsetzen von (1.12) für den bei $r \rightarrow \infty$ noch beitragenden Term. Da dN die Dimension $[t^{-1}]$ haben muß (Winkel sind dimensionslos), ergibt sich die Dimension von $|f(\theta, \varphi)|^2$ zu $[l^2]$.

Unser Streuproblem legt es also nahe, eine Lösung der Schrödingergleichung (1.3) zu suchen, die sich asymptotisch (für $r \rightarrow \infty$) verhält wie:

$$\psi = A \left\{ e^{ikz} + \frac{1}{r} f(\theta, \varphi) e^{ikr} \right\} \quad \text{für } r \rightarrow \infty \quad (1.14)$$

Die einlaufende Welle wurde in die z -Richtung gelegt. Zu bemerken ist, daß der erste Term, die einlaufende ebene Welle, auch einen Anteil für die in die Vorwärtsrichtung auslaufende, ungestreute Welle enthält. Ein entsprechender Anteil im zweiten Term, der auslaufenden Kugelwelle, muß dafür sorgen, daß bei elastischer Streuung die Gesamtteilchenzahl erhalten bleibt.

Gemessen wird mit der besprochenen Versuchsanordnung der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma$, definiert als:

$$d\sigma = \frac{dN}{n} = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (1.15)$$

Er hat demnach die Dimension einer Fläche und ist durch das Absolutquadrat der Streuamplitude $f(\theta, \varphi)$ gegeben. Der Wirkungsquerschnitt hängt von der Energie der einlaufenden Teilchen und dem Potential ab, nicht jedoch von der speziellen Teilchenzahldichte.

Integrieren wir über den gesamten Raumwinkel, so erhalten wir den totalen Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma = \int d\sigma = \int |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (1.16)$$

Zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts haben wir die Schrödingergleichung (1.3) mit den Randbedingungen (1.14) zu lösen, genauso wie für die Berechnung der gebundenen Zustände die Schrödingergleichung mit den Randbedingungen $\psi \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$ zu lösen ist.

Da wir für die auslaufende Welle eine Kugelwelle angesetzt haben, ist es naheliegend, die Schrödingergleichung (1.3) auch in Kugelkoordinaten zu lösen.

2 Elastische Streuung, Partialwellenzerlegung

Um das einfachere Problem zuerst zu betrachten, nehmen wir an, daß das Potential radialsymmetrisch ist, legen die Einfallrichtung in die z -Achse und entwickeln nach Legendrefunktionen.

Zur Erinnerung:

$$P_l(1) = 1, \quad \int_0^\pi P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (2.1)$$

Die ebene Welle hat folgende Zerlegung:

$$e^{ikr \cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \quad (2.2)$$

Die sphärische Besselfunktion $j_e(kr)$ hat dabei für $r \rightarrow \infty$ folgendes asymptotische Verhalten:

$$j_l(kr) \rightarrow \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) \quad (2.3)$$

Dies ist im Einklang mit der allgemeinen Form der Lösungen der Gleichung (1.11), die die asymptotische Form der Wellenfunktion bestimmt. Dabei kann man zuerst die Wellenfunktion nach Drehimpulseigenfunktionen (Kugelflächenfunktionen) entwickeln

und erhält dann für jedes l asymptotisch eine Gleichung der Form (1.11). Die allgemeine Lösung für festes l kann geschrieben werden als:

$$\chi_l = \alpha_l \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l) \quad (2.4)$$

wobei die Phase ϑ_l im Einklang mit (2.3) angesetzt wurde. Um auch mit (2.2) im Einklang zu sein, schreiben wir die asymptotische Form der allgemeinen Lösung der Schrödingergleichung wie folgt:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l a_l \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l) P_l(\cos \theta) \quad (2.5)$$

Die Konstanten a_l sind die Amplituden der Partialwellen, ϑ_l nennt man partielle Streuphasen. Allgemein könnten die Streuphasen komplexe Zahlen sein. Wir werden gleich zeigen, daß sie bei einer elastischen Streuung reell sein müssen.

Wir vergleichen (2.5) mit (1.14), da ja die allgemeine Lösung (2.5) unserem Streuproblem angepaßt werden muß:

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l a_l \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l) P_l(\cos \theta) \\ &= A \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) P_l(\cos \theta) + \frac{1}{r} f(\theta) e^{ikr} \right\} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Wegen der Rotationssymmetrie hängt f nur vom Polarwinkel θ ab.

Als nächstes vergleichen wir die beiden Seiten dieser Gleichung für die e^{-ikr} und e^{ikr} Anteile.

Für e^{-ikr} folgt:

$$A e^{+i\vartheta_l} = a_l \quad (2.7)$$

und für e^{ikr} :

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\vartheta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (2.8)$$

Die Bedeutung der Streuphasen ist hier klar ersichtlich. Verschwinden die Streuphasen, so bleibt die Welle eine ebene Welle, und es findet keine Streuung statt. Die Kenntnis aller Streuphasen ist gleichbedeutend mit der Kenntnis der Streuamplitude.

Wir zeigen nun, daß bei einer elastischen Streuung die Streuphasen reell sein müssen. Wir schreiben nochmals die Gesamtwellenfunktion, die sich aus einlaufender und auslaufender Welle zusammensetzt gemäß (2.5) und (2.7):

$$\psi = A \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\vartheta_l} \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l) P_l(\cos \theta) \quad (2.9)$$

Bei einer elastischen Streuung müssen bei gleich bleibender Energie durch eine geschlossene Kugelfläche gleich viele Teilchen ein- wie auslaufen. Der gesamte Fluß, integriert über eine Kugelfläche, muß demnach Null ergeben. Setzen wir (2.9), also die

gesamte Wellenfunktion von ψ , in der ersten Zeile von (1.13) ein, integrieren über den gesamten Raumwinkel und berücksichtigen die Orthogonalitätsrelation (2.1), so erhalten wir asymptotisch ($r \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} & \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l^*) \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l) \\ & - \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l^*) \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l) = 0 \end{aligned} \quad (2.10)$$

oder, gleichbedeutend:

$$\tan(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l^*) = \tan(kr - \frac{1}{2}l\pi + \vartheta_l) \quad (2.11)$$

Diese Gleichung ist nur für reelle Streuphasen ($\vartheta_l^* = \vartheta_l$) erfüllbar.

Um den gesamten Wirkungsquerschnitt zu berechnen, verwenden wir (2.1):

$$\begin{aligned} \sigma &= 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \vartheta_l \end{aligned} \quad (2.12)$$

Der Beitrag jeder Partialwelle zum totalen Wirkungsquerschnitt ist demnach durch $\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)$ beschränkt.

Wir erwarten, daß der totale Wirkungsquerschnitt durch die Amplitude in der Vorwärtsrichtung bestimmt ist, da ja Teilchenzahlerhaltung gilt und alle gestreuten Teilchen von der einlaufenden ebenen Welle herkommen. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} f(0) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{k} (2l+1) e^{i\vartheta_l} \sin \vartheta_l \\ f(0) - f^*(0) &= \frac{2i}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \vartheta_l \end{aligned} \quad (2.13)$$

Vergleichen wir dies mit (2.12), so erhalten wir das "optische Theorem":

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) \quad (2.14)$$

Es ist eine der wenigen Formeln, in der die Amplitude linear in einer physikalisch messbaren Größe - wie hier im totalen Wirkungsquerschnitt - auftritt. Es handelt sich dabei um eine Interferenz der beiden Anteile von (1.14), der einlaufenden und der gestreuten Welle.

Bisher haben wir uns nur mit der asymptotischen Form der Wellenfunktion auseinandergesetzt und haben noch keinerlei Schritte unternommen, um bei nichtverschwindendem Potential die Schrödingergleichung wirklich zu lösen. Dies ist die eigentlich schwierige Aufgabe in unserer Behandlung der Streutheorie und kann nur für wenige Potentiale wirklich geschlossen durchgeführt werden. Für die meisten Fälle sind wir auf Näherungsverfahren angewiesen. Dem gebräuchlichsten dieser Verfahren, der Störungstheorie, wollen wir uns jetzt zuwenden.

3 Greensche Funktionen und Störungstheorie

Anders als bei der Berechnung der Energieeigenfunktionen ist beim Streuproblem der Energieeigenwert vorgegeben. Die Quelle liefert einen Strahl mit fester Energie, die sich, da wir ja eine elastische Streuung behandeln, nicht ändert. Wir müssen demnach die Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi = E\psi \quad (3.1)$$

bei vorgegebenem E und mit den Randbedingungen (1.14) lösen. Mit $U = \frac{2m}{\hbar^2}V$ und $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ wird aus (3.1):

$$(\Delta + k^2)\psi = U\psi \quad (3.2)$$

Hier bietet sich nun die Methode der Greenschen Funktionen zur Lösung dieser Gleichung an.

Die Greensche Funktion ist definiert als Lösung der Gleichung:

$$(\Delta + k^2)G_0(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) \quad (3.3)$$

Eine Lösung dieser inhomogenen Gleichung ist natürlich nur bis auf eine Lösung der homogenen Gleichung festgelegt. Dies gibt uns die Möglichkeit, die Lösungen vorgegebenen Randbedingungen anzupassen. Haben wir eine Lösung von (3.3), so können wir die Differentialgleichung (3.2) in eine Integralgleichung umschreiben:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \int d^3x' G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}')U(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}') \quad (3.4)$$

wobei ψ_0 eine Lösung der homogenen Gleichung und G_0 die freie Greensche Funktion ist. Diese Form der Gleichung bietet sich nun für eine Störungsrechnung an, in der wir nach Potenzen des Potentials entwickeln - wir stellen uns das Potential multipliziert mit einem "kleinen" Parameter vor und entwickeln nach diesem Parameter. Ohne Potential ist die Lösung ψ_0 . Setzen wir nun ψ_0 in die rechte Seite für ψ ein, so erhalten wir die erste Korrektur zur ungestörten Lösung. Durch Iteration hoffen wir eine Lösung der Gleichung anzunähern. Es sei ψ_n die n-te Näherung, dann liefert unsere Methode:

$$\psi_{n+1} = \psi_0 + \int G_0 U \psi_n. \quad (3.5)$$

Die Konvergenz dieses Verfahrens wird weitgehend vom tatsächlichen Potential abhängen und kann demnach nicht mit allgemeinen Überlegungen gezeigt oder widerlegt werden.

Wir bemühen uns nun um die Lösung der Gleichung (3.3). Fourierentwicklung liegt nahe:

$$G(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3q \tilde{G}_0(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.6)$$

Aus (3.3) folgt für G :

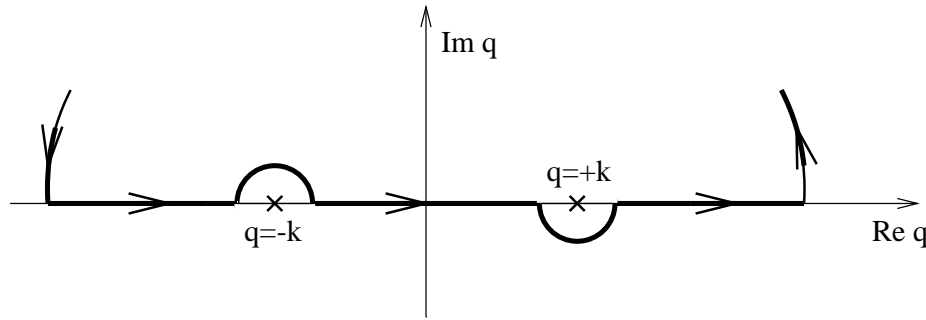
$$G(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{-q^2 + k^2} \quad (3.7)$$

Wir berechnen dieses Integral. Mit θ bezeichnen wir den Winkel zwischen \mathbf{q} und \mathbf{x} und integrieren zunächst über den Winkel:

$$G_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dq \int_0^\pi d\theta \frac{e^{iqr \cos \theta}}{-q^2 + k^2} q^2 \sin \theta \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{ir} \int_0^\infty dq q \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{k^2 - q^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{ir} \int_{-\infty}^\infty dq q \frac{e^{iqr}}{k^2 - q^2} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Wir sehen, daß der Integrand bei $q^2 = k^2$ eine Singularität besitzt. Dies entspricht genau den Lösungen der homogenen Gleichung, und deren Beiträge können durch den Integrationsweg um die Singularitäten festgelegt werden, wenn wir mit der Integration in die komplexe q Ebene ausweichen:



Hier haben wir einen möglichen Integrationsweg angegeben. Die entsprechende Lösung bezeichnen wir mit G_0^+ und meinen damit, daß wir die rechte Singularität im positiven Sinn und die linke im negativen Sinn umlaufen. Im Unendlichen können wir den Integrationsweg, wie angedeutet, schließen, da r positiv ist und demnach der Integrand von (3.9) bei positivem Imaginärteil von q exponentiell abfällt.

Das Integral kann nun mit Hilfe des Residuensatzes ausgewertet werden. Wir erhalten

$$G_0^+ = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r} e^{ikr}. \quad (3.10)$$

Für $k = 0$ erkennen wir das Coulombpotential wieder, mit dessen Hilfe die Poisson-sche Gleichung integriert werden kann.

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 q \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{q^2 + k^2} &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{r} e^{-kr} \\ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{r} e^{-kr} &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{q^2 + k^2}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Hier beachten wir, daß die Greensche Funktion (3.10) genau der asymptotischen Bedingung unserer Kugelwelle in (1.14) entspricht. Die Integralgleichung (3.4) kann demnach auch verwendet werden, um aus einer bekannten Lösung der Schrödingergleichung die Streuamplitude zu berechnen. Dazu setzen wir (3.10) in (3.4) ein und lassen r gegen unendlich gehen.

$$\begin{aligned} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| &= \sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}' + \mathbf{x}'^2} \\ &= r - \frac{\mathbf{x}}{r} \cdot \mathbf{x}' + O\left(\frac{1}{r}\right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Der Einheitsvektor $\frac{\mathbf{x}}{r}$ verschwindet nicht für $r \rightarrow \infty$.

Wir erhalten

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi r} e^{ikr} \int d^3x' e^{-ik\frac{\mathbf{x}}{r} \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \quad (3.13)$$

Wir führen nun den Vektor $\hat{\mathbf{k}}$ ein:

$$\hat{k}^i = k \frac{x^i}{r} \quad (3.14)$$

Dies ist ein Vektor vom Betrag k und der Richtung des Vektors \mathbf{x} , welche durch die Winkel θ und φ charakterisiert ist. Der Vektor $\hat{\mathbf{k}}$ hängt demnach nur noch von diesen Winkeln und nicht von r ab. Ein Vergleich mit (1.14) zeigt:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \quad (3.15)$$

Setzen wir nun für ψ die Lösung der freien Gleichung $\psi_0 = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ ein, so erhalten wir die Streuamplitude in der ersten Ordnung Störungstheorie, in der sogenannten Bornschen Näherung:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\mathbf{k} - \hat{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \quad (3.16)$$

Hier ist $\hbar\mathbf{k}$ der Impuls der einlaufenden Welle und $\hat{\mathbf{k}}$ ein Vektor in die durch θ und φ festgelegte Richtung mit Betrag k .

Die Streuamplitude in der Bornschen Näherung ist demnach durch die Fouriertransformation des Potentials gegeben.

4 Coulomb Streuung

Das Coulomb Potential kann asymptotisch sicher nicht vernachlässigt werden. Eine bewährte Methode in der Physik ist, nun einen "cutoff" einzuführen, d.h. in unserem Fall das Potential bei großen Abständen so zu ändern, daß es unseren Voraussetzungen einigermaßen entspricht. Diese Änderung soll von einem Parameter so abhängen, daß unser ursprüngliches Potential im Grenzfall realisiert wird.

Wir wählen ein Yukawa Potential.

$$V(\mathbf{x}) = \lambda \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (4.1)$$

Dieses Potential fällt für $r \rightarrow \infty$ hinreichend schnell ab, so daß wir annehmen können, daß unsere Methoden zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts anwendbar sind. Am Ende der Rechnung lassen wir dann $\kappa \rightarrow 0$ gehen und hoffen, ein vernünftiges Ergebnis zu erhalten.

Das Yukawa Potential ist aber auch für sich genommen interessant. Es entspricht aber auch dem Potential eines Austauscheteilchens mit Masse κ .

Es beschreibt z.B. ganz gut ein abgeschirmtes Coulombpotential in einem wasserstoffähnlichen Atom.

Wir lernen zunächst, dieses Potential Fourier zu transformieren. Dabei fällt die Ähnlichkeit von (4.1) mit mit (3.10) auf. Betrachten wir (3.10) bei rein imaginärem k und positivem Imaginärteil $k = iK$, $K \geq 0$, dann entsprechen sich (3.10) und (4.1).

Eine Verschiebung der Singularität im Integral (3.9) auf die positive imaginäre Achse entspricht demnach der Fouriertransformation des Yukawa Potentials:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 q \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{q^2 + k^2} &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{r} e^{-kr} \\ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{r} e^{-kr} &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{q^2 + k^2}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Hier beachten wir, daß die Greensche Funktion (3.10) genau der asymptotischen Bedingung unserer Kugelwelle in (1.14) entspricht. Die Integralgleichung (3.4) kann demnach auch verwendet werden, um aus einer bekannten Lösung der Schrödingergleichung die Streuamplitude zu berechnen. Dazu setzen wir (3.10) in (3.4) ein und lassen r gegen unendlich gehen.

$$\begin{aligned} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| &= \sqrt{\mathbf{x}^2 - 2\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}' + \mathbf{x}'^2} \\ &= r - \frac{\mathbf{x}}{r} \cdot \mathbf{x}' + O\left(\frac{1}{r}\right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Der Einheitsvektor $\frac{\mathbf{x}}{r}$ verschwindet nicht für $r \rightarrow \infty$.

Wir erhalten

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi r} e^{ikr} \int d^3 x' e^{-ik\frac{\mathbf{x}}{r}\cdot\mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \quad (4.4)$$

Wir führen nun den Vektor $\hat{\mathbf{k}}$ ein:

$$\hat{k}^i = k \frac{x^i}{r} \quad (4.5)$$

Dies ist ein Vektor vom Betrag k und der Richtung des Vektors \mathbf{x} , welche durch die Winkel θ und φ charakterisiert ist. Der Vektor $\hat{\mathbf{k}}$ hängt demnach nur noch von diesen

Winkeln und nicht von r ab. Ein Vergleich mit (1.14) zeigt:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\hat{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \quad (4.6)$$

Setzen wir nun für ψ die Lösung der freien Gleichung $\psi_0 = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ ein, so erhalten wir die Streuamplitude in der ersten Ordnung Störungstheorie, in der sogenannten Bornschen Näherung:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\mathbf{k}-\hat{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \quad (4.7)$$

Wir wollen das Problem der Streuung an einem Yukawa Potential störungstheoretisch behandeln. Entsprechend der Formel (4.7) müssen wir das Potential fouriertransformieren. Dies haben wir soeben gelernt. Die Gleichung (4.2) ergibt demnach

$$f(\theta) = -\frac{2\lambda m}{\hbar^2} \frac{1}{\kappa^2 + (\mathbf{k} - \hat{\mathbf{k}})^2} \quad (4.8)$$

und den partiellen Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma = \left(\frac{2\lambda m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{\left(\kappa^2 + (\mathbf{k} - \hat{\mathbf{k}})^2\right)^2} d\Omega. \quad (4.9)$$

Der Winkel zwischen der Einfallrichtung des Strahls (z -Richtung) und dem Strahl zum Detektor (\mathbf{x} -Richtung) sei θ . Damit ergibt sich:

$$(\mathbf{k} - \hat{\mathbf{k}})^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) = \left(2k \sin\frac{\theta}{2}\right)^2 \quad (4.10)$$

Berücksichtigen wir dies in (4.9), so erhalten wir:

$$d\sigma = \frac{\lambda^2}{\left(4E_k \sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2\right)^2} d\Omega \quad (4.11)$$

Der Wirkungsquerschnitt ist eine Funktion der Energie des einfallenden Teilchens und des Streuwinkels. Lassen wir nun in (4.11) $\kappa \rightarrow 0$ gehen, so erhalten wir die Rutherford'sche Streuformel, wie wir sie aus der klassischen Physik kennen. Unser Vorgehen hat demnach zu einem sinnvollen Ergebnis geführt. Auch eine exakte Behandlung der quantenmechanischen Coulomb Streuung reproduziert dieses Ergebnis. Dies wollen wir hier jedoch nicht versuchen. Bemerkenswert ist auch, daß für $\kappa = 0$ keine explizite Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts von \hbar auftritt, obwohl er quantenmechanisch berechnet wurde.

Obwohl Rutherford seinen Experimenten die klassische Streuformel zugrunde legte, konnte er die richtigen Schlüsse ziehen, obwohl er ein atomares System untersuchte, für das, wie wir heute wissen, die Quantenmechanik zuständig ist.

5 Lösungen der radialen Wellengleichung

In diesem Kapitel werden wir die Lösungen der freien radialen Wellengleichung studieren. Sie werden uns wichtige Hinweise für die Streuamplituden, vor allem für ihr Verhalten bei niedrigen Energien, geben. Die Gleichung lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) = ER_l(r). \quad (5.1)$$

Wir definieren:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \rho = kr. \quad (5.2)$$

Gleichung (5.1) wird nun zu:

$$R_l''(\rho) + \frac{2}{\rho} R_l'(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R_l(\rho) + R_l(\rho) = 0 \quad (5.3)$$

Die k Abhängigkeit der Lösung von (5.1) ist nur mehr in der Definition von ρ ersichtlich. Zu beachten ist, daß es sich um eine k Abhängigkeit der Lösung handelt, obwohl die Gleichung selbst nur von k^2 abhängt. Eine solche k Abhängigkeit sieht man auch schon in der ebenen Welle (1.6) und den Randbedingungen (1.14).

Wir zeigen nun, daß wir die Lösung der Gleichung (5.3) für $l+1$ auf die Lösung der Gleichung für l zurückführen können. Dazu definieren wir neue Funktionen $\chi_l(\rho)$:

$$\chi_l(\rho) = \rho^{-l} R_l(\rho) \quad (5.4)$$

Sie genügen in Folge von (5.3) der Gleichung:

$$\chi_l'' + \frac{2(l+1)}{\rho} \chi_l' + \chi_l = 0 \quad (5.5)$$

Die neue Funktion u_l :

$$u_l = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_l \quad (5.6)$$

genügt der Gleichung:

$$u_l'' + \frac{2(l+2)}{\rho} u_l' + u_l = 0 \quad (5.7)$$

wie man durch Nachrechnen leicht zeigen kann. Wir haben somit eine Lösung von (5.5) für $l+1$ gefunden.

$$\chi_{l+1} = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_l \quad (5.8)$$

Beginnen wir mit Lösungen für $l=0$, so können wir die Lösungen von (5.5) durch Differenzieren erhalten. Für $l=0$ lautet die Gleichung:

$$\chi_0'' + \frac{2}{\rho} \chi_0' + \chi_0 = 0 \quad (5.9)$$

Sie besitzt zwei linear unabhängige Lösungen. Die allgemeine Lösung

$$\chi_0 = \alpha \frac{\sin \rho}{\rho} + \beta \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (5.10)$$

kann durch Einsetzen in (5.9) verifiziert werden. Die Lösungen von (5.1) für beliebiges l erhalten wir durch Iterieren von (5.8) und durch die Gleichung (5.4). Die folgenden Bezeichnungen sind Standard:

Sphärische Besselfunktionen:

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (5.11)$$

Sphärische Neumannfunktionen:

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (5.12)$$

Das asymptotische Verhalten für $\rho \rightarrow \infty$ ergibt sich unmittelbar aus (5.11) bzw. (5.12):

$$\rho \rightarrow \infty: \quad j_l(\rho) \rightarrow \frac{1}{\rho} \sin \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad n_l(\rho) \rightarrow -\frac{1}{\rho} \cos \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (5.13)$$

Das Verhalten für $\rho \rightarrow 0$ ist gegeben durch:

$$\rho \rightarrow 0: \quad j_l(\rho) \rightarrow \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(\rho) \rightarrow \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}, \quad (5.14)$$

wobei

$$[2l+1]!! = (2l+1)(2l-1)\cdots 5 \cdot 3 \cdot 1. \quad (5.15)$$

Die allgemeine asymptotische Form der Lösungen der Schrödingergleichung, die nicht vom Winkel φ abhängen, haben wir in (2.5) angegeben. Die Lösung der freien Schrödingergleichung die asymptotisch mit (2.5) übereinstimmt, ist demnach:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l a_l \left(j_l(kr) \cos \vartheta_l - n_l(kr) \sin \vartheta_l \right) P_l(\cos \theta) \quad (5.16)$$

Dies ergibt sich aus (5.13).

Als erstes wenden wir uns nun dem *Streuproblem* zu, das durch die asymptotischen Randbedingungen (1.14) definiert ist. Aus (2.7) erhalten wir:

$$\psi = A \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\vartheta_l} \left(j_l(kr) \cos \vartheta_l - n_l(kr) \sin \vartheta_l \right) P_l(\cos \theta) \quad (5.17)$$

Die Wellenfunktion (5.17) geht für $\rho \rightarrow \infty$ in (2.5) über und genügt demnach unseren Randbedingungen für das Streuproblem.

In einem Bereich, in dem das Potential asymptotisch gegen den r^{-2} Term in (5.1) vernachlässigt werden kann (z.B. für $r > R$ bei endlicher Reichweite) ist (5.17) die Wellenfunktion für das Streuproblem. Die Phasen ϑ_l , aus denen wir den Wirkungsquerschnitt berechnen, müssen durch Anschlußbedingungen an die Wellenfunktion des Innenbereiches berechnet werden. Ist z.B. überall $V = 0$, dann muß (5.17) auch im "Innenbereich" und vor allem für $\rho = 0$ gelten. Da die Wellenfunktion dort keine Singularitäten haben darf, muß gemäß (5.14) der Koeffizient der sphärischen Neumannfunktion verschwinden, also $\vartheta_l = 0$ sein. Das Teilchen wird nicht gestreut. Weitere Beispiele werden wir im folgenden Kapitel betrachten.

Die radiale Wellenfunktion ist bis auf eine komplexe r -unabhängige Konstante reell, da die Streuphasen für eine elastische Streuung reell sind.

$$R_l(kr) = (j_l(kr) \cos \vartheta_l - n_l(kr) \sin \vartheta_l) i^l (2l + 1) \quad (5.18)$$

Berechnen wir den gesamten Fluß dieser l -ten Kugelwelle durch eine Kugelfläche, so müssen wir (5.18) in (1.13) einsetzen. Der Fluß ist proportional zum $\text{Im}(R^* \frac{\partial}{\partial r} R)$ und verschwindet daher für jede Partialwelle mit festem l . Die Interferenzterme mit unterschiedlichem l verschwinden mit der Integration über den Winkelbereich.

Wir wenden uns nun *Bindungszuständen in einem Potential* zu, das für $r > R$ verschwindet. Auch hier ist (5.16) die allgemeinste Lösung im Bereich $r > R$. Für einen Bindungszustand muß die Wellenfunktion im Unendlichen verschwinden. Die Variable k ist nun nicht auf reelle Werte beschränkt, da ja die Energie eines Bindungszustandes negativ sein kann und damit gemäß (5.2) k rein imaginär. Auch die Streuphasen werden nicht mehr reell sein. Es empfiehlt sich demnach, die Wellenfunktion (5.16) in der folgenden Form zu schreiben:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) i^l \left(a_l(k) j_l(kr) + b_l(k) n_l(kr) \right) P_l(\cos \theta) \quad (5.19)$$

Wir berücksichtigen das asymptotische Verhalten der Funktionen $j_l(kr)$ und $n_l(kr)$, d.h. Gleichung (5.13), und erhalten aus (5.19)

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) i^l \frac{1}{2ikr} \left\{ e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \left(a_l(k) - ib_l(k) \right) - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \left(a_l(k) + ib_l(k) \right) \right\} P_l(\cos \theta). \quad (5.20)$$

Für rein imaginäres $k : k = iK$ erhalten wir als Bedingung für einen gebundenen Zustand mit Drehimpuls l

$$\begin{aligned} a_l(k) &= -ib_l(k) & \text{für } K > 0 \\ a_l(k) &= +ib_l(k) & \text{für } K < 0. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Diese Gleichungen können für bestimmte Werte von K erfüllt sein. Dann besitzt das Potential bei der entsprechenden Energie einen Bindungszustand.

Wählen wir $K > 0$, so erhalten wir aus (5.19) die Wellenfunktion eines gebundenen Zustands, wenn wir für jene l , für die (5.21) nicht erfüllt ist, a und b Null setzen.

$$\psi_l = (2l + 1)i^l a_l(k) \left(j_l(kr) + in_l(kr) \right) P_l(\cos \theta) \quad (5.22)$$

Die Kombination

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho) \quad (5.23)$$

ist als erste Hankelfunktion bekannt. Für $K < 0$ tritt die zweite Hankelfunktion auf, die man definieren kann als:

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho) \quad (5.24)$$

Asymptotisch verhält sich $h_l^{(1)}$ wie

$$h_l^{(1)} \sim -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - \frac{l\pi}{2})}. \quad (5.25)$$

Am Ende wollen wir noch (5.16) verwenden, um (2.2) zu beweisen. Die ebene Welle e^{ikz} ist Lösung der Schrödingergleichung, kann mithin auch in der Form (5.16) geschrieben werden. Sie ist auch bei $r = 0$ nicht singular, die sphärischen Neumannfunktionen dürfen nicht auftreten, ϑ_l muß daher Null sein. Wir erhalten

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)i^l a_l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (5.26)$$

wo noch die Koeffizienten a_l zu bestimmen sind. Wir verwenden (2.1) und erhalten:

$$i^l a_l j_l(kr) = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} e^{ikr \cos \theta} P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (5.27)$$

Dies muß für alle r gelten, wir werden daher in eine Potenzreihe in r entwickeln und den für $r \rightarrow \infty$ führenden Term vergleichen.

Dies ergibt sich aus (5.14).

$$a_l \frac{(kr)^l}{(2l + 1)!!} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \frac{(kr)^l}{l!} (\cos \theta)^l P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (5.28)$$

Um zu zeigen, daß auch auf der rechten Seite die niedrigeren Potenzen verschwinden, erinnern wir uns daran, daß $z = r \cos \theta$ eine Komponente eines Vektors ist, also zu einer $l = 1$ Darstellung des Drehimpulses gehört. z^n hat demnach als größte Drehimpulskomponente $l = n$, das Integral (5.28) verschwindet demnach für $n < l$ wegen der Orthogonalität der Kugelfunktionen.

Um das Integral in (5.28) auszuwerten, erinnern wir uns an die Definition von P_l :

$$P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dt^l} (t^2 - 1)^l \quad (5.29)$$

Die höchste Potenz von t in $P_l(t)$ erhalten wir, wenn wir die eins in (5.29) vernachlässigen

$$P_l(t) = \frac{1}{2^l} \frac{1}{(l!)^2} (2l)! t^l + \sum_{n=0}^{l-1} c_n t^n. \quad (5.30)$$

Wir erhalten demnach

$$\frac{1}{2^l} \frac{1}{(2l)!} (2l)! (\cos \theta)^l = P_l(\cos \theta) + \sum_{n=0}^{l-1} \alpha_n P_n(\cos \theta). \quad (5.31)$$

Wir haben wieder verwendet, daß die höchste Drehimpulskomponente von t^n $l = n$ ist. Mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation können wir nun (5.28) integrieren und erhalten $a_l = 1$. Somit haben wir die Formel (2.2) hergeleitet.

6 Harte Kugel und Potentialtopf

Die Ausführungen des letzten Kapitels erlauben es uns in beiden Fällen, harte Kugel und Potentialtopf, die Lösungen auch im "Innenbereich", d.h. für $r < R$, zu berechnen.

Zunächst die *harte Kugel*. Sie ist charakterisiert durch die Bedingung, daß die Wellenfunktion für $r \leq R$ verschwindet, da das Potential dort als abstoßend und unendlich groß angenommen wird.

Es gilt demnach für alle l :

$$R_{l,<}(R) = 0, \quad (6.1)$$

wobei $R_{<}$ die Wellenfunktion für $r \leq R$ sein soll. Die Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion verlangt, daß dann auch $R_{l,>}(R)$ Null sein muß wobei $R_{>}$ die Wellenfunktion für $r \geq R$ ist. Die erste Ableitung der Wellenfunktion muß hier nicht stetig sein, da das Potential bei $r = R$ von Null auf Unendlich springt. Die erste Ableitung wird demnach eine endliche Sprungstelle bei $r = R$ besitzen.

Aus (5.17) folgt:

$$j_l(kR) \cos \vartheta_l - n_l(kR) \sin \vartheta_l = 0 \quad (6.2)$$

oder

$$\tan \vartheta_l = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)}. \quad (6.3)$$

In der Formel (2.8) für die Streuamplitude geht die Streuphase in der Kombination $e^{2i\vartheta_l} - 1$ ein. Dies läßt sich leicht durch $\tan \vartheta_l$ ausdrücken

$$\begin{aligned} e^{2i\vartheta_l} &= \frac{1 + i \tan \vartheta_l}{1 - i \tan \vartheta_l} \\ e^{2i\vartheta_l} - 1 &= \frac{2i \tan \vartheta_l}{1 - i \tan \vartheta_l} \end{aligned} \quad (6.4)$$

Setzen wir dies in (2.8) ein, so erhalten wir für die Streuamplitude:

$$f(\theta) = \frac{i}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{j_l(kR)}{h_l^{(1)}(kR)} P_l(\cos \theta) \quad (6.5)$$

Die erste Hankelfunktion $h_l^{(1)}(kR)$ wurde in (5.22) definiert.

Die Winkelabhängigkeit der Streuamplitude wird durch die Legendre Polynome bestimmt, während die Energieabhängigkeit im jeweiligen Koeffizienten enthalten ist.

Wir können uns für *kleine Energien* ($k \rightarrow 0$) interessieren und die führenden Terme mit Hilfe von (5.14) berechnen. Wir erhalten:

$$\frac{j_l(kr)}{j_l(kr) + in_l(kr)} \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{(kr)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2} \frac{2l+1}{i} \quad (6.6)$$

und somit für die Streuamplitude

$$f(\theta) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)^2}{[(2l+1)!!]^2} (kR)^{2l+1} P_l(\cos \theta). \quad (6.7)$$

Für ganz kleine Energien wird nur $l = 0$, d.h. die *s*-Wellenstreuung zum Wirkungsquerschnitt beitragen:

$$f(\theta) \xrightarrow{k \rightarrow 0} R \quad (6.8)$$

Der totale Wirkungsquerschnitt wird

$$\sigma \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi R^2. \quad (6.9)$$

Dies ist deshalb bemerkenswert, weil wir klassisch gerade die Kreisfläche πR^2 als Wirkungsquerschnitt erhalten. Die Teilchen, die im klassischen Sinne gestreut werden, sind gerade die, welche die Kugel auch treffen. Quantenmechanisch bei kleinen Energien erhalten wir einen vierfachen Wert für den totalen Wirkungsquerschnitt.

Eine Abschätzung bei hohen Energien ($k \rightarrow \infty$), die jedoch viel aufwendiger ist und hier nicht vorgestellt werden sollte, liefert einen Wert für den totalen Wirkungsquerschnitt von

$$\sigma \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 2\pi R^2 \quad (6.10)$$

also immer noch einen um den Faktor 2 zu großen Wert. Dies ist auch verständlich. Bei nichtverschwindendem totalen Wirkungsquerschnitt kann auch die Amplitude in der Vorwärtsrichtung nicht verschwinden (optisches Theorem, (2.14)). Sie muß demnach einen Beitrag zum Wirkungsquerschnitt liefern, ungleich der klassischen Betrachtung, bei der die harte Kugel einen vollkommenen Schatten in die Vorwärtsrichtung wirft. Daher bezeichnet man dieses quantenmechanische Phänomen auch als Schattenstreuung.

Wir wenden uns jetzt der *Streuung am Potentialtopf* zu. Der Potentialtopf ist definiert durch das Potential:

$$V(r) = -V_0 \theta(R - r) \quad (6.11)$$

Die radiale Wellengleichung beschreibt auch die Wellenfunktion im Innenbereich, wenn wir E durch $E + V_0$ ersetzen. Die Lösung darf bei $r = 0$ keine Singularität besitzen, es kommt demnach nur die sphärische Besselfunktion in Frage:

$$R_{l,<}(r) = A_l j_l(qr) \quad \text{mit} \quad \hbar q = \sqrt{2m(V_0 + E)} \quad (6.12)$$

Bei $r = R$ muß nun sowohl die Wellenfunktion wie auch die erste Ableitung stetig sein - das Potential macht einen endlichen Sprung bei $r = R$. Dies ergibt zwei Gleichungen, die es uns erlauben, A und ϑ_l der Wellenfunktion (5.17) für den Außenbereich durch die Lösung im Innenbereich festzulegen. Da A für den Streuquerschnitt keine Rolle spielt, kombinieren wir die beiden Stetigkeitsbedingungen, so daß A herausfällt. Dies gelingt, wenn wir für die logarithmische Ableitung Stetigkeit verlangen:

$$\left. \frac{\frac{d}{dr} R_{>}(r)}{R_{>}(r)} \right|_{r=R} = \left. \frac{\frac{d}{dr} R_{<}(r)}{R_{<}(r)} \right|_{r=R} = \alpha_l \quad (6.13)$$

Hier haben wir α_l als Abkürzung für die logarithmische Ableitung der Wellenfunktion im Innenbereich an der Stelle $r = R$ eingeführt. Für den Potentialtopf gilt:

$$\alpha_l = q \frac{j'_l(qR)}{j_l(qR)} \quad (6.14)$$

Aus der Gleichung (5.17) folgt nun

$$\frac{k[j'_l(kR) \cos \vartheta_l - n'_l(kR) \sin \vartheta_l]}{j_l(kR) \cos \vartheta_l - n_l(kR) \sin \vartheta_l} = \alpha_l. \quad (6.15)$$

In diesen Gleichungen bedeutet n'_l und j'_l , daß nach dem Argument der Funktion abgeleitet wird.

Der $\tan \vartheta_l$ läßt sich nun leicht berechnen:

$$\tan \vartheta_l = \frac{k j'_l(kR) - \alpha_l j_l(kR)}{k n'_l(kR) - \alpha_l n_l(kR)} \quad (6.16)$$

Verwenden wir (6.4), so ergibt sich:

$$e^{2i\vartheta_l} - 1 = \frac{-2 \left(k j'_l(kR) - \alpha_l j_l(kR) \right)}{k h_l^{(1)'}(kR) - \alpha_l h_l^{(1)}(kR)} \quad (6.17)$$

Die Streuphasen und damit die Streuamplitude sind demnach als Funktion der Energie ($E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$) sowie der Parameter α_l bekannt. Diese Parameter α_l hängen auch von der Energie ($\hbar q = \sqrt{2m(E + V_0)}$) sowie den Details des Potentials - in unserem Fall Radius R und Tiefe V_0 - ab.

Der Nenner in (6.17) kann bei bestimmten Energien sehr klein werden, diesen Fall nennen wir Resonanzstreuung, wir werden ihn im nächsten Kapitel näher betrachten.

Hier wollen wir zunächst zu *kleinen Energien* übergehen und die Entwicklungen (5.14) verwenden.

Für $\tan \vartheta_l$ erhalten wir von (6.16) unter Verwendung von (5.14):

$$\tan \vartheta_l \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{(2l+1)}{\left((2l+1)!!\right)^2} (kR)^{2l+1} \frac{l - \alpha_l(0)R}{l + 1 + \alpha_l(0)R} \quad (6.18)$$

Wir haben auch α_l nach k entwickelt. $\alpha_l(0)$ ist α_l an der Stelle $k = 0$. Beim Potentialtopf haben wir in (6.14) für $q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$ zu setzen. Diese Formel zeigt, daß im allgemeinen, d.h. solange der Nenner $l + 1 + \alpha_l(0)R$ in (6.18) nicht sehr klein ist, die Hauptbeiträge zur Streuphase von der s -Wellenstreuung ($l = 0$) herrühren. Für $k \rightarrow 0$ können wir dann $\tan \vartheta_0$ sowie $\sin \vartheta_0$ durch ϑ_0 ersetzen.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt wird somit zu:

$$d\sigma = \frac{1}{k^2} \sin^2 \vartheta_0 = R^2 \left(\frac{\alpha_0(0)R}{1 + \alpha_0(0)R} \right)^2 \quad (6.19)$$

Hier haben wir (2.8) und (6.18) verwendet.

Der totale Wirkungsquerschnitt nähert sich somit zu

$$\sigma = 4\pi R^2 \left(\frac{\alpha_0(0)R}{1 + \alpha_0(0)R} \right)^2 \quad (6.20)$$

Wir haben hier den Potentialtopf behandelt. Alle Eigenschaften der Streuphase ergeben sich aus der logarithmischen Ableitung der Wellenfunktion an der Stelle $r = R$. Alle Formeln und Schlußfolgerungen bleiben somit richtig, solange es das Potential zuläßt, an einer Stelle $r = R$ logarithmische Anschlußbedingungen zu stellen. Bei Potentialen mit endlicher Reichweite wird dies immer der Fall sein. Die Energieabhängigkeit von α_l hängt natürlich vom jeweiligen Potential ab. Aber auch hier kann man für eine große Klasse von Potentialen - dazu gehören alle mit endlicher Reichweite - zeigen, daß die ersten Korrekturen zu ϑ_0 von der Ordnung k^2 sind. Die Formel (6.19) hat somit auch allgemeine Gültigkeit, und man schreibt sie in der Form

$$d\sigma \xrightarrow{k \rightarrow 0} a_0^2 + O(k^2) \quad (6.21)$$

und nennt a_0 die Streulänge des Potentials.

Für die harte Kugel ergibt sich als Streulänge $a_0 = R$ (6.9) und für den Potentialtopf

$$a_0 = \frac{\alpha_0(0)R^2}{1 + \alpha_0(0)R}, \quad \alpha_0 = -\frac{1}{R} \left\{ 1 - \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} R \cot \left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} R \right) \right\}. \quad (6.22)$$

Den Term nächster Ordnung in k^2 parametrisiert man wie folgt:

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a_0} + \frac{1}{2} r_0 k^2 \quad (6.23)$$

und nennt r_0 die effektive Reichweite des Potentials.

Die p -Welle ($l = 1$) wird auch in der Ordnung k^2 zum Wirkungsquerschnitt beitragen, es ist die Winkelabhängigkeit, die diese beiden Beiträge unterscheidet.

Wir wenden uns noch kurz den *gebundenen Zuständen* im Potentialtopf zu. Gemäß den Ausführungen des vorhergehenden Kapitels, und speziell gemäß der Wellenfunktion (5.22), muß die Stetigkeitsbedingung für die Hankelfunktion im Außenbereich gefordert werden. Wir fordern:

$$\alpha_l = iK \frac{h_l^{(1)'(\rho)} \Big|_{\rho=iKR}}{h_l^{(1)}(\rho)} \quad (6.24)$$

Die rechte Seite enthält nun keinen freien Parameter (wie etwa die Streuphase in (6.15)). Nur für bestimmte Werte von K wird diese Gleichung erfüllbar sein - dies sind dann die Energieeigenwerte der Bindungszustände.

$$\hbar K = \sqrt{2m(-E)} \quad (6.25)$$

Sie treten bei negativen Energien auf. Die Gleichung (6.24) kann auch geschrieben werden als

$$iK h_l^{(1)'(iKR)} - \alpha_l h_l^{(1)}(iKR) = 0. \quad (6.26)$$

Es ist interessant zu bemerken, daß diese Bedingung genau zu einer Polstelle der Streuamplitude auf der positiven imaginären k -Achse führt, dies ist aus (6.17) ersichtlich. Auch dies ist ein allgemeiner Zusammenhang, Bindungszustände führen zu Singularitäten der Streuamplitude auf der positiven imaginären Achse. Der Zusammenhang zwischen Singularitäten der Streuamplitude in der komplexen k Ebene und den Bindungszuständen ist jedoch nicht eindeutig. Die Streuamplitude kann noch weitere Singularitäten besitzen.

Wir wollen noch die Gleichung (6.24) für $l = 0$ untersuchen. Aus (6.14) folgt

$$\alpha_0 = q \frac{j_0'(qR)}{j_0(qR)} = -\frac{1}{R} + q \cot(qR); \quad (6.27)$$

während sich die rechte Seite von (6.24) zu $-\frac{1}{R} - K$ rechnet.

Wir erhalten also die Bedingung für Bindungszustände:

$$q \cot(qR) = -K \quad (6.28)$$

wobei $\hbar q = \sqrt{2m(V_0 + E)}$ (6.12) und $\hbar K = \sqrt{2m(-E)}$ (6.25) zu setzen ist. Dies sind gerade die Bedingungen für die ungeraden Zustände des eindimensionalen Potentialtopfe, die Lösungen dieser Gleichung wurden dort diskutiert.

7 Resonanzstreuung

Wir haben im vorhergehenden Kapitel gesehen, daß bei bestimmten Energien die Partialstreuamplituden sehr groß werden können.

Streuamplitude (2.8)

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\vartheta_l} - 1)P_l(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)f_l(k)P_l(\cos\theta) \end{aligned} \quad (7.1)$$

Streuphasen (6.16):

$$\tan \vartheta_l = \frac{kj'_l(kR) - \alpha_l j_l(kR)}{kn'_l(kR) - \alpha_l n_l(kR)} \quad (7.2)$$

Dies gilt allgemein, falls für $r \geq R$ die freie Wellengleichung eine gute Näherung ist. Die Konstanten α_l sind die logarithmische Ableitung der Wellenfunktion des Innenbereiches an der Stelle $r = R$.

Es kann nun sein, daß bei bestimmten Werten von l und k der Nenner in (7.2) sehr klein ist. Dann dominiert die entsprechende Streuamplitude auch bei sehr kleiner Energie.

Wir sehen uns wieder den führenden Term für $k \rightarrow 0$ an, d.h. wir verwenden (5.14) und erhalten:

$$\tan \vartheta_l \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{2l+1}{[(2l+1)!!]^2} (kR)^{2l+1} \frac{l - \alpha_l R}{l + 1 + \alpha_l R} \quad (7.3)$$

Resonanz liegt vor falls:

$$l + 1 + \alpha_l R = 0 \quad (7.4)$$

Die Parameter α_l hängen von der Energie ab, und wir nehmen an, daß für $E = E_r$ die Gleichung erfüllt ist. Wir entwickeln $R\alpha_l$ um diese Stelle:

$$R\alpha_l(E) = -l - 1 + (E - E_r)R \left. \frac{d\alpha_l}{dE} \right|_{E=E_r} + \dots \quad (7.5)$$

und berechnen die Energieabhängigkeit der Streuphasen in der Umgebung von E_r :

$$\tan \vartheta_l \sim \frac{(2l+1)^2}{[(2l+1)!!]^2} (kR)^{2l+1} \frac{1}{(E - E_r)R \left. \frac{d\alpha_l}{dE} \right|_{E=E_r}} = -\frac{\gamma_l (kR)^{2l+1}}{E - E_r} \quad (7.6)$$

Das letzte Gleichheitszeichen definiert γ_l

$$\gamma_l = -\frac{(2l+1)^2}{[(2l+1)!!]^2} \frac{1}{R \left. \frac{d\alpha_l}{dE} \right|_{E=E_r}}. \quad (7.7)$$

Für $E = E_r$ wird $\tan \vartheta_l$ unendlich und ϑ_l somit ein ungerades Vielfaches von $\frac{\pi}{2}$. An diesen Stellen wird $\sin \vartheta_l$ gleich eins und damit der Beitrag dieser Partialwelle zum

totalen Wirkungsquerschnitt nach (2.12) maximal. Wir verwenden nun (6.4), setzen in (7.1) ein und erhalten

$$f_l = -2i\gamma_l \frac{(kR)^{2l+1}}{E - E_r + i\gamma_l(kR)^{2l+1}}. \quad (7.8)$$

Der in k führende Beitrag dieser Partialwelle zum totalen Wirkungsquerschnitt ist demnach:

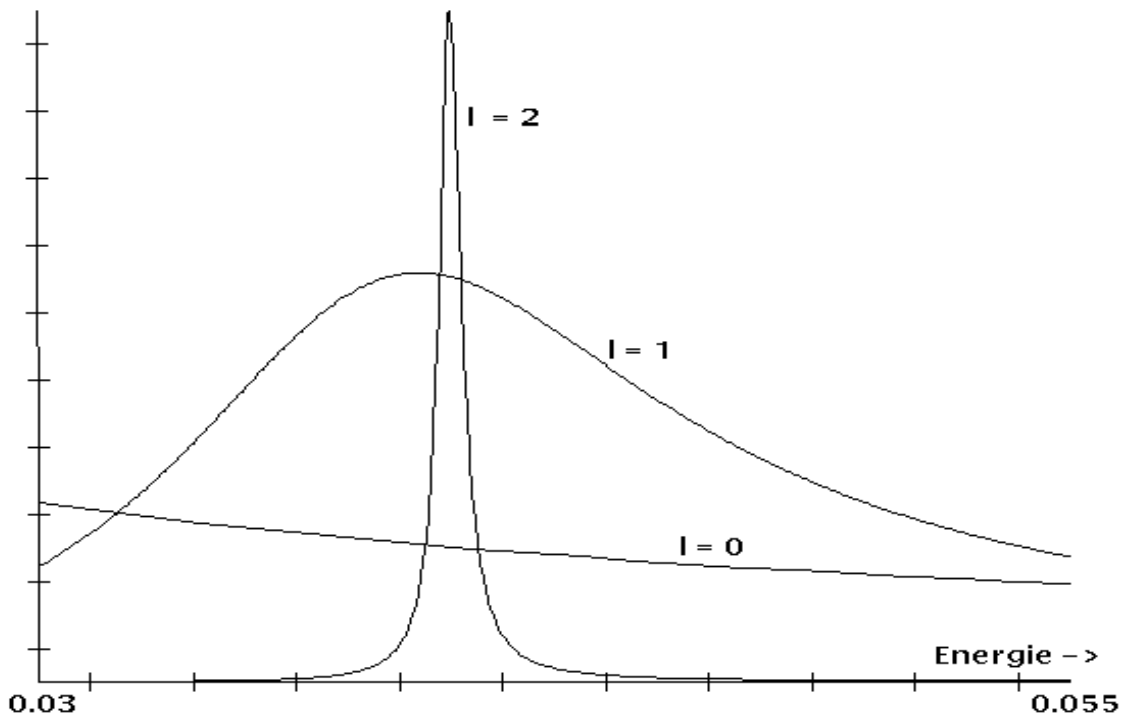
$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{[\gamma_l(kR)^{2l+1}]^2}{(E - E_r)^2 + [\gamma_l(kR)^{2l+1}]^2} \quad (7.9)$$

Dies ist die Breit-Wigner Formel für die Resonanzstreuung. Diese Formel stellt eine typische Energieabhängigkeit des totalen Wirkungsquerschnitts in der Nähe einer Resonanz dar. Die entsprechende Partialwelle kann aus der Winkelabhängigkeit des partiellen Wirkungsquerschnitts ermittelt werden.

Die Breite der Resonanzkurve ist durch $\gamma_l(ka)^{2l+1}$ gegeben, für $l > 1$ und k klein ist die Resonanz sehr scharf. Dies wird aus der folgenden Abbildung deutlich.

Wir sehen aus (7.8), daß die Streuamplitude eine Singularität bei $E = E_r - i\gamma_l(kR)^{2l+1}$ besitzt. Da $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} > 0$, liegt dieser Pol für $\gamma_l > 0$ in der unteren Halbebene des 2ten Riemannschen Blattes in der komplexen E -Ebene. Im nächsten Abschnitt werden wir den Zusammenhang zwischen Kausalität und Analytizität der Streuamplitude untersuchen. Daraus folgt dann, daß eine Singularität in der oberen Halbene des ersten Riemannschen Blattes ausgeschlossen ist. Demnach muß $\gamma_l > 0$ sein. Aus (7.6) ergibt sich damit, daß die Streuphase für $E < E_r$ positiv und kleiner $\pi/2$ ist, bei $E = E_r$ den Wert $\pi/2$ annimmt, und bei $E > E_r$ größer $\pi/2$ wird.

Breit-Wigner-Resonanzkurve



$(E_r = 0.04, \gamma = 1, R = 1)$

Zeitabhängiger Formalismus

Man kann den Streuvorgang auch als zeitliche Veränderung einer Wellenfunktion in Gegenwart eines Potentials betrachten. Nimmt man an, daß das Potential für $t \rightarrow \pm\infty$ verschwindet, so kann man zu sehr frühen und sehr späten Zeiten annehmen, daß sich das Teilchen wie ein freies Teilchen bewegt. In diesen Zeiten kann man also die Teilchen z.B. mit ihrem Impuls charakterisieren und nach der Übergangswahrscheinlichkeit fragen, daß man bei einem einlaufenden Teilchen mit Impuls \mathbf{p} nach der Streuung ein Teilchen mit Impuls \mathbf{p}' vorfindet. Den entsprechenden Formalismus wollen wir jetzt entwickeln, er hat den Vorteil, daß er sich leicht auf die relativistische Theorie übertragen läßt. Wir beginnen mit der Diskussion der Greenschen Funktionen der freien Schrödingergleichung.

8 Greensche Funktionen der freien Schrödingergleichung

Schrödingergleichung:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{x}, t) \quad (8.1)$$

Die folgende Gleichung definiert Greensche Funktionen:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)G_0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t') \quad (8.2)$$

Aus der Translationsinvarianz der freien Schrödingergleichung folgt

$$G_0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t'). \quad (8.3)$$

Es genügt also die Gleichung

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)G_0(\mathbf{x}, t) = \hbar\delta(\mathbf{x})\delta(t). \quad (8.4)$$

zu lösen. Der Faktor \hbar auf der rechten Seite dient der Bequemlichkeit, da es der Faktor ist, der auch $i\frac{\partial}{\partial t}$ multipliziert. Der Index 0 bedeutet, daß wir die freie Schrödingergleichung betrachten. Die Lösungen dieser Gleichung sind nur bis auf Lösungen der homogenen Gleichung festgelegt. Die Greensche Funktion kann noch Randbedingungen angepaßt werden.

Zur Lösung dieser Gleichung bietet sich die Fouriertransformation an, und wir erhalten:

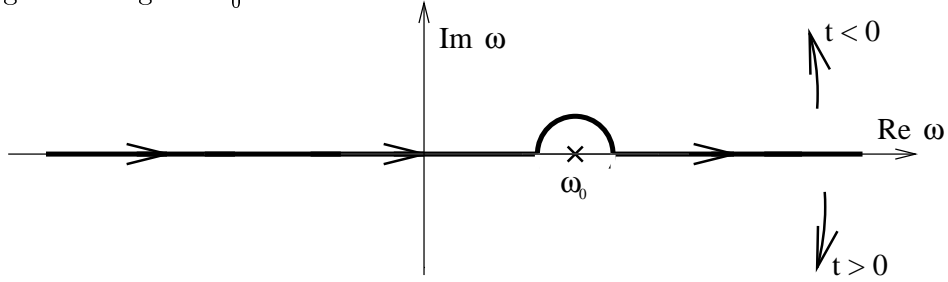
$$G_0(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3k \frac{e^{-i\omega t} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\omega - \frac{\hbar k^2}{2m}} \quad (8.5)$$

Der Integrand weist bei $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ eine Singularität auf. Dieser Zusammenhang zwischen Frequenz und Wellenzahl entspricht gerade einer Lösung der homogenen Gleichung (8.1).

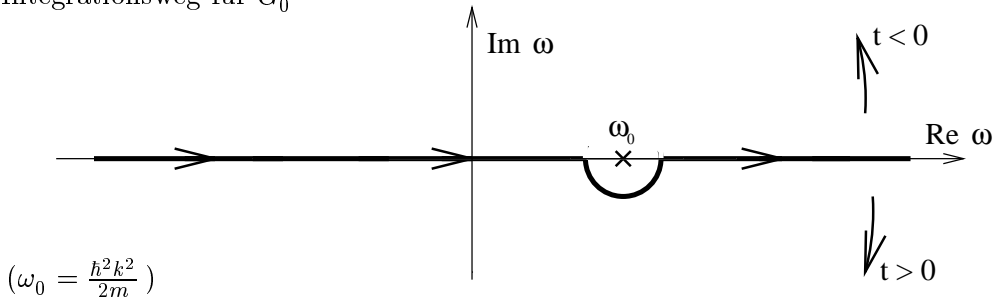
Durch die Wahl des Integrationsweges legen wir dann eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung fest.

Wir können dem Pol auf der reellen ω -Achse in der oberen (unteren) Halbebene der komplexen ω -Ebene ausweichen. Wir nennen die entsprechende Greensche Funktion dann G_0^\pm .

Integrationsweg für G_0^+



Integrationsweg für G_0^-



In beiden Fällen können wir den Integrationsweg für $t > 0$ in der unteren Halbebene im Unendlichen schließen, für $t < 0$ gleichermaßen in der oberen Halbebene.

Wir berechnen G_0^+ . Da für $t < 0$ der Integrationsweg keine Singularität einschließt, erhalten wir:

$$G_0^+(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{für} \quad t < 0. \quad (8.6)$$

Für $t > 0$ verwenden wir den Residuensatz für die Integration in der komplexen Ebene und erhalten:

$$G_0^+(\mathbf{x}, t) = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\frac{\hbar}{2m}k^2 t} \quad \text{für} \quad t > 0. \quad (8.7)$$

Die \mathbf{k} -Integration kann durch analytische Fortsetzung des Gaußschen Integrals ausgeführt werden. Man kann aber auch in einer Integraltafel nachsehen, wo man findet:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(ax^2+bx)} dx = \frac{1-i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{ib^2}{4a}} \quad \text{für} \quad a < 0. \quad (8.8)$$

Dreimaliges Anwenden dieser Formel führt zu dem Ergebnis:

$$G_0^+(\mathbf{x}, t) = -i\theta(t) \left[\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right]^{3/2} e^{i\frac{m}{2\hbar} \frac{\mathbf{x}^2}{t}} \quad (8.9)$$

Anstatt mit der Integration bei G^+ in die obere Halbebene auszuweichen, können wir auch die Singularität in die untere Halbebene verschieben. Entsprechendes gilt für G_0^- .

$$G_0^\pm(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3k \frac{e^{-i\omega t} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\omega - \frac{\hbar k^2}{2m} \pm i\epsilon} \quad (8.10)$$

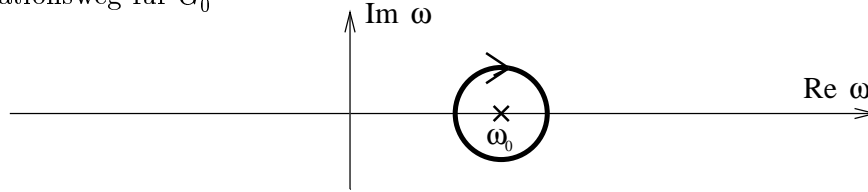
Man erkennt unmittelbar die Gültigkeit der Beziehung:

$$G_0^-(\mathbf{x}, t) = G_0^{+*}(-\mathbf{x}, -t) \quad (8.11)$$

G_0^- muß also nicht gesondert berechnet werden. Da G_0^+ für $t < 0$ und G_0^- für $t > 0$ verschwindet, sind dies die Randwerte, die diese Lösungen der Gleichung (8.4) erfüllen. Man nennt G_0^+ retardierte und G_0^- avancierte Greensche Funktion.

Bildet man die Differenz der beiden Lösungen G_0^+ und G_0^- , so erhält man eine Lösung der homogenen Gleichung. Sie entspricht einem Integrationsweg in der komplexen ω -Ebene, der den Pol umschließt.

Integrationsweg für G_0



$$G_0(\mathbf{x}, t) = G_0^+(\mathbf{x}, t) - G_0^-(\mathbf{x}, t). \quad (8.12)$$

Aus (8.9) und (8.11) folgt

$$G_0(\mathbf{x}, t) = -i \left[\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right]^{3/2} e^{i \frac{m}{2\hbar} \frac{\mathbf{x}^2}{t}} \quad (8.13)$$

Die Funktion G_0 hat eine sehr wichtige Eigenschaft. Berechnen wir sie an der Stelle $t = 0$, so kann dies in der Darstellung (8.7) geschehen, bevor die \mathbf{k} -Integration ausgeführt wurde

$$G_0(\mathbf{x}, 0) = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = -i\delta(\mathbf{x}). \quad (8.14)$$

Die Funktion $G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')$ ist demnach eine Lösung der freien Schrödingergleichung

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = 0 \quad (8.15)$$

mit der Anfangsbedingung

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', 0) = -i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (8.16)$$

Dies erlaubt uns, sofort das Anfangswertproblem der Schrödingergleichung (8.1) zu lösen. Sei zur Zeit $t = t_0$ die Wellenfunktion gegeben, z.B. $\Psi(\mathbf{x}, t) = u_0(\mathbf{x})$, so ist die Wellenfunktion zu jeder Zeit t gegeben durch:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = i \int G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t_0) u_0(\mathbf{x}') d^3x'. \quad (8.17)$$

Dies sieht man, da die so definierte Wellenfunktion Lösung der freien Schrödinger-Gleichung ist, und weil $\Psi(\mathbf{x}, t_0) = u_0(\mathbf{x})$ aus (8.16) folgt.

Die Funktion $G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t_0)$ propagiert demnach die Lösung der freien Schrödinger-Gleichung von einer Zeit t_0 zu einer beliebigen Zeit t .

Dies ist aber gerade, was wir für die Behandlung des Streuproblems, allerdings bei Vorhandensein eines Potentials, brauchen. Wir müssen also die analogen Funktionen G^+ , G^- und G für den Fall mit Potential suchen.

9 Die S -Matrix

Wir nehmen nun an, daß wir an einem Potential streuen, das für große räumliche Abstände und auch für große negative und positive Zeiten verwindet.

$$V(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{für} \quad r > R, |t| > T \quad (9.1)$$

Dazu suchen wir Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \lambda V \right) \psi. \quad (9.2)$$

Für $|t| > T$ ist die Wellenfunktion Lösung der freien Schrödinger-Gleichung. Wir wollen zunächst zeigen, daß die Lösung von (9.2) durch eine einlaufende freie Welle festgelegt ist, und dann für $t > T$ die Übergangswahrscheinlichkeit dieser Wellenfunktion in eine vorgegebene auslaufende freie Welle berechnen.

Zur Lösung der Gleichung (9.2) bietet sich für allgemeines V die Störungsrechnung mit den Greenschen Funktionen der freien Gleichung an. Die Gleichung (9.2) wird zunächst in eine Integralgleichung umgewandelt:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3 x' dt' G_0^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') V(\mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}', t') \quad (9.3)$$

ψ_0 ist Lösung der freien Gleichung, und da wir die Integralgleichung mit G_0^+ formuliert haben und V den Bedingungen (9.1) genügt, ist dieses ψ_0 identisch mit der einlaufenden Welle ψ_{ein} .

Störungstheorie heißt nun Entwicklung nach dem Parameter λ . Dabei ergibt sich die n te Näherung aus der $(n-1)$ ten Näherung durch Einsetzen in die rechte Seite von (9.3):

$$\psi_n(\mathbf{x}, t) = \psi_0(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3 x' dt' G_0^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') V(\mathbf{x}', t') \psi_{n-1}(\mathbf{x}', t') \quad (9.4)$$

Wir führen die Entwicklung durch. Dazu benutzen wir die Integrationsvariablen x_l, t_l und kürzen ab:

$$\begin{aligned} d^3 x_l dt_l &\equiv d(l), \\ G_0^+(\mathbf{x}_{l-1} - \mathbf{x}_l, t_{l-1} - t_l) &\equiv G_0^+(l-1, l), \\ V(\mathbf{x}_l, t_l) &\equiv V(l). \end{aligned} \quad (9.5)$$

Wir erhalten:

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}_1, t_1) &= \psi_0(\mathbf{x}_1, t_1) + \frac{\lambda}{\hbar} \int d(2) G_0^+(1, 2)V(2)\psi_0(2) \\ &+ \dots + \frac{\lambda^n}{\hbar^n} \int d(2) \dots d(n+1) G_0^+(1, 2)V(2)G_0^+(2, 3)V(3) \dots \\ &\dots G_0^+(n, n+1)V(n+1)\psi_0(n+1) \\ &+ \dots,\end{aligned}\tag{9.6}$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3x' dt' G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t')V(\mathbf{x}', t')\psi_0(\mathbf{x}', t'),\tag{9.7}$$

wobei wir in der letzten Gleichung die Summe unter dem Integral von (9.6) mit $G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t')$ bezeichnet haben:

$$\begin{aligned}G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') &= G_0^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') \\ &+ \frac{\lambda}{\hbar} \int d(1)G_0^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1, t - t_1)V(1)G_0^+(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}', t_1 - t') \\ &+ \dots \\ &+ \frac{\lambda^n}{\hbar^n} \int d(1) \dots d(n)G_0^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1, t - t_1)V(1)G_0^+(1, 2)V(2) \dots \\ &\dots G_0^+(n-1, n)V(n)G^+(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}', t_n - t') \\ &+ \dots\end{aligned}\tag{9.8}$$

G^+ steht zunächst als Abkürzung für die rechte Seite von (9.8) und kann so berechnet werden. Wenden wir allerdings den Operator der Schrödingergleichung (9.2) auf (9.7) an, so erhalten wir:

$$\begin{aligned}\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \lambda V\right)\psi &= 0 \\ &= -\lambda V(\mathbf{x}, t)\psi_0(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3x' dt' \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \lambda V\right)G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t')V(\mathbf{x}', t')\psi_0(\mathbf{x}', t').\end{aligned}\tag{9.9}$$

Da dies für alle ψ_0 gelten muß folgt:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \lambda V\right)G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') = \hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')\tag{9.10}$$

Weiters folgt auf Grund der Eigenschaften (9.1) unseres Potentials, daß der allgemeine Term in (9.8) nur dann nicht verschwindet, wenn $t > t_1 > t_2 > \dots > t_n > t'$ ist. Wir sehen daher, daß:

$$G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') = 0 \quad \text{für} \quad t < t'.\tag{9.11}$$

G^+ ist demnach eine Greensche Funktion der Schrödingergleichung mit Potential zur Randbedingung (9.11).

Die Gleichung (9.7) ist bemerkenswert, weil sie zeigt, daß die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$ vollständig durch die einlaufende Welle ψ_0 festgelegt ist, und daß es sich dabei um eine lineare Abbildung handelt. Von der Gleichung (9.3) zu (9.7) hat sich der Index 0 von G_0 zu ψ_0 verschoben. Die Greensche Funktion G kann nun ein für allemal berechnet werden, die Wellenfunktion mit Wechselwirkung berechnet sich dann aus der einlaufenden Wellenfunktion durch Integration.

Die S -Matrix sollte nun einen Zustand zur Zeit $t_0 < -T$ auf einen Zustand zur Zeit $t_1 > T$ abbilden. Um diese Abbildung zu berechnen, führen wir zunächst ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem für eine bestimmte Zeit t ein, das aber gleichzeitig die stationäre freie Schrödingergleichung (1.3) löst:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_\alpha(\mathbf{x}) = E_\alpha u_\alpha(\mathbf{x}) \quad (9.12)$$

Orthogonalität:

$$\int u_\beta^*(\mathbf{x})u_\alpha(\mathbf{x})d^3x = \delta_{\beta\alpha} \quad (9.13)$$

Vollständigkeit:

$$\int_\alpha u_\alpha^*(\mathbf{x})u_\alpha(\mathbf{y}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (9.14)$$

Das Symbol \int steht hier für ein Integral, falls α ein kontinuierlicher Index ist, und für eine Summe, falls α diskrete Werte annimmt.

In erster Linie denken wir natürlich an ebene Wellen:

$$u_\alpha(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{x}}, \quad E_\alpha = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\alpha^2}{2m} \quad (9.15)$$

Die Lösungen der zeitabhängigen Wellengleichung (1.1) ergeben sich dann zu

$$\phi_\alpha(\mathbf{x}, t) = u_\alpha(\mathbf{x})e^{-\frac{i}{\hbar}E_\alpha t}. \quad (9.16)$$

Wir können nun zur Zeit $t_1 > T$ die Wellenfunktion ψ aus Gleichung (9.3) nach den Funktionen $\phi_\beta(\mathbf{x}, t_1)$ entwickeln. Gleichzeitig geben wir ψ den Namen ψ_α , um anzudeuten, daß sich ψ aus der einlaufenden Welle ϕ_α entwickelt hat.

Wir definieren die S -Matrixelemente als die entsprechenden Entwicklungskoeffizienten.

$$S_{\beta\alpha} = \int d^3x \phi_\beta^*(\mathbf{x}, t_1)\psi_\alpha(\mathbf{x}, t_1) \quad (9.17)$$

Schreiben wir ψ in der Form (9.3), so erhalten wir:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} + \frac{\lambda}{\hbar} \int_{t=t_2} d^3x d^3x' dt' \phi_\beta^*(\mathbf{x}, t)G_0^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')V(\mathbf{x}', t')\psi_\alpha(\mathbf{x}', t') \quad (9.18)$$

Wir wissen, daß G_0 die freie Lösung propagiert (8.17):

$$\phi_\beta(\mathbf{x}, t) = i \int G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t_0)\phi_\beta(\mathbf{x}', t_0) d^3x' \quad (9.19)$$

Die Konjugationseigenschaften von G_0 ergeben sich aus (8.11) und (8.12), sie sind

$$G_0^*(\mathbf{x}, t) = -G_0(-\mathbf{x}, -t). \quad (9.20)$$

Wir konjugieren (9.19)

$$\phi_\beta^*(\mathbf{x}, t) = i \int \phi_\beta^*(\mathbf{x}', t_0) G_0(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, t_0 - t) d^3 x' \quad (9.21)$$

Damit ergibt sich die S -Matrix (9.18) zu:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - i \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3 x' dt' \phi_\beta^*(\mathbf{x}', t') V(\mathbf{x}', t') \psi_\alpha(\mathbf{x}', t') \quad (9.22)$$

Es zeigt sich, daß bei der Wahl des Funktionensystems (9.16) die S -Matrix unabhängig von der speziellen Zeit t_0 und t_1 ist, falls nur $t_0 < -T$ und $t_1 > T$ gewählt wird.

Die Definition (9.22) eignet sich direkt für eine Störungstheorie, ψ_α ist in erster Näherung durch ϕ_α zu ersetzen.

Wir wollen nochmals auf die Tatsache zurückkommen, daß die S -Matrix Wellenfunktionen von einer bestimmten Zeit $t_0 < -T$ auf eine bestimmte Zeit $t_1 > T$ abbildet. Wir setzen in der Definition (9.17) die Wellenfunktion ψ_α in der Form (9.7) ein:

$$S_{\beta\alpha} = \int d^3 x \phi_\beta^*(\mathbf{x}, t_1) \left\{ \phi_\alpha(\mathbf{x}, t_1) + \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3 x' dt' G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t_1, t') V(\mathbf{x}', t') \phi_\alpha(\mathbf{x}', t') \right\}. \quad (9.23)$$

Nun verwenden wir (9.19), um $\phi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ durch $\phi_\alpha(\mathbf{x}, t_0)$ auszudrücken:

$$S_{\beta\alpha} = i \int d^3 x d^3 x' \phi_\beta^*(\mathbf{x}, t_1) \left\{ G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t_1 - t_0) + \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3 y d\tau G^+(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t_1, \tau) V(\mathbf{y}, \tau) G_0(\mathbf{y} - \mathbf{x}', \tau - t_0) \right\} \phi_\alpha(\mathbf{x}', t_0). \quad (9.24)$$

Da auch hier wegen unserer Bedingungen $t_1 > \tau > t_0$ sein muß, können wir G_0 durch G_0^+ ersetzen. Aus (9.8) folgt, daß wir den gesamten Ausdruck unter der geschweiften Klammer durch $G^+(\mathbf{x}, t_1, \mathbf{x}', t_0)$ ersetzen können:

$$S_{\beta\alpha} = i \int d^3 x d^3 x' \phi_\beta^*(\mathbf{x}, t_1) G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t_1, t_0) \phi_\alpha(\mathbf{x}', t_0). \quad (9.25)$$

Zur Zeit $t = t_0$ sei nun eine Wellenfunktion vorgegeben:

$$\psi(\mathbf{x}, t_0) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \phi_{\alpha}(\mathbf{x}, t_0) \quad (9.26)$$

Diese Wellenfunktion entwickelt sich zeitlich nach der Schrödingergleichung und wird zur Zeit t_1 zu:

$$\psi(\mathbf{x}, t_1) = \sum_{\beta} d_{\beta} \phi_{\beta}(\mathbf{x}, t_1) \quad (9.27)$$

Dann sind die Entwicklungskoeffizienten gemäß der Definition der S -Matrix (9.17) gegeben durch:

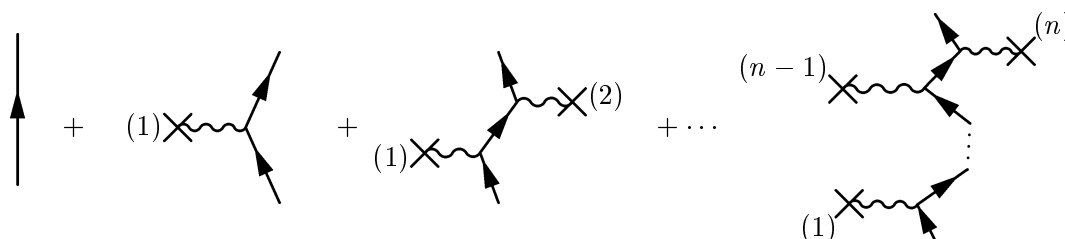
$$d_\beta = \sum_\alpha S_{\beta\alpha} c_\alpha. \quad (9.28)$$

Hier kommt die Matrixbedeutung klar zum Ausdruck. Die Normierung der Wellenfunktion ändert sich nicht, solange das Potential reell ist, die Wahrscheinlichkeit, das System in irgendeinem Zustand zu finden, bleibt erhalten:

$$\sum_\alpha |c_\alpha|^2 = \sum_\beta |d_\beta|^2 = 1 \quad (9.29)$$

Die S -Matrix muß unitär sein. Dies gilt als eines der grundlegenden Axiome, das heißt, wir können nur eine einer S -Matrix Theorie zugrunde liegende Dynamik akzeptieren, die zu einer unitären S -Matrix führt. In der Schrödingerschen Quantenmechanik mit hermitischem Hamiltonoperator ist dies der Fall.

Die Berechnung der S -Matrix durch die Störungstheorie kann graphisch veranschaulicht werden. Wir gehen von (9.25) aus und verwenden (9.8). Den einzelnen Termen in (9.8) ordnen wir Graphen zu:



Jedem Pfeil ordnen wir die Funktion $G_0^+(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a, t_b - t_a)$ zu, wobei \mathbf{x}_a, t_a Ort und Zeit am Anfang des Pfeiles, \mathbf{x}_b, t_b Ort und Zeit am Ende des Pfeiles sein soll. Für jeden Vertex setzen wir $\frac{\lambda}{\hbar} V(\mathbf{x}_n, t_n)$ ein. Am Ende des "Pfeilzuges" setzen wir $\phi_\beta^*(\mathbf{x}, t_l)$, und für den Anfang $\phi_\alpha(\mathbf{x}', t_i)$ ein. Wir integrieren über \mathbf{x}, \mathbf{x}' und $d(1), \dots, d(n)$. Schließlich summieren wir alle Beiträge und erhalten die S -Matrix. Diese Regeln entsprechen den Feynmanregeln der Störungstheorie. Die Graphen sind zunächst ein symbolischer Ausdruck für eine Rechenvorschrift, sie können aber auch recht physikalisch interpretiert werden. Eine Wellenfunktion ϕ_α propagiert mit G_0^+ bis zu einem Vertex, wo sie an einem Potential gestreut wird. Dann propagiert sie weiter zum nächsten Vertex usw., bis sie schließlich bis zur Zeit t_1 propagiert. Über alle möglichen Positionen der Vertices muß integriert werden, Streuung an beliebig vielen Vertices ist möglich.

10 S -Matrix und Wirkungsquerschnitt

Die S -Matrixelemente $S_{\beta\alpha}$ sind die Entwicklungskoeffizienten einer Wellenfunktion $\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)$, die aus einer einlaufenden Welle $\phi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ entsteht, gestreut, und dann nach auslaufenden Wellen $\phi_\beta(\mathbf{x}, t)$ entwickelt wird. Ein- und auslaufende Wellen sind dabei Lösungen der

freien Wellengleichung, da wir ja annehmen, daß das Potential für $|t| > T$ verschwindet. Im Kapitel 9 haben wir diese Matrixelemente berechnet, wir beziehen uns auf Gleichung (9.22):

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - i \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3x dt \phi_\beta^*(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{x}, t) \phi_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (10.1)$$

Wir sind an einer Streuung vom Anfangszustand in einen vom Anfangszustand verschiedenen Zustand interessiert, also ist $\alpha \neq \beta$. Die Wahrscheinlichkeit, daß das System, das ursprünglich im Zustand ϕ_α war, nach der Streuung im Zustand ϕ_β ist, wird demnach gegeben durch $|S_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha}|^2$.

Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand ϕ_α in Zustände ϕ_β , die in einem Energieintervall ΔE_β liegen, wird auch proportional zur Dichte dieser Endzustände sein. Wir bezeichnen diese Dichte mit $\rho(E)$.

Wir berechnen zunächst $\rho(E)$. Um möglichst der physikalischen Intuition folgen zu können, charakterisieren wir die Zustände durch ebene Wellen in einem endlichen Volumen mit Periode L .

Eindimensional:

$$u_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{2\pi}{L} n x} \quad (10.2)$$

Diese Wellenfunktionen sind periodisch: $u_n(x+L) = u_n(x)$ Wir definieren die Wellenzahl

$$\frac{2\pi}{L} n = k, \quad (10.3)$$

Es folgt unmittelbar

$$\frac{2\pi}{L} \Delta n = \Delta k, \quad (10.4)$$

oder

$$\Delta n = \frac{L}{2\pi} \Delta k. \quad (10.5)$$

Δn ist die Zahl der Zustände, die sich im Bereich Δk der Wellenzahl k befinden. Dreidimensional und auf den Impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ bezogen, ergibt dies

$$\Delta n = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{1}{\hbar^3} d^3 p. \quad (10.6)$$

Dies bezeichnet man auch als das für die Streuung erlaubte Phasenraumvolumen. Im Ortsraum steht das gesamte Volumen L^3 zur Verfügung, im Impulsraum ist das erlaubte Volumen $d^3 p$. Die Größe des Phasenraumvolumens wird auf die Größe der Phasenraumzelle $(2\pi\hbar)^3$ bezogen, Δn ist daher dimensionslos.

Mit der nichtrelativistischen Dispersionsbeziehung $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ wird nun:

$$\Delta n = \rho(E) dE = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m p d\Omega_{\mathbf{p}} dE. \quad (10.7)$$

Wir definieren die Übergangswahrscheinlichkeit per Zeiteinheit

$$\omega = \frac{1}{T} \int |S_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha}|^2 \rho(E_\beta) dE_\beta. \quad (10.8)$$

Um zum Wirkungsquerschnitt zu gelangen, müssen wir noch durch den Fluß der einlaufenden Teilchen dividieren. Dieser wurde im Kapitel 1 (1.9) berechnet, für unsere Wellenfunktion (10.2) ist dies:

$$I = \frac{p_\alpha}{mL^3} \quad (10.9)$$

Wir erhalten für den Wirkungsquerschnitt:

$$d\sigma = \frac{\omega}{I} = \frac{m^2}{T} \left(\frac{L^2}{2\pi\hbar} \right)^3 \frac{p_\beta}{p_\alpha} |S_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha}|^2 d\Omega_{\mathbf{p}_\beta} dE_\beta \quad (10.10)$$

Diese Form des Wirkungsquerschnitts hängt anscheinend noch von den willkürlichen Größen L und T ab. Um zu zeigen, daß dies tatsächlich nicht der Fall ist, betrachten wir die Streumatrix für zeitunabhängige Potentiale, obwohl dies zunächst unserer Annahme, daß das Potential für $t \rightarrow \pm\infty$ verschwindet, widerspricht.

Für zeitunabhängige Potentiale kann auch die Wellenfunktion ψ_α nach der Zeit separiert werden:

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \chi_\alpha(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_\alpha t} \quad (10.11)$$

Wir setzen diese Wellenfunktion in (10.1) ein und erhalten:

$$S_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha} = -i \frac{\lambda}{\hbar} \int d^3x u_\beta^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \chi_\alpha(\mathbf{x}) \int dt e^{\frac{i}{\hbar} (E_\beta - E_\alpha) t}, \quad (10.12)$$

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - 2\pi i \lambda T_{\beta\alpha} \delta(E_\beta - E_\alpha); \quad (10.13)$$

womit wir die Standardbeziehung

$$T_{\beta\alpha} = \int d^3x u_\beta^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \chi_\alpha(\mathbf{x}) \quad (10.14)$$

eingeführt haben. Die Wellenfunktionen $u_\alpha(\mathbf{x})$ sind dabei wie in (9.13) normiert. Vergleichen wir dies mit (4.6), so finden wir:

$$T_{\beta\alpha} = -\frac{2\pi\hbar^2}{m\lambda} f(\theta, \varphi) \cdot A^2, \quad (10.15)$$

wobei A gegeben ist durch die Normierung von $u_\alpha(\mathbf{x})$:

$$u_\alpha(\mathbf{x}) = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (10.16)$$

Um den Wirkungsquerschnitt zu berechnen, müssen wir nun $|S_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha}|^2$ auswerten.

Dies führt zunächst zum Quadrat der δ -Funktion, ein Ausdruck, der nicht definiert ist. Dies ist wohl eine Folge unserer widersprüchlichen Annahmen über die Zeitabhängigkeit des Potentials. Tatsächlich sollten wir ja nur über eine Zeitdauer T integrieren, während der das Potential von Null verschieden ist. Damit können wir bei der zweiten δ -Funktion einen "cut-off" einführen:

$$\left(\int dt e^{\frac{i}{\hbar} (E_\beta - E_\alpha) t} \right)^2 = 2\pi\hbar \delta(E_\beta - E_\alpha) \int_{-T/2}^{+T/2} dt e^{\frac{i}{\hbar} (E_\beta - E_\alpha) t} = 2\pi\hbar T \delta(E_\beta - E_\alpha) \quad (10.17)$$

und wir erhalten:

$$|S_{\beta\alpha} - \delta_{\beta\alpha}|^2 = \frac{\lambda^2}{\hbar} |T_{\beta\alpha}|^2 2\pi T \delta(E_\beta - E_\alpha). \quad (10.18)$$

Setzen wir dies in (10.10) ein, so hebt sich der Zeitfaktor T weg, wir können wieder T unendlich werden lassen, d.h. den cut-off entfernen. Wir erhalten:

$$d\sigma = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} |T_{\beta\alpha}|^2 m^2 \frac{p_\beta}{p_\alpha} \left(\frac{L^2}{2\pi\hbar} \right)^3 d\Omega_{\mathbf{p}_\beta} \delta(E_\beta - E_\alpha) dE_\beta. \quad (10.19)$$

Verwenden wir nun die Beziehung (10.15) zwischen der T -Matrix und der Streuamplitude und erinnern uns an die Normierung (10.2), so erhalten wir das bekannte Ergebnis:

$$d\sigma = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (10.20)$$

Die willkürlichen Größen L und T treten also im Ergebnis nicht mehr auf, wir können den Grenzübergang $T \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$ durchführen.

11 Matrixdarstellung und Dirac Notation

Wir haben gesehen, daß es angebracht ist, von einer S -Matrix zu sprechen. Es liegt nahe, an dieser Stelle den "Matrix" Charakter der Quantenmechanik stärker hervorzuheben und die sogenannte Dirac Notation einzuführen. Physikalisch werden dadurch Eigenschaften der S -Matrix verständlicher, mathematisch erlaubt es uns, auf die Theorie der linearen Operatoren in Hilberträumen Bezug zu nehmen. Es geht uns jedoch nicht darum, diese Theorie hier zu entwickeln.

Die quadratisch integrierbaren Funktionen $f(\mathbf{x})$ bilden einen Hilbertraum L^2 mit dem Skalarprodukt:

$$(f|g) = \int d^3x f^*(\mathbf{x})g(\mathbf{x}) \quad (11.1)$$

Selbstadjungierte Operatoren besitzen ein System von Eigenfunktionen, das eine orthonormale Basis des Hilbertraums bildet.

$$\begin{aligned} H\psi_{E,n}(\mathbf{x}) &= E\psi_{E,n}(\mathbf{x}) \\ (\psi_{E',n'}|\psi_{E,n}) &= \delta_{EE'}\delta_{nn'} \end{aligned} \quad (11.2)$$

E ist der Eigenwert des selbstadjungierten Operators H , n bezeichnet eine mögliche Entartung des Eigenwertes. Daß die Eigenfunktionen $\psi_{E,n}$ eine Basis bilden, heißt, daß sich jede Funktion f aus L^2 als Linearkombination der $\psi_{E,n}$ eindeutig darstellen läßt:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \sum_{E,n} f_{E,n} \psi_{E,n}(\mathbf{x}) \\ f_{E,n} &= \int d^3x \psi_{E,n}^*(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (11.3)$$

Die Funktionen $f_{E,n}$ bilden die Komponenten des Vektors f bezüglich der Basis $\psi_{E,n}$. Dies legt eine Notation nahe, die der Beschreibung eines Vektors als Element des Raumes entspricht, die sogenannte Dirac Notation. Die Eigenfunktionen $\psi_{E,n}$ entsprechen abstrakten Vektoren in einem Hilbertraum

$$\psi_{E,n} \sim |E, n\rangle. \quad (11.4)$$

Dies sind die “ket”-Vektoren. Dazu gibt es die dualen “bra”-Vektoren, die durch das lineare Funktional (bracket) definiert werden:

$$\langle E', n' | E, n \rangle = \delta_{E,E'} \delta_{n,n'} \quad (11.5)$$

Gleichung (11.2) schreibt sich nun:

$$H|E, n\rangle = E|E, n\rangle. \quad (11.6)$$

Da der Hilbertraum eine Norm besitzt, in der diese Vektoren orthonormal sind, folgt:

$$\langle E, n | = (|E, n\rangle)^+, \quad (11.7)$$

wobei $+$ hermitisch konjugiert bedeutet. Wir schreiben die Gleichung (11.3):

$$|f\rangle = \sum_{E,n} f_{E,n} |E, n\rangle \quad (11.8)$$

$$f_{E,n} = \langle E, n | f \rangle \quad (11.9)$$

Aus Gleichung (11.1) wird nun:

$$\langle f | g \rangle = \sum_{E', n'; E, n} f_{E', n'}^* f_{E, n} \langle E', n' | E, n \rangle = \sum_E f_{E, n}^* f_{E, n} \quad (11.10)$$

Lineare Operatoren bilden einen Vektor linear auf einen anderen Vektor ab:

$$A|f\rangle = |f_A\rangle \quad (11.11)$$

In Komponenten:

$$\sum_{E, n} f_{E, n} A|E, n\rangle = \sum_{E, n} f_{AE, n} |E, n\rangle \quad (11.12)$$

Es folgt unmittelbar die “Matrix”-Regel

$$f_{AE', n'} = \sum_{E, n} \langle E', n' | A | E, n \rangle f_{E, n}. \quad (11.13)$$

Es liegt nahe, $\langle E', n' | A | E, n \rangle$ als Matrixelement zu bezeichnen und (11.13) als Matrixdarstellung eines linearen Operators.

Natürlich hätte an Stelle der Basis $|E, n\rangle$ eine andere Basis gewählt werden können. Es sei $|k_\nu\rangle$ eine andere Basis, so daß

$$\langle k_\nu | k_\mu \rangle = \delta_{\nu\mu} \quad (11.14)$$

gilt. Wir entwickeln die die Elemente der k -Basis in Elemente der E -Basis.

$$|k_\nu\rangle = \sum_{E,n} \langle E, n | k_\nu \rangle |E, n\rangle \quad (11.15)$$

Orthogonalität bedeutet nun

$$\langle k_\mu | k_\nu \rangle = \sum_{E',n';E,n} \langle k_\mu | E', n' \rangle \langle E', n' | E, n \rangle \langle E, n | k_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu} \quad (11.16)$$

Oder wegen der Orthogonalität der E -Basis:

$$\sum_{E,n} \langle E, n | k_\mu \rangle^* \langle E, n | k_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu}, \quad (11.17)$$

wobei natürlich $\langle E, n | k_\mu \rangle^* = \langle k_\mu | E, n \rangle$ ist. Die Vollständigkeitsrelation erhalten wir aus der Umkehrtransformation:

$$|E, n\rangle = \sum_{\nu} \langle k_\nu | E, n \rangle |k_\nu\rangle. \quad (11.18)$$

Wir setzen für $|k_\nu\rangle$ aus (11.15) ein

$$|E, n\rangle = \sum_{\nu, E', n'} \langle k_\nu | E, n \rangle \langle E', n' | k_\nu \rangle |E', n'\rangle. \quad (11.19)$$

Daraus schließen wir:

$$\sum_{\nu} \langle k_\nu | E, n \rangle \langle k_\nu | E', n' \rangle^* = \delta_{E, E'} \delta_{n, n'}. \quad (11.20)$$

Dies ist die Vollständigkeitsrelation.

In der Quantenmechanik erweitert man nun diesen Formalismus auf Zustände, die auf Dirac'sche δ -Funktionen normiert sind. So kann man auch selbstadjungierte Operatoren mit einem kontinuierlichen Spektrum zulassen. Die Summen werden dann durch Integrale ersetzt. Ein wichtiges Beispiel sind die Impulseigenfunktionen:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} | \mathbf{k} \rangle &= \hbar \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle \\ \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (11.21)$$

Ebenso können wir Ortseigenfunktionen betrachten.

$$\begin{aligned} \mathbf{x} | \mathbf{x}_0 \rangle &= \mathbf{x}_0 | \mathbf{x}_0 \rangle \\ \langle \mathbf{x}'_0 | \mathbf{x}_0 \rangle &= \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}'_0) \end{aligned} \quad (11.22)$$

Die Wellenfunktionen der Quantenmechanik entsprechen nun den Komponenten des Zustandes $|\psi\rangle$ in der Ortsbasis:

$$|\psi\rangle = \int d^3x_0 \psi(\mathbf{x}_0)|\mathbf{x}_0\rangle \quad (11.23)$$

Wir kennen die Impulseigenfunktionen:

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle \quad (11.24)$$

mit der Umkehrtransformation:

$$|\mathbf{x}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|\mathbf{k}\rangle \quad (11.25)$$

Orthogonalität:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \quad (11.26)$$

Vollständigkeit:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{-i(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\cdot\mathbf{k}} = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \quad (11.27)$$

Ein anderes wichtiges System sind die Eigenfunktionen des Drehimpulses, die Kugelflächenfunktionen:

$$|l, m\rangle = \int \sin\theta d\theta d\varphi Y_{lm}(\theta, \varphi)|\theta, \varphi\rangle, \quad (11.28)$$

$$\langle\theta', \varphi'|\theta, \varphi\rangle = \frac{1}{\sin\theta} d\theta d\varphi \quad (11.29)$$

wobei $|\theta, \varphi\rangle$ die Eigenfunktionen der Winkel θ und φ sind.

Orthogonalität:

$$\int \sin\theta d\theta d\varphi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (11.30)$$

Vollständigkeit:

$$\sum_{l,m} Y_{lm}(\theta', \varphi') Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi'). \quad (11.31)$$

Die Form der "Einheitsmatrix" auf der rechten Seite von (11.31) entspricht der Normierung:

$$\int \sin\theta d\theta d\varphi \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') = 1. \quad (11.32)$$

Dies entspricht auch der Umrechnung in Polarkoordinaten:

$$\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{1}{r^2} \delta(r-r') \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta-\theta') \delta(\varphi-\varphi'). \quad (11.33)$$

Wir wollen nun die Impulsbasis in eine Drehimpulsbasis zerlegen. Wir wissen aus Kapitel 5 (5.26)

$$e^{i\mathbf{k}r \cos \vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \quad (11.34)$$

Wir erinnern an das Additionstheorem der Kugelflächenfunktionen:

$$(2l+1)P_l(\cos \vartheta) = 4\pi \sum_m Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (11.35)$$

wobei θ_k, φ_k die Polarwinkel eines Vektors \mathbf{k} und θ, φ die Polarwinkel eines Vektors \mathbf{x} sind. Diese beiden Vektoren schließen einen Winkel ϑ ein, so daß $\mathbf{x} \cdot \mathbf{k} = rk \cos \vartheta$ ist.

Setzen wir dies in (11.34) ein, so erhalten wir die Impulseigenfunktionen, entwickelt nach den Kugelflächenfunktionen:

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{l,m} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (11.36)$$

Die ebenen Wellen sind Eigenfunktionen des freien Hamiltonoperators zur Energie $E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$, ebenso die Funktionen $j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Wir müssen noch deren Normierung bestimmen. Gemäß (11.33) wollen wir diese Eigenfunktionen so normieren:

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \frac{1}{k^2} \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (11.37)$$

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

Mit (11.36) erhalten wir aus (11.26)

$$\int_0^r r^2 dr j_l(k'r) j_l^*(kr) = \frac{\pi}{2} \frac{1}{k^2} \delta(k - k') \quad (11.38)$$

Die gemäß (11.37) normierten Energieeigenfunktionen sind daher:

$$\psi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi) = i^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (11.39)$$

In der Dirac Notation:

$$|E, l, m\rangle = i^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi) |\theta, \varphi\rangle |r\rangle \quad (11.40)$$

Gleichung (11.36) wird in dieser Notation

$$|\mathbf{k}\rangle = \sum_{l,m} Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) |E, l, m\rangle \quad (11.41)$$

$$|E, l, m\rangle = \int \sin \theta_k d\theta_k d\varphi_k Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k) |\mathbf{k}\rangle. \quad (11.42)$$

Ist ein linearer Operator in der \mathbf{k} -Basis gegeben, so können wir ihn mit (11.42) in die E, l, m -Basis umrechnen:

$$\langle E', l', m' | A | E, l, m \rangle = \int \sin \theta_{k'} d\theta_{k'} d\varphi_{k'} Y_{l'm'}^*(\theta_{k'}, \varphi_{k'}) \langle \mathbf{k}' | A | \mathbf{k} \rangle Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k) \sin \theta_k d\theta_k d\varphi_k \quad (11.43)$$

Am Ende wollen wir noch einen Beweis für das Additionstheorem (11.35) andeuten. Dabei machen wir wieder von gruppentheoretischen Argumenten Gebrauch und erinnern uns, daß die Kugelflächenfunktionen zu einer Drehimpulsdarstellung mit Drehimpuls j gehören. Kombiniert man zwei solche Darstellungen, so erhält man je eine Darstellung mit Drehimpuls $2j, 2j - 1, \dots, 0$. Die Kombination, die zum Drehimpuls $j = 0$ gehört, ist eine Invariante, sie läßt sich leicht angeben.

$$\sum_m Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) = \text{Invariante} \quad (11.44)$$

Wir wollen diese Invariante für $\theta_2 = \varphi_2 = 0$ auswerten. Wir wissen, daß:

$$Y_{lm}(0, 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m,0} \quad (11.45)$$

und damit

$$\text{Invariante} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_{l,0}^*(\theta_1, \varphi_1) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_1) \quad (11.46)$$

Der Winkel θ_1 ist der Polarwinkel des ersten Vektors. Da der zweite Vektor bei dieser Wahl des Koordinatensystems in die z -Achse weist, ist es auch der von den beiden Vektoren eingeschlossene Winkel ϑ . Dieser ändert sich natürlich bei einer Drehung nicht (Invarianz des Skalarprodukts).

Wir finden:

$$(2l+1)P_l(\cos \vartheta) = 4\pi \cdot \text{Invariante} \quad (11.47)$$

und damit (11.35).

12 S-Matrix und Erhaltungssätze

Erhaltungssätze sind dadurch charakterisiert, daß die Erzeugenden der zugrundeliegenden Symmetrie mit dem Hamiltonoperator vertauschen.

Bei zeitunabhängigen Hamiltonoperatoren kann die Schrödingergleichung formal integriert werden

$$\psi(\mathbf{x}, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_0)} \psi(\mathbf{x}, t_0). \quad (12.1)$$

Nennen wir die Erzeugende L , so folgt

$$L\psi(\mathbf{x}, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_0)} L\psi(\mathbf{x}, t_0). \quad (12.2)$$

Aus der Definition der S -Matrix folgt, daß L auch mit der S -Matrix vertauscht. Beide sind demnach gleichzeitig diagonalisierbar.

Wir wollen diesen Sachverhalt für Zentralpotentiale und Drehimpuls näher untersuchen.

Wir gehen von den Gleichungen (10.13), (10.15) aus und setzen in die T -Matrix den Ausdruck (2.8) für die Streuamplituden ein:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} + \frac{1}{4\pi} \frac{\hbar^2}{m k_\beta} \delta(E_\beta - E_\alpha) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\vartheta_l} - 1) P_l(\cos\theta). \quad (12.3)$$

Der Winkel θ , der Streuwinkel, ist der Winkel zwischen den Impulsen des einlaufenden Teilchens (\mathbf{k}_α) und des auslaufenden Teilchens (\mathbf{k}_β). Wir verwenden nun die Gleichung (11.35) und erhalten

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} + \frac{1}{k_\beta^2} \delta(k_\beta - k_\alpha) \sum_{l=0, m=-l \dots +l}^{\infty} (e^{2i\vartheta_l} - 1) Y_{lm}^*(\theta_\beta, \varphi_\beta) Y_{lm}(\theta_\alpha, \varphi_\alpha). \quad (12.4)$$

Wir erinnern uns, daß die Form der S -Matrix auf die Wellenfunktionen $u_\alpha(\mathbf{x})$ aus (10.16) bezogen ist. $\delta_{\beta\alpha}$ bedeutet demnach die Impuls- δ -Funktion.

$$\delta_{\beta\alpha} = \frac{1}{k_\beta^2} \delta(k_\beta - k_\alpha) \frac{1}{\sin\theta_\beta} \delta(\theta_\beta - \theta_\alpha) \delta(\varphi_\beta - \varphi_\alpha) \quad (12.5)$$

Auf Grund der Vollständigkeitsrelation der Kugelflächenfunktionen wird nun aus (12.4):

$$S_{\beta\alpha} = \frac{1}{k_\beta^2} \delta(k_\beta - k_\alpha) \sum_{l=0, m=-l \dots +l}^{\infty} Y_{lm}^*(\theta_\beta, \varphi_\beta) e^{2i\vartheta_l} Y_{lm}(\theta_\alpha, \varphi_\alpha). \quad (12.6)$$

Gehen wir nun von der Impulsbasis zur Drehimpulsbasis gemäß den Ausführungen im vorhergehenden Kapitel, (11.43), über, so erhalten wir

$$\langle k_\beta, l_\beta, m_\beta | S | k_\alpha, l_\alpha, m_\alpha \rangle = \frac{1}{k_\beta^2} \delta(k_\beta - k_\alpha) \delta_{l_\beta, l_\alpha} \delta_{m_\beta, m_\alpha} e^{2i\vartheta_{l_\beta}}. \quad (12.7)$$

Die S -Matrix ist in dieser Basis diagonal. Die diagonalen Matrixelemente sind von der Form $e^{2i\vartheta_l}$. Für reelles ϑ_l ist die S -matrix unitär.

Die Matrixelemente hängen nicht von der Quantenzahl m ab - auch dies folgt aus der Rotationsinvarianz. Gleichung (12.7) veranschaulicht nochmals die Bedeutung der Streuphasen.

13 Kausalität und Analytizität

Auch in der klassischen, nichtrelativistischen Physik gibt es ein Kausalitätsprinzip, das besagt, daß ein System auf eine Anregung zeitlich nicht vor dieser Anregung reagieren kann. Dieses Prinzip läßt sich leicht auf die Quantenmechanik übertragen. Dies hat

jedoch mit dem Kausalitätsprinzip, wie es im Zusammenhang mit der Interpretation der Quantenmechanik und dem Meßprozeß diskutiert wird, nichts zu tun.

Wir gehen hier von der inhomogenen Schrödingergleichung mit zeitunabhängigem Potential aus:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') = \hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t') \quad (13.1)$$

und betrachten die rechte Seite als Anregung, die das System zum Schwingen bringt. Wir werden sehen, daß der anfangs erwähnte Kausalitätsbegriff unmittelbar mit Analytizitätseigenschaften der Greenschen Funktion zusammenhängt, und zwar in der Energievariablen E , die bei der Fouriertransformation nach der Zeit auftritt.

Für $H = H_0$ kennen wir die Greenschen Funktionen (8.10):

$$\begin{aligned} G_0^+(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3k \frac{e^{-i\omega t} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\omega - \frac{\hbar k^2}{2m} + i\epsilon} \\ &= -i\theta(t) \left[\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right]^{3/2} e^{i\frac{m}{2\hbar} \frac{\mathbf{x}^2}{t}} \\ &= -i\theta(t) G_0(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (13.2)$$

wobei $G_0(\mathbf{x}, t)$ eine Lösung der homogenen Schrödingergleichung ist, die die Anfangsbedingung

$$G_0(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x}) \quad (13.3)$$

erfüllt.

Charakteristisch für (13.2) ist das Auftreten der Stufenfunktion. Dies besagt, daß es eine Lösung der inhomogenen Gleichung (13.1) gibt, die eben vor der Anregung von dieser nichts weiß und die Lösung $G = 0$ zuläßt.

Betrachten wir nun die Fouriertransformation der θ -Funktion:

$$\tilde{\theta}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega+i\epsilon)t} \theta(t) dt = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(\omega + i\epsilon)}. \quad (13.4)$$

Hier haben wir ω in die obere komplexe Ebene fortgesetzt, um Konvergenz des Integrals zu erreichen. $\tilde{\theta}(\omega)$ ist dann als Limes $\epsilon \rightarrow 0$ zu verstehen.

Wir sehen, daß $\tilde{\theta}(\omega)$, die Fouriertransformierte der Stufenfunktion, in der oberen ω -Halbebene analytisch ist. Die verallgemeinerte Funktion $\tilde{\theta}(\omega)$ kann demnach als Limes einer analytischen Funktion verstanden werden, wenn man mit der komplexen Variablen (ω) an den Rand des Analytizitätsbereiches geht.

Wir machen die Rückkehrtransformation von (13.4)

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega + i\epsilon} \quad (13.5)$$

Der Integrand ist analytisch in der oberen Halbebene. Für $t < 0$ verschwindet der Integrand auf dem unendlich weit entfernten Kreis, der den Integrationsweg in der oberen

Halbebene schließt (vgl. Abb. S.26). Das Integral verschwindet, da der Integrand im Inneren des Integrationsweges (obere Halbebene) analytisch ist.

Wir sehen also, daß Kausalität Analytizität in der oberen Halbebene und Analytizität in der oberen Halbebene Kausalität bedingt.

Für $t > 0$ schließen wir den Integrationsweg in der unteren Halbebene, wenden den Residuensatz an und erhalten den Wert eins für das Integral.

Differenzieren wir $\theta(t)$ in (13.5) nach der Zeit, so erhalten wir

$$\dot{\theta}(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} = \delta(t), \quad (13.6)$$

ein bekanntes Ergebnis. Gleichung (13.6) erlaubt es uns unmittelbar, G_0^+ durch G_0 wie in (13.2) zu definieren.

Diese Gedanken lassen sich leicht auf die Lösungen der Gleichung (13.1) mit zeitunabhängigem Potential übertragen.

Wir wissen, daß die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung gemäß (9.14) vollständig sind.

Betrachten wir die Funktion

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') = \int_{\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha}(t-t')} u_{\alpha}(\mathbf{x}) u_{\alpha}^*(\mathbf{x}'), \quad (13.7)$$

so ist klar, daß sie Lösung der homogenen Gleichung ist. Für $t = t'$ folgt aus der Vollständigkeitsrelation für das System $u_{\alpha}(\mathbf{x})$:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (13.8)$$

Definieren wir nun die Funktion G^+ wie folgt:

$$G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t - t') = -i\theta(t - t')G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t - t'), \quad (13.9)$$

so folgt aus (13.8) und (13.6), daß G^+ die gewünschte Lösung der Gleichung (13.1) ist. Sie verschwindet für $t < t'$.

Wir können (13.1) direkt integrieren, wenn wir nach der Zeit fouriertransformieren und den \mathbf{x} -abhängigen Teil anstatt nach ebenen Wellen nach dem Funktionssystem u_{α} entwickeln.

Wir definieren zunächst $G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E)$ und erhalten:

$$\begin{aligned} G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) &= \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i\frac{E}{\hbar}t} G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E) \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \int dE \int_{\alpha} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \frac{u_{\alpha}(\mathbf{x}) u_{\alpha}^*(\mathbf{x}')}{E - E_{\alpha} + i\epsilon} \end{aligned} \quad (13.10)$$

$$G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E) = \hbar \int_{\alpha} \frac{u_{\alpha}(\mathbf{x}) u_{\alpha}^*(\mathbf{x}')}{E - E_{\alpha} + i\epsilon} \quad (13.11)$$

Die Singularität auf der reellen E -Achse wurde wieder so gewählt, daß die Funktion analytisch in der oberen Halbebene ist. Um in der oberen Halbebene den Integrationsweg schließen zu können, muß der Integrand verschwinden. Nehmen wir an, daß für großes $|E|$ die Greensche Funktion G^+ sich wie die freie Greensche Funktion G_0 verhält, so ist dies der Fall. Aus (13.2) folgt:

$$\begin{aligned} G_0^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}', E) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \end{aligned} \quad (13.12)$$

Dieses Integral haben wir von (3.10) übernommen.

Die Konjugationseigenschaft von G^+ ist aus (13.11) leicht ersichtlich.

$$G^{+*}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E) = \hbar \int_{\alpha} \frac{u_{\alpha}(\mathbf{x}') u_{\alpha}^*(\mathbf{x})}{E^* - E_{\alpha} - i\epsilon} \quad (13.13)$$

Wir nehmen nun an, daß das Potential außer den Streuzuständen bei positiver Energie auch Bindungszustände zuläßt. Diese müssen, wie wir aus dem asymptotischen Verhalten bei $r \rightarrow \infty$ wissen, für Potentiale, die in diesem Limes verschwinden, bei negativer Energie liegen (siehe (5.20)). Sie werden zu einem diskreten Spektrum gehören. Die Energieeigenwerte nennen wir E_n , sie sind negativ, die dazugehörigen Eigenfunktionen nennen wir u_n :

$$G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E) = \hbar \sum_n \frac{u_n(\mathbf{x}) u_n^*(\mathbf{x}')}{E - E_n + i\epsilon} + \hbar \int d\alpha \frac{u_{\alpha}(\mathbf{x}) u_{\alpha}^*(\mathbf{x}')}{E - E_{\alpha} + i\epsilon}. \quad (13.14)$$

Aus (13.14) ist ersichtlich, daß die Greensche Funktion G^+ als Funktion der ins Komplexe fortgesetzten Energievariablen auf der negativen reellen Achse Pole besitzt. Der ortsabhängige Teil wird sicher von der Wellenzahl k und damit von \sqrt{E} abhängen. Dies führt zu einem Schnitt längs der positiven reellen E -Achse.

Die Greensche Funktion ist einer Messung direkt nicht zugänglich. Sie ist aber ein wichtiges Hilfsmittel zur Berechnung der S -Matrix. Wir stellen uns nun die Frage, wie sich das analytische Verhalten der Greenschen Funktion auf das analytische Verhalten der S -Matrix als Funktion der komplexen Energievariablen E auswirkt.

14 Dispersionsrelation für die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung

Die Streuamplitude ist eine Funktion der Energie und des Streuwinkels. Wir wollen den Streuwinkel festhalten und die Abhängigkeit der Streuamplitude von der komplexen Variablen E untersuchen. Für den Streuwinkel wählen wir die Vorwärtsrichtung und übernehmen die T -Matrix aus (10.14):

$$T_{\alpha\alpha} = \int d^3 x u_{\alpha}^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \chi_{\alpha}(\mathbf{x}). \quad (14.1)$$

Die Wellenfunktion $\chi_\alpha(\mathbf{x})$ erhalten wir für zeitunabhängige Potentiale aus (9.7). Wir schreiben das Ergebnis gleich mit Hilfe der Fouriertransformierten von G^+ (13.10),

$$\chi_\alpha(\mathbf{x}) = u_\alpha(\mathbf{x}) + \lambda \int d^3 x' G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E_\alpha) V(\mathbf{x}) u_\alpha(\mathbf{x}). \quad (14.2)$$

Dies ergibt für das T -Matrixelement

$$T_{\alpha\alpha} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 x V(\mathbf{x}) + \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \int d^3 x e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} V(\mathbf{x}) G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E_\alpha) V(\mathbf{x}') d^3 x' \quad (14.3)$$

wobei wir für $u_\alpha(\mathbf{x})$ die ebene Wellen (9.15) eingesetzt haben.

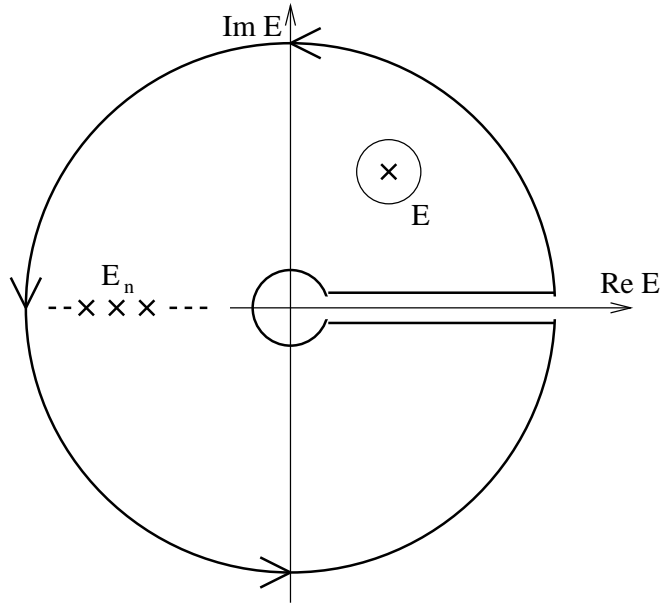
Nun verwenden wir die Kenntnisse über das analytische Verhalten der Greenschen Funktion, um über $T(E) \equiv T_{\alpha\alpha}(E)$ etwas zu erfahren.

Wir nehmen an, daß die im letzten Kapitel gefundenen Singularitäten von $G^+(E)$ die einzigen sind. Dies mag eine Einschränkung des Potentials bedeuten - ohne dieses aber explizit festzulegen, können wir über weitere mögliche Singularitäten keine Information erhalten.

$T(E)$ ist demnach eine analytische Funktion mit Polen auf der negativen reellen Achse und einem Schnitt längs der positiven reellen Achse in der komplexen E -Ebene.

Für große Energien $|E| \rightarrow \infty$ nehmen wir nun an, daß die Greensche Funktion G^+ sich asymptotisch wie die freie Greensche Funktion G_0^+ verhält - bei sehr hohen Energien soll das Potential beim Streuprozess immer weniger Einfluß haben. Für G_0^+ ergibt sich aus (13.12), daß der energieabhängige Faktor e^{ikr} für k in der oberen Halbebene für $|k| \rightarrow \infty$ nach Null geht. Die obere Halbebene in k entspricht jedoch dem ersten Riemannschen Blatt der komplexen E -Ebene.

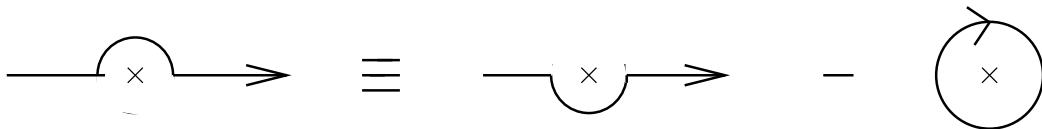
Wir fassen zusammen: Die Funktion $F(E) = T(E) - (2\pi)^{-3} \int d^3 x V(\mathbf{x})$ hat Pole auf der negativen reellen Achse, einen Schnitt auf der positiven reellen Achse und verschwindet für $|E| \rightarrow \infty$ auf dem ersten Blatt. Bis auf die erwähnten Singularitäten ist $F(E)$ analytisch im ersten Blatt der komplexen E -Ebene.



Wir verwenden nun den Cauchyschen Integralsatz:

$$F(E) = \frac{1}{2\pi i} \oint dE' \frac{F(E')}{E - E'}, \quad (14.4)$$

wobei wir um einen Punkt E im ersten Blatt längs eines Kreises in der komplexen Ebene integrieren (siehe Abb.). Diesen Kreis deformieren wir, bis wir die in der Abbildung angegebene Kontur erreichen. Dabei müssen wir den Integrationsweg über die Pole bei negativer Energie hinwegheben:



Dies ergibt jedesmal einen Beitrag $\frac{\Gamma(E)}{E - E_n}$, wobei $\Gamma(E_n)$ das Residuum von $F(E)$ an der Stelle E_n ist.

Wir erhalten nun das Ergebnis:

$$F(E) = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{F(E') dE'}{E - E'} + \sum_n \frac{\Gamma_n}{E - E_n}, \quad (14.5)$$

wobei nun über die in der Abbildung gezeichnete Kontur zu integrieren ist. Der Integrand verschwindet allerdings auf dem im Unendlichen laufenden Kreis. Auch der Kreis um den Ursprung liefert keinen Beitrag. Das kann man folgendermaßen einsehen: Die Greensche Funktion in der Darstellung (13.14) enthält in dem Integral über α im wesentlichen ein Integral über $d^3 k_\alpha = k_\alpha^2 dk_\alpha d\Omega_\alpha$. Der Beitrag von $k_\alpha^2 = \frac{E_\alpha 2m}{\hbar^2}$ erreicht, daß die Greensche Funktion in der Variablen E von links zum Ursprung stetig

ist. Daher liefert der innere, kleine Kreis auch keinen Beitrag. Wir verbleiben mit dem Integrationsweg wie in (14.5) angegeben. Dies können wir noch anders schreiben:

$$F(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\infty} dE' \frac{F(E' + i\eta) - F(E' - i\eta)}{E - E'} + \sum_n \frac{\Gamma_n}{E - E_n} \quad (14.6)$$

Im Nenner des Integrals haben wir die η -Abhängigkeit weggelassen, da für ein E , das nicht auf der reellen Achse liegt, der Nenner analytisch ist. E liegt wie in der Abbildung gezeichnet in der oberen Halbebene.

Wir gehen zurück zu (14.3) und berechnen $F^*(E + i\eta)$ unter Verwendung von (13.13):

$$\begin{aligned} F^*(E + i\eta) &= \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \int d^3x d^3x' e^{-i\mathbf{k}_{\alpha, -i\eta} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} V(\mathbf{x}) G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E + i\eta)^* V(\mathbf{x}') \\ &= \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \int d^3x d^3x' e^{i\mathbf{k}_{\alpha, -i\eta} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} V(\mathbf{x}) G^-(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E - i\eta) V(\mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (14.7)$$

Da wir die Greensche Funktion bei einer komplexen Energie $E - i\eta$ betrachten unterscheidet sich G^- nicht von G^+ . In (14.7) haben wir $\mathbf{k}_{\alpha, -i\eta}$ geschrieben um anzudeuten, daß jetzt $\hbar k = \sqrt{2m(E - i\eta)}$ gilt. Daraus folgt:

$$F^*(E + i\eta) = F(E - i\eta), \quad (14.8)$$

wobei $E - i\eta$ gerade im ersten Blatt unter der reellen Achse liegt. Im Integral (14.5) steht nun:

$$F(E' + i\eta) - F(E' - i\eta) = 2i \operatorname{Im} F(E' + i\eta). \quad (14.9)$$

Wir finden demnach

$$F(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dE' \frac{\operatorname{Im} F(E')}{E - E'} + \sum_n \frac{\Gamma_n}{E - E_n} \quad (14.10)$$

Die Funktion $F(E)$, d.h. ihr Real- und Imaginärteil, ist durch den Imaginärteil von $F(E)$ auf der positiven reellen Achse und den Residuen bei den Polen $E = E_n$ festgelegt.

Wir drücken dieses Ergebnis noch durch die Streuamplitude (10.15) aus:

$$T(E) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda} \frac{1}{(2\pi)^2} f(0). \quad (14.11)$$

$F(E)$ unterscheidet sich von $T(E)$ nur durch eine reelle Konstante; wir erhalten daher:

$$f_E(0) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dE' \frac{\operatorname{Im} f_{E'}(0)}{E - E'} + \frac{(2\pi)^2 m\lambda}{\hbar^2} \left(\sum_n \frac{\Gamma_n}{E - E_n} + (2\pi)^{-3} \int d^3x V(\mathbf{x}) \right). \quad (14.12)$$

Das optische Theorem (2.14) verbindet noch $\operatorname{Im} f(0)$ mit dem totalen Wirkungsquerschnitt, so daß unter dem Integral der Messung zugängliche Größen stehen. Schließlich

können wir mit E von der oberen Halbebene gegen die reelle Achse gehen, so daß auch f_E als Streuamplitude bei physikalisch realisierbarer Energie der Messung zugänglich wird.

Gleichung (14.12) kann nun entweder als Überprüfung unseres Kausalitätsbegriffes gesehen werden, sie kann aber auch dazu dienen, aus bekannten Meßdaten (etwa $\sigma_{\text{tot}}(E)$) weitere Information über nicht gemessene Größen (etwa $f_E(0)$ oder Γ_n) zu gewinnen.