Quantenmechanische Coulomb-Streuung

Dirk Homeier

18. Juli 2001

Bei der quantenmechanischen Herleitung der Streutheorie geht man immer von Streupotentialen aus, die entsprechend 'gutartig' sind, also Potentialen, die entweder ab einer Entfernung ρ auf Null abfallen oder schnell genug, d.h. schneller als $\frac{1}{r}$, schwächer werden. Diese Potentiale bezeichnet man als kurzreichweitig. Man geht dabei davon aus, daß sich die Wellenfunktion des gestreuten Teilchens für $t \to \pm\infty$ wie eine ein- bzw. auslaufende, ebene Welle und der Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ wie der freie Zeitentwicklungsoperator $U^0(t)$ verhalten:

$$U(t)|\psi> \longrightarrow U^0(t)|\psi_{\text{in/out}}>, t \to \pm\infty \tag{1}$$

Betrachten wir nun das Coulomb-Potential $V(r) = \frac{e_1 e_2}{r}$. Wir werden sehen, daß dieses Potential nicht kurzreichweitig ist, also insbesondere Ansätze wie der obige oder die Bornsche Näherung, die die Wellenfunktion als ebene, freie Wellen approximieren, nicht wie gewohnt anwendbar sind. Aber wie soll man nun weiter vorgehen, wenn der übliche Ansatz unbrauchbar ist? Dafür gibt es im Allgemeinen zwei Möglichkeiten:

- i.A. interessiert die Wellenfunktion gar nicht so brennend, sondern nur ein kleiner Satz von Observablen (Energie, Impuls,...), der auch experimentell zugänglich ist. Diese konvergieren für $r \to \infty$ auch dann, wenn (1) nicht streng erfüllt ist. Man könnte sich überlegen, unter welchen, schwächeren Bedingungen die Observablen konvergieren, und darauf die Quantenstreuung aufbauen statt auf (1). Dieser Weg ist tatsächlich gegangen worden, ist aber sehr aufwendig.

- Reine Coulomb-Potentiale spielen in der Natur eigentlich keine Rolle, jedes Potential ist früher oder später abgeschirmt. Daher ist folgender Ansatz auch physikalisch rechtfertigbar: Man betrachtet keine reinen Coulomb-Potentiale, sondern solche, die ab einer bestimmten Stelle einfach 'abgeschnitten' werden. Somit hat man die Voraussetzungen für ein kurzreichweitiges Potential wieder erfüllt. Auf diese Weise soll hier weiter vorgegangen werden.

Betrachten wir zunächst die Asymptotik der Wellenfunktion für große r. Für kurzreichweitige Potentiale hatten wir gesehen:

$$\psi_{l,p}(r) \to c\sin(pr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l), r \to \infty \tag{2}$$

Um einen ähnlichen Ausdruck für den Coulomb-Fall zu erhalten, müssen wir die radiale Schrödinger-Gleichung

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2me_1e_2}{r} + p^2\right]\psi(r) = 0$$

lösen. Man erhält dabei folgende Asymptotik:

$$\psi_{l,p}(r) \to c\sin(pr - \frac{me_1e_2}{p}\ln r + const), r \to \infty \tag{3}$$

Daran läßt sich bereits erkennen, daß anders als im kurzreichweitigen Fall die Wellenfunktion auch in beliebig großer Ferne vom Streuzentrum durch den $\ln r$-Term einer Phasenverschiebung unterliegt. Wir können nun zu der Lösung übergehen, die am Ursprung regulär ist, da alle anderen Lösungen physikalisch irrelevant sind. Für diese Lösung ($\psi(0) = 0$) , die ich hier mit $F_l(pr)$ bezeichne, erhält man:

$$F_l(pr) \to c\sin(pr - \gamma\ln 2pr - \frac{1}{2}l\pi + \sigma_l), r \to \infty \tag{4}$$

Hierbei wurde die Abkürzung $\gamma = \frac{me_1e_2}{p}$ verwendet; σ_l wird als Coulomb-Phasenveschiebung bezeichnet. Man erhält aus der Herleitung von Gleichung (3):

$$\sigma_l = \arg\Gamma(l + 1 + i\gamma)$$

Gehen wir nun zum oben bereits erwähnten Ansatz der Potentialabschirmung über:

$$V_\rho(r) = \begin{cases} \frac{e_1e_2}{r} & r \le \rho \\ 0 & r > \rho \end{cases}$$

Hierbei ist zu erwarten:

- Für den Fall $r > \rho$ sollte die Wellenfunktion die Asymptotik nach Gleichung (2) besitzen (kurzreichweitiges Potential), insbesondere also eine definierte Phasenverschiebung.

- Wählt man ρ nur groß genug, sollte für $r \approx \rho, r < \rho$ die Form (3) gelten.

Vergleich der beiden Asymptotiken an der Stelle $r = \rho$ liefert dann:

$$\Rightarrow \delta_l = \sigma_l - \gamma \ln 2p\rho$$

Wir haben damit einen Zusammenhang zwischen der Streuphase des jetzt kurzreichweitigen, abgeschirmten Potentials und der Coulomb-Phasenverschiebung gefunden. Man erkennt allerdings, daß δ_l kritisch davon abhängt, an welcher Stelle ρ wir die Abschirmung einsetzen lassen; genauer kann man durch geschickte Wahl von ρ jeden Wert für δ_l erreichen. Aus dem Zusammenhang von Streuphase und -amplitude wird klar, daß auch auch die Streuamplitude wahrscheinlich von ρ abhängen wird, und damit wohl auch der Wirkungsquerschnitt. Wir berechnen die Streuamplituden in Bornscher Näherung:

$$f(\vec{p'} \leftarrow \vec{p}) = -(2\pi)^2 m < \vec{p'}|V|\vec{p} >= -\frac{2m}{q} \int_0^\infty dr r \sin(qr) V(r)$$

mit dem Impulsübertrag $\vec{q} = \vec{p'} - \vec{p}$. Man sieht: Setzt man das reine Coulomb-Potential für V ein, erhält man das divergente Integral

$$\int_0^\infty dr \sin(qr).$$

Dies ist kaum erstaunlich, da in die Bornsche Näherung explizit die Kurzreichweitigkeit des Potentials eingeht. Wir berechnen nun die Streuamplitude für den abgeschirmten Fall, aber für zwei unterschiedliche Arten der Abschirmung: Das einfache 'Abschneiden' (s.o.), und eine exponentielle Abschirmung, um zu überprüfen, ob die Streuamplitude auch von der Art der Abschirmung abhängt. Daher:

1.

$$V_\rho(r) = \begin{cases} \frac{e_1 e_2}{r} & r \leq \rho \\ 0 & r > \rho \end{cases}$$

2.

$$V_\rho^{\exp}(r) = \frac{e_1 e_2}{r} e^{-\frac{r}{\rho}}$$

Daraus erhält man für die Streuamplituden:

1.

$$f_\rho(\vec{p'} \leftarrow \vec{p}) = -\frac{2me_1 e_2}{q^2}(1 - \cos q\rho)$$

2.

$$f_\rho^{\mathrm{exp}}(\vec{p'} \leftarrow \vec{p}) = -\frac{2me_1e_2}{q^2+\rho^{-2}} \approx -\frac{2me_1e_2}{q^2}, \rho >> 1$$

Man erkennt, daß die beiden Streuamplituden nicht übereinstimmen. Zum einen hängt die Streuamplitude des abgeschirmten Coulomb-Potentials also vom Ort, zum anderen aber auch von der Art der Abschirmung ab! Gerettet wird unser Ansatz, wenn wir den Wirkungsquerschnitt betrachten. Für die auslaufende Wellenfunktion gilt, wiederum in Bornscher Näherung:

$$\psi_{\mathrm{out}}(\vec{p}) = \int d^3p' < \vec{p}|S|\vec{p'} > \psi_{\mathrm{in}}(\vec{p'}) \tag{5}$$

$$= \psi_{\mathrm{in}}(\vec{p}) + \frac{i}{2\pi m}\int d^3p'\delta(E_p - E_{p'})f(\vec{p} \leftarrow \vec{p'})\psi_{\mathrm{in}}(\vec{p'}) \tag{6}$$

$$= \psi_{\mathrm{in}}(\vec{p}) + \frac{ip}{2\pi}\int d\Omega_{p'}f(\vec{p} \leftarrow \vec{p'})\psi_{\mathrm{in}}(\vec{p'}) \tag{7}$$

Insbesondere erhält man nach Einsetzen der Streuamplituden:

$$\psi_{\mathrm{out}}(\vec{p}) = \psi_{\mathrm{out}}^{\mathrm{exp}}(\vec{p}) - \frac{ip}{2\pi}\int d\Omega_{p'}\frac{2me_1e_2}{q^2}\cos(q\rho)\psi_{\mathrm{in}}(\vec{p'})$$

Um zu zeigen, daß die auslaufenden Wellenfunktionen (und damit auch die Wirkungsquerschnitte) übereinstimmen, muß gezeigt werden, daß das Integral verschwindet. Ersetze den Impulsübertrag nach der bekannten Formel $q = 2p\sin\frac{\theta}{2}$ und schreibe das Oberflächendifferential $d\Omega_{p'}$ als $d\phi d\theta\cos\theta$. θ ist dabei der Winkel zwischen $\vec{p}$ und $\vec{p'}$. Zieht man alle Konstanten aus dem Integral heraus, bleibt:

$$\int d\phi \int d\theta\cos\theta\frac{\cos(2p\rho\sin(\frac{\theta}{2}))}{\sin^2\frac{\theta}{2}}\psi_{\mathrm{in}}(\vec{p'})$$

Typischerweise differiert $\vec{p'}$ für das einfallende Wellenpaket kaum, dieses ist scharf um einen einzelnen Wert konzentriert und kann auf diesem Bereich als konstant angenommen werden. Wenn aber $\vec{p'}$ sich kaum ändert, dann auch θ. Dann können auch $\cos\theta$ und $\sin^2\frac{\theta}{2}$ als Konstanten aus dem Integral gezogen werden. Es bleibt:

$$\int d\phi \int d\theta\cos(2p\rho\sin(\frac{\theta}{2}))$$

Die Intervallgrenzen liegen dabei nahe zusammen, aufgrund der Konzentrierung der einfallenden Welle im Impulsraum. Wir betrachten nun nur den Fall $\theta \neq 0$, also keine Vorwärtsstreuung. Da ρ beliebig groß ist, liegen im kurzen Integrationsintervall beliebig viele Cosinus-Schwingungen. Da sich die Amplitude nicht ändert, wird das Integral dadurch beliebig klein. Wir erhalten daher tatsächlich:

$$\psi_{\text{out}}(\vec{p}) = \psi_{\text{out}}^{\text{exp}}(\vec{p}),$$

d.h. trotz unterschiedlichem Ort und Art der Abschirmung stimmen die Wirkungsquerschnitte überein.
Soweit zur Bornschen Näherung. Die exakte Lösung bei kurzreichweitigen Potentialen erhält bekannterweise die asymptotische Darstellung:

$$< \vec{x}|\vec{p}+ > \to (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left[e^{ipz} + f(p\hat{x} \leftarrow \vec{p}) \frac{e^{ipr}}{r} \right]$$

Hier wurde, der Einfachheit halber, die z-Achse in $\vec{p}$-Richtung gelegt. Für die Coulomb-Streuung geht das so einfach nicht; man kann die Schrödinger-Gleichung trotzdem exakt lösen:

$$< \vec{x}|\vec{p}+_C > \sim e^{ipz} F[-i\gamma|1|ip(r-z)]$$

F ist dabei die konfluente hypergeometrische Funktion:

$$F(a|b|z) = 1 + \frac{a}{b}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)}\frac{z^2}{2!} + \dots$$

Für $(r-z) \to \infty$ gilt dann durch die Asymptotik von F:

$$< \vec{x}|\vec{p}+_C > \to (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left(\exp i[pz + \gamma \ln p(r-z)] + f_C(p\hat{x} \leftarrow \vec{p}) \frac{\exp i[pr - \gamma \ln 2pr]}{r} \right)$$

Man erkennt eine formale Analogie zur Asymptotik bei kurzreichweitigen Potentialen, wenn auch keine Übereinstimmung (was auch nicht zu erwarten war): Die Logarithmen sorgen für zusätzliche Phasenverschiebungen der ein- und auslaufenden Wellen. Daher ist auch die Coulomb-Amplitude

$$f_C(p\hat{x} \leftarrow \vec{p})$$

nicht als Streuamplitude im herkömlichen Sinn zu verstehen, sie besitzt nur eine formale Ähnlichkeit. Explizit ergibt sich für die Coulomb-Amplitude:

$$f_C(p\hat{x} \leftarrow \vec{p}) = -\frac{2me_1e_2}{q^2} \exp[2i(\delta_0 - \gamma \ln \sin \frac{\theta}{2})]$$

Daraus erhält man für den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_C(p\hat{x} \leftarrow \vec{p})|^2 = \left(\frac{2me_1e_2}{q^2}\right)^2 \tag{8}$$

$$= \frac{m^2e_1^2e_2^2}{4p^4\sin^4\frac{\theta}{2}} \tag{9}$$

Dies ist der aus der klassischen Mechanik bereits bekannte Rutherford-Querschnitt, der nun hier auch quantenmechanisch bestätigt wurde. Eine weitere Möglichkeit der Herleitung liegt in einem algebraischen Weg. Man nutzt dabei aus, daß der aus der klassischen Mechanik bekannte Runge-Lenz-Vektor im Coulomb-Potential, auch quantenmechanisch, eine Erhaltungsgröße darstellt. Aus den Kommutatoren von Runge-Lenz-Vektor und Drehimpulsoperator erhält man eine spezielle Lie-Algebra, und zwar die der Lorentz-Gruppe. Unter anderem aus der Darstellungstheorie folgt dann sehr schnell der Rutherford-Querschnitt. Für Details vergleiche den Artikel von Daniel Zwanziger: 'Algebraic Calculation of Nonrelativistic Coulomb Phase Shift', Journal of Mathematical Physics, Vol. 8, Nr. 9, Sept. 1967. Eine interessante Fortsetzung des bisher gesagten findet sich in der Überlagerung mehrerer Potentiale: Eines Coulomb- und eines zweiten, kurzreichweitigen Potentials, z.B. vom Yukawa-Typ. Damit lassen sich exakt die Ergebnisse von Streuung langsamer, stark wechselwirkender Teilchen an Atomkernen voraussagen. Man geht dabei ganz äquivalent zum reinen Coulomb-Fall vor.