

Streuprozesse in der Quantenmechanik und Bornsche Reihe

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie
WWU Münster, Wintersemester 2012/13

Daniel Schwartländer, Christoph Kabelitz

1 Einleitung

Bei Streuexperimenten werden Teilchen an anderen Teilchen oder an Materie gestreut. Solche Experimente sind von hoher Relevanz, da mit ihnen Rückschlüsse auf die Wechselwirkungen zwischen den Streupartnern und schlussendlich auf den Aufbau der Materie gezogen werden können.

Zur Auswertung der Experimente wird eine theoretische Beschreibung benötigt. Diese soll in ihren Grundlagen im Folgenden durch die quantenmechanische Behandlung des Streuprozesses gegeben werden.

2 Grundlagen

2.1 Experimenteller Aufbau eines Streuexperiments

Der experimentelle Aufbau eines Streuexperimentes ist schematisch in Abbildung 1 dargestellt. Für ein solches Experiment müssen einige Rahmenbedingungen erfüllt sein. Diese sind (nach [1]):

1. $l, d \gg \lambda \Leftrightarrow$ kleine Impulsunschärfe ($\lambda \triangleq$ de-Broglie Wellenlänge der Streuteilchen).
2. $l, d \gg a \Leftrightarrow$ Teilchen müssen Target vollständig „sehen“.
3. $D \gg a, \lambda \Leftrightarrow$ Teilchen müssen den WW-Bereich wieder verlassen haben.
4. $l, d \gg \sqrt{\lambda D} \Leftrightarrow$ Wellenpaket soll nicht merklich zerfließen.
5. $d \ll D \sin \theta \Leftrightarrow$ Strahl darf den Detektor nicht direkt treffen, da dieser sonst möglicherweise zerstört wird.
6. Ausreichende Luminosität.

Im Folgenden werden außerdem nur Potentiale mit endlicher Reichweite betrachtet, d.h. das Streupotential fällt schneller als r^{-1} ab.

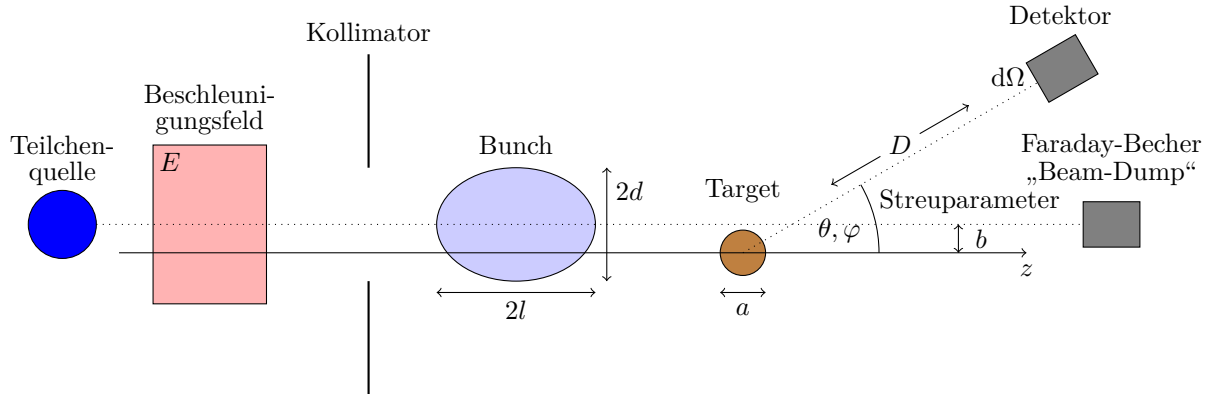


Abbildung 1: Experimenteller Aufbau (schematisch).

2.2 Wirkungsquerschnitt

Der Wirkungsquerschnitt ist durch

$$d\sigma = \frac{\text{Teilchen im Raumwinkel } d\Omega \text{ pro Zeit}}{\text{Einlaufende Teilchen pro Zeit und Fläche}} \quad (1)$$

definiert. Er besitzt die Dimension einer Fläche. Mithilfe der Teilchenstromdichten \vec{j}_{ein} und \vec{j}_{streu} der einlaufenden bzw. der gestreuten Welle lässt sich der Wirkungsquerschnitt durch

$$d\sigma = \frac{(\vec{j}_{\text{streu}})_r r^2 d\Omega}{(\vec{j}_{\text{ein}})_z} \quad (2)$$

ausdrücken. Dabei bezeichnet der Index r die Radial- und der Index z die z -Komponente der jeweiligen Teilchenstromdichte.

2.3 Streuung einer ebenen Welle

Zunächst wird die Streuung einer ebenen Welle $\psi = e^{i\vec{k}\vec{r}}$ betrachtet. Dabei wird angenommen, dass die gestreute Welle mithilfe einer Kugelwelle von der Form $\psi = \frac{e^{ikr}}{r} f(E, \theta, \varphi)$ beschrieben werden kann. Der im Allgemeinen von der Energie der einfallenden Teilchen E und dem Streuwinkel θ bzw. φ abhängige Faktor $f(E, \theta, \varphi)$ wird Streuamplitude genannt. In der Beschreibung wurde außerdem angenommen, dass sich die Energie der Teilchen nicht verändert. Dies ist sinnvoll, da in der Schrödinger-Theorie mit einem hermiteschen Potential $V(\vec{r})$ ohnehin nur elastische Streuungen beschrieben werden können.

Aus den angegebenen Wellengleichungen für die einlaufende und für die gestreute Welle können die Teilchenstromdichten

$$\vec{j}_{ein} = \frac{\hbar \vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v} \quad \text{und} \quad (\vec{j}_{streu})_r = \frac{v}{r^2} |f(E, \theta, \varphi)|^2 \quad (3)$$

aus der allgemein für Lösungen ψ der Schrödinger-Gleichung gültigen Formel

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} [(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*(\nabla\psi)] \quad (4)$$

berechnet werden. Setzt man diese in Gleichung (2) ein, so erhält man den differentiellen Wirkungsquerschnitt

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

Allerdings wurde

- die Charakteristik des Teilchenpakets nicht beachtet,
- die zeitliche Entwicklung vernachlässigt und
- die Interferenz der ein- und auslaufenden Welle nicht berücksichtigt.

Daher ist eine genauere Analyse des Streuprozesses notwendig.

3 Streuung eines Wellenpaketes

3.1 Randbedingung des Streuproblems

Zur Beschreibung der Streuung eines Wellenpaketes muss man sich zunächst die Randbedingung des Streuproblems überlegen. Dazu betrachtet man ein Streuteilchen weit entfernt vom Streupotential. Dieses bewegt sich dort wie ein freies Teilchen und erfüllt daher die Helmholtz-Gleichung

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = 0. \quad (5)$$

Arnold Sommerfeld hat diese Gleichung näher untersucht und fand heraus, dass ihre Lösung für Streuzustände von der Form

$$\psi(\vec{r}, \vec{k}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(k, \theta, \varphi) \quad (6)$$

ist, wobei der Phasenfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ weggelassen wurde. Dies entspricht gerade der Superposition einer einlaufenden ebenen Welle und einer mit dem Phasenfaktor $f(k, \theta, \varphi)$ modulierte Kugelwelle (vgl. Abschnitt 2.3).

3.2 Lösen des Streuproblems

Der Ausgangspunkt zur Beschreibung der Streuung eines Wellenpakets ist die Einteilchen Schrödingergleichung

$$i\hbar \dot{\psi}(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t). \quad (7)$$

Mit dem Separationsansatz $\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\vec{r}, \vec{k})$ mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ erhält man die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) - E \right) \psi(\vec{r}, \vec{k}) = 0, \quad (8)$$

die mit der Sommerfeldschen Randbedingung zu lösen ist.

Sei das einlaufende Wellenpaket $A(\vec{r}) = \int d^3k \tilde{A}(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ im Ortsraum um $\vec{r} = 0$ und im Impulsraum um $\vec{k} = \vec{k}_0$ konzentriert, so folgt für die Wellenfunktion mit Streuparameter \vec{b} der Ansatz

$$\psi_{\vec{b}}(\vec{r}, t) = \int d^3k \tilde{A}(\vec{k} - \vec{k}_0) \psi(\vec{r}, \vec{k}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \underbrace{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}}}_{\text{Verschiebung im Ortsraum um } \vec{b}}. \quad (9)$$

Dieser kann mit den Näherungen erster Ordnung

- $\vec{k} = \vec{k}_0 + (\vec{k} - \vec{k}_0)$
- $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} [\vec{k}_0 + (\vec{k} - \vec{k}_0)]^2 \approx \frac{\hbar^2}{2m} [\vec{k}_0^2 + 2\vec{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)]$
 $\approx E_0 + \vec{v}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) \hbar$
- $|k| \approx \sqrt{k_0^2 + 2\vec{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)} \approx |\vec{k}_0| + \frac{\vec{k}_0}{|\vec{k}_0|} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)$
- $f(k, \theta, \varphi) = |f(k, \theta, \varphi)| e^{i\phi(k, \theta, \varphi)} \approx \underbrace{|f(k_0, \theta, \varphi)| e^{i\phi(k_0, \theta, \varphi)}}_{=f(k_0, \theta, \varphi)} e^{i\vec{S}(\vec{k}_0) \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)}$

mit $\vec{S}(\vec{k}_0) = \nabla_k \phi(\vec{k})|_{\vec{k}_0}$

und durch Einsetzen der Sommerfeldschen Randbedingung zu

$$\psi_{\vec{b}}(\vec{r}, t) = \int d^3k \tilde{A}(\vec{k} - \vec{k}_0) \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(k, \theta, \varphi) \right) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}} \quad (10)$$

$$\approx e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} e^{i\vec{k}_0 \cdot (\vec{r} - \vec{b})} \int d^3k \tilde{A}(\vec{k} - \vec{k}_0) e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot (\vec{v}_0 t - \vec{r} + \vec{b})}$$

$$+ e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} \frac{e^{ik_0 r}}{r} f(k_0, \theta, \varphi) e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{b}} \int d^3k \tilde{A}(\vec{k} - \vec{k}_0) e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot (\vec{v}_0 t + \vec{b} - r \frac{\vec{k}_0}{|\vec{k}_0|} - \vec{S}(\vec{k}_0))} \quad (11)$$

genähert werden, wobei das Zerfließen des Wellenpakets aufgrund der Näherung nur bis zur ersten Ordnung nicht beobachtbar ist.

Der erste Term von Gleichung (11) ergibt durch eine Fouriertransformation

$$e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} e^{i \vec{k}_0 \cdot (\vec{r} - \vec{b})} A(\vec{v}_0 t - \vec{r} + \vec{b}), \quad (12)$$

was einem mit der Geschwindigkeit \vec{v}_0 frei propagierendem Wellenpaket entspricht.

Aus dem zweiten Term von Gleichung (11) erhält man hingegen durch eine Fouriertransformation

$$e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \frac{e^{i k_0 r}}{r} f(k_0, \theta, \varphi) e^{-i \vec{k}_0 \cdot \vec{b}} A \left(\vec{v}_0 t + \vec{b} - r \frac{\vec{v}_0}{|\vec{v}_0|} - \vec{S}(\vec{k}_0) \right). \quad (13)$$

Dies entspricht einer vom Streuzentrum ausgehenden und mit $f(k_0, \theta, \varphi)$ modulierten Kugelwelle. Die Phaseninformation dieser Welle steckt in $\vec{S}(\vec{k}_0)$.

Da der Detektor im Allgemeinen weit weg vom ungestreuten Strahl aufgestellt wird und somit Interferenzeffekte vernachlässigt werden können, ergibt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta, \varphi) = |f(E, \theta, \varphi)|^2. \quad (14)$$

Dies entspricht dem im Abschnitt 2.3 erhaltenen Ergebnis und rechtfertigt daher die zeitunabhängige Rechnung.

4 Integralgleichung für das Streuproblem

Der Ausgangspunkt zur Herleitung der Integralgleichung für das Streuproblem ist die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) - E \right) \psi(\vec{r}, \vec{k}) = 0, \quad (15)$$

die mit den vorher genannten Sommerfeldschen Randbedingungen (6) gelöst werden muss. Die Schrödingergleichung kann mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ zu einer inhomogenen Helmholtzgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k^2) \psi = -V \psi \quad (16)$$

umgeformt werden. Die allgemeine Lösung der inhomogenen Differentialgleichung wird durch die Summe der allgemeinen Lösung der homogenen Gleichung $-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k^2) \Phi = 0$ und einer speziellen Lösung der inhomogenen Gleichung gebildet. Mit den Randbedingungen ist die allgemeine Lösung durch eine ebene Welle $\Phi(\vec{r}, \vec{k}) = e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$ gegeben. Die spezielle Lösung erhält man mit Hilfe der Greenschen Funktion G_0 , die hier durch die Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k^2) G_0(\vec{r}, \vec{r}', \vec{k}) = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \quad (17)$$

definiert wird. Sie beschreibt die Streuung an einem fiktiven punktförmigen Streuzentrum und lautet explizit in der Ortsdarstellung

$$G_0^\pm = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}. \quad (18)$$

Dabei entspricht nur die Greensche Funktion G_0^+ mit dem positiven Vorzeichen den physikalischen Randbedingungen, da sie eine auslaufende Kugelwelle beschreibt, während die Funktion mit dem negativen Vorzeichen einer einlaufenden Kugelwelle entspricht. Damit ist die Lösung des Randwertproblems durch

$$\psi(\vec{r}, \vec{k}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}', \vec{k}) \quad (19)$$

gegeben. Diese Gleichung wird **Lippmann-Schwinger-Gleichung** genannt und kann auch darstellungsfrei geschrieben werden. Die Projektionen der benötigten Basisvektoren in den Ortsraum sind

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \quad \text{und} \quad \psi(\vec{r}, \vec{k}) = \langle \vec{r} | \psi_{\vec{k}} \rangle. \quad (20)$$

Die Helmholtzgleichung lautet darstellungsfrei

$$(H_0 - E) |\psi_{\vec{k}}\rangle = -V |\psi_{\vec{k}}\rangle, \quad (21)$$

wobei H_0 der Hamiltonoperator eines freien Teilchens ist. Die Lösung ist formal wieder durch die Summe der allgemeinen Lösung der homogenen Gleichung $|\vec{k}\rangle$ und der speziellen Lösung der inhomogenen Gleichung gegeben, die man durch den Resolventenoperator $(H_0 - (E \pm i0))^{-1}$ des Eigenwertproblems erhält. Somit lautet die Lösung:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle - (H_0 - E)^{-1} V |\psi_{\vec{k}}\rangle. \quad (22)$$

Dabei muss beachtet werden, dass der Resolventenoperator $R(z) = (A - z\mathbf{1})^{-1}$ mit $z \in \mathbb{C}$ eines Eigenwertproblems $A|a\rangle = a|a\rangle$ nicht regulär ist, wenn z gleich einem diskreten Eigenwert a ist, da $(A - z\mathbf{1})|a\rangle = (a - z)|a\rangle = 0$ nicht invertierbar ist. Der Resolventenoperator $R(z)$ hat somit eine Polstelle erster Ordnung an der Stelle $z = a$. Hier liegen die beiden Polstellen bei $E \pm i0$, und der Resolventenoperator ist der Greensche Operator G_0 , da

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k^2) G_0(\vec{r}, \vec{r}', \vec{k}) = \langle \vec{r} | (H_0 - E) G_0 | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | \mathbf{1} | \vec{r}' \rangle = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \quad (23)$$

gilt, was der Definition der Greenschen Funktion entspricht. Löst man das Integral mit Hilfe des Residuensatzes, erhält man die physikalische Lösung durch $G_0^+ = (H_0 - (E + i0))^{-1}$. Das Ortsraum-Matrixelement des Greenschen Operators ist die Greensche Funktion

$$\langle \vec{r} | G_0 | \vec{r}' \rangle = G_0^+(\vec{r}, \vec{r}', \vec{k}). \quad (24)$$

Somit lautet die darstellungsfreie Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle - G_0^+ |\psi_{\vec{k}}\rangle. \quad (25)$$

Um aus der Lippmann-Schwinger-Gleichung die Streuamplitude zu berechnen, nutzen wir die Forderungen, die an das Streuexperiment gestellt werden:

- Das Potential besitzt eine endliche Reichweite.
- Der Detektor ist weit vom Streuzentrum entfernt ($r \gg r'$).

Wenn diese Forderungen erfüllt sind, kann die Näherung $|\vec{r}-\vec{r}'| = \sqrt{r^2 + (r')^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}'} \approx r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}' = r - \vec{e}_r \cdot \vec{r}'$ genutzt werden, und man erhält das Integral

$$-\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{ik\vec{e}_r \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}', \vec{k}). \quad (26)$$

Der Vektor \vec{e}_r zeigt hier zum Detektor, und der Term $k\vec{e}_r$ kann als $k'\vec{e}_r = \vec{k}'$ geschrieben werden, da aufgrund der elastischen Streuung $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ gilt. \vec{k}' entspricht dem Zustand $|\vec{k}'\rangle$ eines gestreuten Teilchens. Durch Vergleich mit den Sommerfeldschen Randbedingungen erhält man die Beziehung

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}', \vec{k}) \quad (27)$$

für die Streuamplitude, die darstellungsfrei

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \psi_{\vec{k}} \rangle \quad (28)$$

lautet.

5 Bornsche Näherung und Bornsche Reihe

Die Streuamplitude $f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \vec{k})$ kann für konkrete Streuprobleme mit Hilfe der Bornschen Näherung berechnet werden. Dazu wird die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, \vec{k})$ als eine ebene Welle genähert. Dies stellt die einfachste Näherung dar und wird erste Bornsche Näherung genannt. Die Gleichung für die Streuamplitude f_1 ist dann

$$f_1(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} V(\vec{r}). \quad (29)$$

Sie entspricht der Fouriertransformierten des Streupotentials. Der Ausdruck kann für ein radialsymmetrisches Potential $V(\vec{r}) = V(r)$ vereinfacht werden, wobei der Impulsübertrag $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$ parallel zur z -Achse gelegt wird und man Kugelkoordinaten nutzt.

Die ϑ - und die ϕ -Integration können dann ausgeführt werden:

$$f_1(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} V(r) \quad (30)$$

$$= -\frac{2m}{2\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 V(r) \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) e^{-iKr \cos \vartheta} \quad (31)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2 K} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(Kr). \quad (32)$$

Der Impulsübertrag ist gegeben durch $K = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}$. In der ersten Bornschen Näherung ist die Streuamplitude rein reell und erfüllt damit nicht das optische Theorem. Für schwache Streupotentiale und Streuung bei hohen Energien und der damit verbundenen kurzen Wechselwirkungszeit liefert die Bornsche Näherung brauchbare Ergebnisse.

5.1 Bornsche Reihe

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung $|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle - G_0^+ V |\psi_{\vec{k}}\rangle$ muss für $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ selbstkonsistent gelöst werden. Dies kann iterativ geschehen. Dazu wird wie bei der Bornschen Näherung mit dem Zustand $|\psi_{\vec{k}}\rangle_0 = |\vec{k}\rangle$ begonnen. $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ ergibt sich dann aus der Reihe

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\psi_{\vec{k}}\rangle_n, \quad (33)$$

wobei die einzelnen Summanden durch

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle_0 = |\vec{k}\rangle \quad (34)$$

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle_1 = -G_0 V |\vec{k}\rangle \quad (35)$$

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle_2 = G_0 V G_0 V |\vec{k}\rangle \quad (36)$$

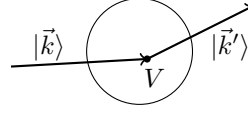
\vdots

gegeben sind. Falls diese Reihe konvergiert, ist sie eine Lösung der Gleichung. Die Bornsche Reihe erhält man dann durch Einsetzen der Lösung in Formel (28)

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} f_n = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} \langle \vec{k}' | V | \psi_{\vec{k}} \rangle_n. \quad (37)$$

Die einzelnen Summanden der Reihe können anschaulich interpretiert werden (siehe Abbildung 2). Der erste Summand f_0 beschreibt einen einlaufenden Zustand $|\vec{k}\rangle$, der einmal durch das Potential V gestreut wird und als gestreuter Zustand $|\vec{k}'\rangle$ auf den Detektor trifft. Der zweite Summand ist dann ein Zustand, der zweimal durch das Potential gestreut wird und dann aus dem Potential ausläuft.

$$f_0 = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$$



$$f_1 = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | V G_0 V | \vec{k} \rangle$$

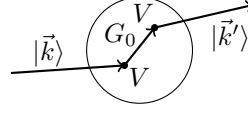


Abbildung 2: Anschauliche Interpretation der ersten beiden Summanden in der Bornschen Reihe.

6 Beispielaufgabe

Um ein konkretes Anwendungsbeispiel für die bislang angestellten theoretischen Überlegungen aufzuzeigen, wird die Streuung eines Elektrons an einem Wasserstoffatom untersucht (vgl. [4], Aufg. 9.3.4). Dafür werden die folgenden Annahmen und Folgerungen gemacht:

- Der Atomkern befindet sich im Ursprung, das einfallende Elektron am Ort \vec{r}_0 .
- Das H-Atom ist im Grundzustand. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für das Hüllenelektron am Ort r ist daher durch $|\Psi_{100}(\vec{r})|^2 = \frac{1}{\pi a_B^3} e^{-\frac{2|\vec{r}|}{a_B}}$ gegeben, wobei $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ dem Bohrschen Radius entspricht.
- Das Kernpotential lautet am Ort \vec{r}_0 : $V_K(\vec{r}_0) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_0|}$.
- Das Potential des Hüllenelektrons ist durch $V_{\text{Hülle}}(\vec{r}_0) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r \frac{|\Psi_{100}(\vec{r})|^2}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}$ gegeben.

Zunächst wird das Potential des Hüllenelektrons ausgewertet. Dazu betrachtet man das Integral in Kugelkoordinaten, wobei die Polarachse parallel zu \vec{r}_0 gelegt wird. Auf dieser Weise erhält man

$$V_{\text{Hülle}}(\vec{r}_0) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 a_B^3} \int_0^\infty dr \int_1^{-1} d(\cos \vartheta) r^2 \frac{e^{-\frac{2r}{a_B}}}{\sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \vartheta}}, \quad (38)$$

wobei das Integral über den Winkel ϑ direkt ausgeführt wurde.

In Gleichung (38) ist nur der rot eingefärbte Teil von ϑ abhängig. Substituiert man $x = \cos \vartheta$, so erhält man für diesen Teil der Gleichung

$$\int_1^{-1} dx \frac{1}{\sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0x}} = -\frac{1}{rr_0} \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0x} \Big|_{-1}^1 \quad (39)$$

$$= -\frac{1}{rr_0} [|r - r_0| - (r + r_0)] = \begin{cases} \frac{2}{r}, & \text{wenn } r \geq r_0 \\ \frac{2}{r_0}, & \text{wenn } r \leq r_0 \end{cases}. \quad (40)$$

Durch Einsetzen dieses Ausdrucks in Gleichung (38) erhält man schließlich

$$V_{\text{Hülle}}(\vec{r}_0) = \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 a_B^3} \left(\frac{1}{r_0} \int_0^{r_0} dr r^2 e^{-\frac{2r}{a_B}} + \int_{r_0}^{\infty} dr r e^{-\frac{2r}{a_B}} \right) \quad (41)$$

$$= \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 a_B^3} \left[\frac{1}{r_0} \frac{a_B^3}{4} \left(1 - e^{-\frac{2r_0}{a_B}} \left(1 + \frac{2r_0}{a_B} + \frac{2r_0^2}{a_B^2} \right) \right) + \frac{a_B^2}{4} e^{-\frac{2r_0}{a_B}} \left(1 + \frac{2r_0}{a_B} \right) \right] \quad (42)$$

$$= \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 a_B^3} \left[\frac{a_B^3}{4r_0} + e^{-\frac{2r_0}{a_B}} \left(\frac{a_B^2}{4} + \frac{a_B r_0}{2} - \frac{a_B^3}{4r_0} - \frac{a_B^2}{2} - \frac{a_B r_0}{2} \right) \right] \quad (43)$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} \left[\frac{a_B}{r_0} - e^{-\frac{2r_0}{a_B}} \left(1 + \frac{a_B}{r_0} \right) \right]. \quad (44)$$

Im ersten Schritt wurden dabei die Integrale gelöst (durch partielle Integration oder durch Nachschlagen der Integrale in entsprechenden Tabellenwerken). In den nächsten Schritten wurde das Resultat dann lediglich vereinfacht.

Der in Gleichung (44) rot markierte Teil entspricht zusammen mit dem Vorfaktor gerade dem negativen Potential des Kerns, so dass sich für das gesamte Atom das Potential zu

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} e^{-\frac{2r}{a_B}} \left(\frac{1}{a_B} + \frac{1}{r} \right) \quad (45)$$

ergibt, wobei zusätzlich r_0 in r unbenannt wurde. Dieses Potential besitzt eine endliche Reichweite, so dass unsere Überlegungen aus den vorherigen Abschnitten verwendet werden können.

Verwendet man die Bornsche Näherung zur Berechnung der Streuamplitude so erhält man

$$f_1(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{K} \int_0^{\infty} dr r V(r) \sin(Kr) \quad \text{mit} \quad K = 2k \sin \frac{\vartheta}{2} \quad (46)$$

$$= \frac{2}{a_B K} \left[\frac{1}{a_B} \int_0^{\infty} dr r \frac{1}{2i} \left(e^{-(2/a_B - iK)r} - e^{-(2/a_B + iK)r} \right) + \int_0^{\infty} dr \frac{1}{2i} \left(e^{-(2/a_B - iK)r} - e^{-(2/a_B + iK)r} \right) \right] \quad (47)$$

$$= \frac{1}{ia_B K} \left[\left(\frac{1}{a_B(2/a_B - iK)} + 1 \right) \int_0^{\infty} dr e^{-(2/a_B - iK)r} - \left(\frac{1}{a_B(2/a_B + iK)} + 1 \right) \int_0^{\infty} dr e^{-(2/a_B + iK)r} \right] \quad (48)$$

$$= \frac{1}{ia_B K} \left[\frac{1}{2/a_B - iK} + \frac{1}{a_B(2/a_B - iK)^2} - \frac{1}{2/a_B + iK} - \frac{1}{a_B(2/a_B + iK)^2} \right] \quad (49)$$

$$= \frac{2a_B(8 + a_B^2 K^2)}{(4 + a_B^2 K^2)^2}. \quad (50)$$

Dabei wurde zunächst in der Bornschen Näherung das Streupotential (45) (mit dem Sinus in komplexer Schreibweise) eingesetzt und anschließend die Integrale mithilfe einer partiellen Integration gelöst. Im letzten Schritt wurde das Ergebnis lediglich vereinfacht.

Aus der Streuamplitude lässt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt zu

$$\frac{d\sigma_1}{d\vartheta} = |f_1(\vartheta)|^2 = \left(\frac{2a_B(8 + a_B^2 K^2)}{(4 + a_B^2 K^2)^2} \right)^2 = \frac{a_B^2 [4 + a_B^2 k^2 (1 - \cos \vartheta)]^2}{[2 + a_B^2 k^2 (1 - \cos \vartheta)]^4} \quad (51)$$

berechnen, wobei die Beziehung $K^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 2k^2(1 - \cos \vartheta)$ verwendet wurde.

Trägt man in einem Diagramm den differentiellen Wirkungsquerschnitt für unterschiedliche Beträge des Wellenvektors (Energien) auf, so ergibt sich das in Abbildung 3 dargestellte Diagramm. Man kann erkennen, dass bei höheren Energien der Wirkungsquerschnitt für große Streuwinkel immer kleiner wird. Dies ist dadurch zu erklären, dass die Wechselwirkungszeit mit dem Potential aufgrund der höheren Geschwindigkeit der Streuteilchen geringer ist.

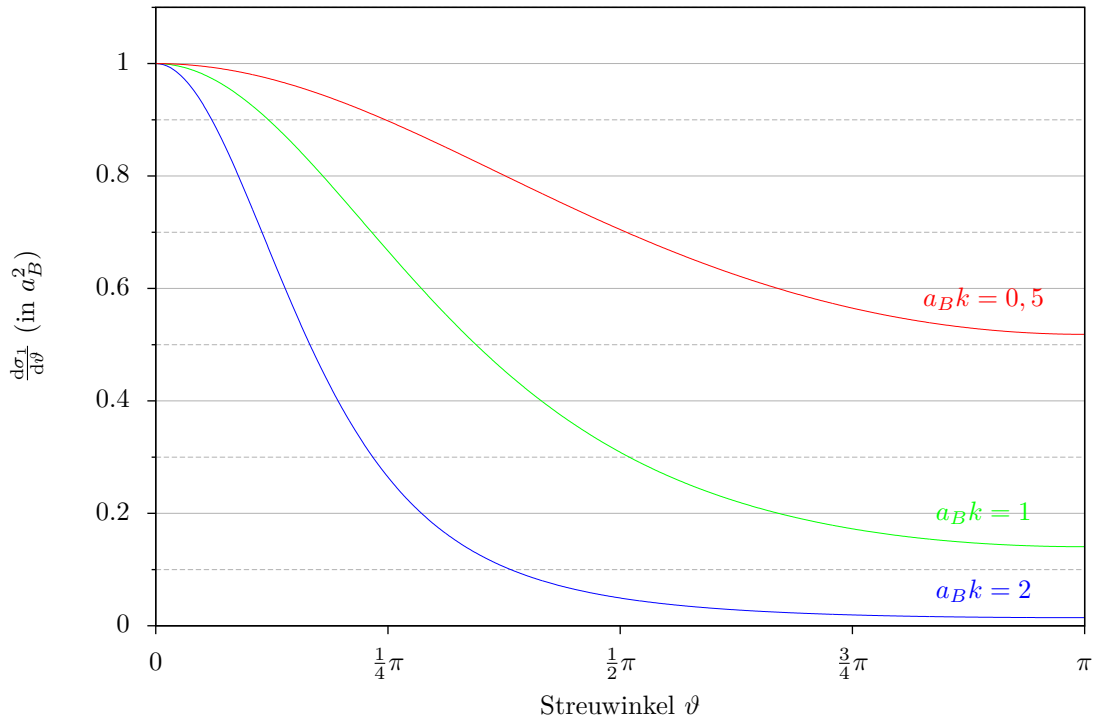


Abbildung 3: Differentieller Wirkungsquerschnitt bei der Streuung von Elektronen an Wasserstoff.

Zuletzt wird noch der totale Wirkungsquerschnitt berechnet. Dazu muss der differentielle Wirkungsquerschnitt über alle Raumwinkel integriert werden. Auf diese Weise erhält

man

$$\sigma_1 = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) \frac{d\sigma_1}{d\Omega} \quad (52)$$

$$= 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) \frac{a_B^2 [4 + a_B^2 k^2 (1 - \cos \vartheta)]^2}{[2 + a_B^2 k^2 (1 - \cos \vartheta)]^4}. \quad (53)$$

Mit der Substitution $x = a_B^2 K^2 = 2a_B^2 k^2 (1 - \cos \vartheta)$ folgt daraus

$$\sigma_1 = -\frac{4\pi}{k^2} \int_{4k^2 a_B^2}^0 dx \frac{(8+x)^2}{(4+x)^4} \quad (54)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \int_0^{4k^2 a_B^2} dx \left[\frac{1}{(4+x)^2} + \frac{8}{(4+x)^3} + \frac{16}{(4+x)^4} \right] \quad (55)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \left[-\frac{1}{4+x} - \frac{4}{(4+x)^2} - \frac{16/3}{(4+x)^3} \right]_0^{4k^2 a_B^2} \quad (56)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \left[-\frac{1 + 2k^2 a_B^2 + k^4 a_B^4 + 1 + k^2 a_B^2 + 1/3}{4(1 + k^2 a_B^2)^3} + \frac{7}{12} \right] \quad (57)$$

$$= \pi a_B^2 \frac{4 + 6k^2 a_B^2 + (7/3)k^4 a_B^4}{(1 + k^2 a_B^2)^3}. \quad (58)$$

Betrachtet man den Grenzfall kleiner Energien ($ka_B \ll 1$), so erhält man

$$\sigma_1 \approx 4\pi a_B^2. \quad (59)$$

Dies entspricht gerade dem klassischen Wirkungsquerschnitt einer Streuung an einer harten Kugel mit dem Radius $2a_B$.

7 Formale Streutheorie

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung $|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle - G_0^+ V |\psi_{\vec{k}}\rangle$ ist unbefriedigend, da auf beiden Seiten der Gleichung der zu berechnende Zustand nach der Streuung $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ steht und die Gleichung somit immer selbstkonsistent gelöst werden muss. Deshalb konstruiert man einen neuen Operator Ω_{\pm} für den $|\psi_{\vec{k}}\rangle = \Omega_{\pm} |\vec{k}\rangle$ gilt. Dazu wird die Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle - (H_0 - (E \pm i0))^{-1} V |\psi_{\vec{k}}\rangle \quad (60)$$

umgeformt, indem der $|\vec{k}\rangle$ -Zustand auf die eine und der $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ -Zustand auf die andere Seite gebracht wird. Anschließend wird der Operator $(H_0 - (E \pm i0))$ auf beide Seiten der Gleichung angewendet:

$$(H_0 - (E \pm i0) + V) |\psi_{\vec{k}}\rangle = (H_0 - (E \pm i0)) |\vec{k}\rangle. \quad (61)$$

Da der Hamiltonoperator H aus der Summe des Hamiltonoperators eines freien Teilchens und des Potentials besteht, folgt

$$H = H_0 + V \quad (62)$$

$$\Rightarrow |\psi_{\vec{k}}\rangle = (H - (E \pm i0))^{-1}(H - V - (E \pm i0))|\vec{k}\rangle \quad (63)$$

$$= [1 - (H - (E \pm i0))^{-1}V]|\vec{k}\rangle = (1 - G^\pm V)|\vec{k}\rangle. \quad (64)$$

Dabei wurde die „volle“ Greensche Funktion $G^\pm = (H - (E \pm i0))^{-1}$ eingeführt, die sich von der vorher benutzten Greenschen Funktion unterscheidet, da der Hamiltonoperator eines freien Teilchens durch den vollständigen Hamiltonoperator ersetzt wurde. Dadurch wird auch die Beschränkung auf Potentialstreuungen aufgehoben. Das positive Vorzeichen entspricht wieder einer auslaufenden Welle, sodass G^+ den physikalischen Randbedingungen entspricht. Der neue Operator wird nun durch

$$(1 - G^+V)|\vec{k}\rangle =: \Omega_+|\vec{k}\rangle \quad (65)$$

definiert und heißt Møller-Operator.

7.1 Eigenschaften des Møller-Operators

Da Ω_+ von der Basis $|\vec{k}\rangle$ in eine andere Basis $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ transformiert, ist er vermutlich unitär ($A^\dagger = A^{-1}$). Um diese Vermutung zu überprüfen, wird nun der adjungierte Møller-Operator betrachtet. Ω_+^\dagger angewendet auf einen Streuzustand ergibt einen freien Zustand, während er angewendet auf einen gebundenen Zustand Null ergibt. Deshalb können wir nur für Streuzustände die Orthonormalität der kontinuierlichen Basis zu

$$\langle\psi_{\vec{k}'}|\psi_{\vec{k}}\rangle = (2\pi)^3\delta^3(\vec{k} - \vec{k}') = \langle\vec{k}'|\vec{k}\rangle = \langle\psi_{\vec{k}'}|\Omega_+\Omega_+^\dagger|\psi_{\vec{k}}\rangle \quad (66)$$

umformen. Daraus zeigt sich, dass $\Omega_+\Omega_+^\dagger = P_{\text{Streu}}$ auf den Raum der Streuzustände projiziert. Umgekehrt gilt für das Produkt des adjungierten Operatoren mit dem Mølleroperator $\Omega_+^\dagger\Omega_+ = \mathbf{1}$, da $|\psi_{\vec{k}}\rangle = \Omega_+|\vec{k}\rangle$ für alle freien Zustände gilt. Der Mølleroperator ist somit isometrisch und unterscheidet sich nur durch seinen Definitionsbereich von einem unitären Operator. Beschränkt man sich auf den Teilraum der Streuzustände, ist Ω_+ in diesem Teilraum unitär. Dabei schließen wir alle gebundenen Zustände aus, was für die Beschreibung eines Streuexperimentes keine Einschränkung darstellt, da gebundene Zustände nicht vom Detektor gezählt werden. Der Mølleroperator transformiert außerdem einen Hamiltonoperator H in den Hamiltonoperator eines freien Teilchens, da aus

$$H(\Omega_+|\vec{k}\rangle) = H|\psi_{\vec{k}}\rangle = E|\psi_{\vec{k}}\rangle = \Omega_+E|\vec{k}\rangle = \Omega_+H_0|\vec{k}\rangle \quad (67)$$

folgt, dass

$$H\Omega_+ = \Omega_+H_0 \quad \text{und} \quad \Omega_+^\dagger H\Omega_+ = H_0 \quad (68)$$

gilt.

7.2 T-Matrix

Als nächstes wird die Integralgleichung für die Bestimmung der Streuamplitude $f(\vec{k}, \vec{k}')$ mit Hilfe des Mølleroperators analysiert.

$$-\frac{4\hbar^2\pi}{2m}f(\vec{k}, \vec{k}') = \langle \vec{k}' | V | \psi_{\vec{k}} \rangle = \langle \vec{k}' | V \Omega_+ | \vec{k} \rangle \delta(E - E') \quad (69)$$

Die Delta-Distribution $\delta(E - E')$ bringt dabei zum Ausdruck, dass bei der Herleitung der Streuamplitude aus der Lippmann-Schwinger-Gleichung eine elastische Streuung vorausgesetzt wurde. Beide Zustände $|\vec{k}\rangle$ und $|\vec{k}'\rangle$ müssen deshalb die gleiche Energie besitzen. Da $\langle \vec{k}' | V \Omega_+ | \vec{k} \rangle$ ein Matrixelement darstellt wird $T := V \Omega_+$ **T-Matrix** genannt. Die Matrixelemente in freien Zuständen sind die Streumatrixelemente. Dabei wird zwischen zwei verschiedenen Matrixelementen unterschieden:

- „on-shell“: Matrixelemente gleicher Energie
- „off-shell“: Matrixelemente ungleicher Energie

Die „off-shell“-Matrixelemente werden hier nicht betrachtet, da eine elastische Streuung vorausgesetzt wurde und somit Energieerhaltung gilt. Die T-Matrix kann außerdem analog zur Bornschen Reihe entwickelt werden:

$$T = V \Omega_+ = V - V G V = V - V G_0 T = V - V G_0 V + V G_0 V G_0 V - \dots \quad (70)$$

7.3 Optisches Theorem

In diesem Abschnitt wird das optischen Theorem allgemein aus der Unitarität des Mølleroperators und der daraus folgenden Unitarität der T-Matrix hergeleitet. Dazu wird die Differenz eines Matrixelementes der T-Matrix und eines Matrixelementes der adjungierten T-Matrix betrachtet

$$\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle - \langle \vec{k}' | T^\dagger | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k}' | V \Omega_+ | \vec{k} \rangle - \langle \vec{k}' | \Omega_+^\dagger V^\dagger | \vec{k} \rangle. \quad (71)$$

Aus der Lippmann-Schwinger-Gleichung folgt die Beziehung $|\vec{k}\rangle = |\psi_{\vec{k}}\rangle + G_0^+ V |\psi_{\vec{k}}\rangle$, die in die obige Gleichung eingesetzt wird:

$$= \langle \psi_{\vec{k}'} | V | \psi_{\vec{k}} \rangle + \langle \psi_{\vec{k}'} | V (G_0^+)^{\dagger} V | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \psi_{\vec{k}'} | V | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \psi_{\vec{k}'} | V G_0^+ V | \psi_{\vec{k}} \rangle \quad (72)$$

$$= \langle \psi_{\vec{k}'} | V [(G_0^+)^{\dagger} - G_0^+] V | \psi_{\vec{k}} \rangle. \quad (73)$$

Die Differenz der Greenschen Funktionen wird berechnet, indem die Greenschen Funktionen mit einer kleinen Verschiebung ϵ von der Polstelle weg zu regulären Operatoren gemacht werden und anschließend der Grenzwert ϵ gegen Null gebildet wird:

$$(G_0^+)^{\dagger} - G_0^+ = \frac{1}{H_0 - E + i\epsilon} - \frac{1}{H_0 - E - i\epsilon} = \frac{-2i\epsilon}{(H_0 - E)^2 + \epsilon^2} \quad (74)$$

Dies entspricht einer Lorentzkurve und damit einer Approximation der Delta-Distribution. Für $\epsilon \rightarrow 0$ ergibt sich $-2\pi i \delta(H_0 - E)$. Die Differenz der Matrixelemente erhält man nun durch die Gleichung

$$\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle - \langle \vec{k}' | T^\dagger | \vec{k} \rangle = -2\pi i \langle \vec{k}' | \Omega_+^\dagger V \delta(H_0 - E) V \Omega_+ | \vec{k} \rangle \quad (75)$$

$$= -2\pi i \langle \vec{k}' | T^\dagger \delta(H_0 - E) T | \vec{k} \rangle, \quad (76)$$

die für alle $|\vec{k}\rangle$ und $|\vec{k}'\rangle$ gilt. Deshalb kann auch die Gleichung

$$\rightarrow T - T^\dagger = -2\pi i T^\dagger \delta(H_0 - E) T$$

aufgestellt werden, die **Unitaritätsgleichung** genannt wird. Mit den Beziehungen für die Streuamplitude $-\frac{4\hbar^2\pi}{2m} f(\vec{k}, \vec{k}') = \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle \delta(E - E')$ und für die komplex konjugierte Streuamplitude $-\frac{4\hbar^2\pi}{2m} f^*(\vec{k}', \vec{k}) = \langle \vec{k}' | T^\dagger | \vec{k} \rangle \delta(E - E')$ ergibt sich aus der Differenz der Matrixelemente:

$$f(\vec{k}, \vec{k}') - f^*(\vec{k}, \vec{k}') \quad (77)$$

$$= -\frac{4\hbar^2\pi}{2m} 2\pi i \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} f^*(\vec{k}', \vec{k}'') f(\vec{k}, \vec{k}'') \delta\left(\frac{\hbar^2(k'')^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right). \quad (78)$$

Bei Einführung von Kugelkoordinaten kann die φ Integration sofort ausgeführt werden und man erhält:

$$f(\vec{k}, \vec{k}') - f^*(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{i}{\pi} \int_0^\infty d^3 k'' (k'')^2 \delta((k'')^2 - k^2) \int d\Omega'' f^*(\vec{k}', \vec{k}'') f(\vec{k}, \vec{k}''). \quad (79)$$

Da aufgrund der elastischen Streuung $|\vec{k}''| = |\vec{k}'| = |\vec{k}| = k$ gilt, kann die Integration über den Betrag von \vec{k} mit der Delta-Distribution ausgeführt werden und man erhält

$$f(\vec{k}, \vec{k}') - f^*(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{ik}{2\pi} \int d\Omega'' f^*(\vec{k}', \vec{k}'') f(\vec{k}, \vec{k}'') \quad (80)$$

die **Integralgleichung der elastischen Unitarität**. Setzt man für \vec{k}' $\theta = 0$, zeigt \vec{k}' in die Vorwärtsrichtung. Mit $|\vec{k}''| = |\vec{k}'| = |\vec{k}|$ folgt für die Differenz:

$$f(\vec{k}, \vec{k}') - f^*(\vec{k}, \vec{k}') = 2i \operatorname{Im}[f(k, \theta = 0)] = \frac{ik}{2\pi} \int d\Omega |f|^2 \quad (81)$$

Durch Einsetzen der Beziehung für den totalen Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega |f|^2$ ergibt sich das optische Theorem:

$$\operatorname{Im}[f(k, \theta = 0)] = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}(k). \quad (82)$$

Aus der Integralgleichung der elastischen Unitarität lässt sich auch die **Partialwellen-Entwicklung** herleiten, indem man die Gleichung für ein radialsymmetrisches Potential löst.

8 Zusammenfassung

Streuexperimente, die zur Untersuchung des Aufbaus der Materie dienen, können durch die zeitunabhängige quantenmechanisch Streutheorie beschrieben werden, wenn der experimentelle Aufbau einige sinnvolle Rahmenbedingungen erfüllt. Es stellt sich heraus, dass die zentrale Größe zur Beschreibung des Streuprozesses die Streuamplitude ist, die durch eine Integralgleichung (Lippmann-Schwinger-Gleichung) ausgedrückt werden kann.

Mithilfe der Bornschen Näherung und der Bornschen Reihe kann die Streuamplitude aus dem Streupotential (näherungsweise) berechnet werden. Als ein konkretes Beispiel wurde die Streuung eines Elektrons an einem Wasserstoffatom untersucht.

Ein formalerer Zugang zur quantenmechanischen Streutheorie ist mithilfe des Møller-Operators und der T-Matrix möglich. Aus der Unitarität der T-Matrix kann sowohl das optische Theorem als auch die Partialwellenentwicklung gefolgert werden.

Literatur

- [1] M. Böhm. Vorlesungsskript.
- [2] F. Jenko. Vorlesungssmitschrift, Quantentheorie WS 2012/13.
- [3] G. Münster. *Quantentheorie*. 2. Aufl. de Gruyter, 2010.
- [4] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik*. 7. Aufl. Springer, 2012.
- [5] J. J. Sakurai und J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. 2nd edition. Addison Wesley, 2010.