Ansatz für den Streuzustand (nach der Streuung)

$$\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r}) = \underbrace{e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}}_{\text{einfallende Welle, Ausbreitungsrichtung } \underline{k}} + f^{(+)}(k\underline{e}_r, \underline{k}) \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{auslaufende Kugelwelle, Ausbreitungsrichtung } \underline{e}_r}$$

$|\underline{k}| = \text{const}$
elastische Streuung!

Streuamplitude,
~~enthält~~ beschreibt Einfluß des Streupotentials
$d\sigma \sim |f^+|^2$
Meßgrößer

Dirac-Zustand
$|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle$, $\langle \underline{r}|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle = \psi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r})$

mit $\psi_{\underline{k}}^{(-)}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} + f^{(-)}(k\underline{e}_r, \underline{k}) \underbrace{\frac{e^{-ikr}}{r}}_{\text{einlaufende Welle}}$

es gilt:

$$\langle \underline{r}|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle = \underbrace{\langle \underline{r}|\underline{k}\rangle}_{\sim e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}} + \int d\underline{r}' \langle \underline{r}|\hat{G}_0(E)|\underline{r}'\rangle\langle \underline{r}'|\hat{V}|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle$$

Resolvente
$\hat{G}_0(E) = \frac{1}{E-\hat{H}_0}$

Operator zum Streupotential $V(\underline{r})$

$V(\underline{r}') \underbrace{\langle \underline{r}'|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle}_{\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}')}$

Berechnung von $\langle \underline{r}|\hat{G}_0(E)|\underline{r}'\rangle$

benutze $\hat{G}_0(E)|\underline{p}\rangle = \frac{1}{E-\frac{p^2}{2m}}|\underline{p}\rangle$

Impulseigenzustand

Für große Systeme ($V=L^3$ groß, $\Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar 2\pi}{L}$ klein)

$$\langle \underline{r}|\hat{G}_0(E)|\underline{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\underline{p} \frac{e^{i/\hbar\, \underline{p}(\underline{r}-\underline{r}')}}{E-\frac{p^2}{2m}}$$

Matrixelemente der Resolvente in Ortsdarstellung
„Green'sche Funktion"

$\tilde{E} = \frac{E\,2m}{\hbar^2}$

ersetze $\frac{p}{\hbar} \to \tilde{p}$ $\Rightarrow$

$$\langle \underline{r}|\hat{G}_0(E)|\underline{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\tilde{p} \frac{e^{i\tilde{p}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}}{E-\frac{\tilde{p}^2\hbar^2}{2m}} = \frac{2m}{\hbar^2(2\pi)^3}\int d\tilde{p} \frac{e^{i\tilde{p}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}}{\tilde{E}-\tilde{p}^2}$$

Vereinfachung der Notation: $\tilde{E} \to E$, $\tilde{p} \to p$, muß am Ende „repariert" werden!

$$\langle \underline{r}|\hat{G}_0(E)|\underline{r}'\rangle = \underset{\frac{2m}{\hbar^2}}{A}\, \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\underline{p}\, \frac{e^{i\underline{p}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}}{E-p^2} \underset{\substack{\text{Kugel-}\\ \text{koordinaten}}}{=} A\,\frac{1}{(2\pi)^3}\underset{\substack{\uparrow\\ \text{aus } \varphi\text{-Integral}}}{2\pi}\int_0^\infty dp\, p^2 \frac{1}{E-p^2}\underbrace{\int_{-1}^{1} d(\cos\vartheta)\, e^{ip|\underline{r}-\underline{r}'|\cos\vartheta}}_{\frac{2\sin(p|\underline{r}-\underline{r}'|)}{p|\underline{r}-\underline{r}'|}}$$

$\vartheta \measuredangle (\underline{p}, \underline{r}-\underline{r}')$

$$= A\,\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty dp\, \frac{p}{E-p^2}\,\frac{\sin px}{x} \qquad \text{mit } x = |\underline{r}-\underline{r}'|$$

$$\sin px = \frac{e^{ipx}-e^{-ipx}}{2i}$$

$$= A\,\frac{1}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{ix}\int_0^\infty dp\,\frac{p}{E-p^2}\left(e^{ipx}-e^{-ipx}\right)$$

Zweiter Term:

$$-\int_0^\infty dp\,\frac{p}{E-p^2}\,e^{-ipx} \underset{\substack{\uparrow\\ u=-p\\ \Rightarrow p=-u\\ \frac{dp}{du}=-1}}{=} \int_0^{-\infty} du\,\frac{(-u)}{E-u^2}\,e^{iux} = \int_{-\infty}^{0} du\,\frac{u}{E-u^2}\,e^{iux} \underset{p=u}{=} \int_{-\infty}^{0} dp\,\frac{p}{E-p^2}\,e^{ipx}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \underline{r}|\hat{G}_0(E)|\underline{r}'\rangle = \frac{A}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{ix}\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\frac{p\,e^{ipx}}{E-p^2}}$$

Problem: Pole bei $p = \pm\sqrt{E}$

$\Rightarrow$ streng genommen, daß $\hat{G}_0(E)$ nicht wohldefiniert!

Dies kann gelöst werden durch einen Grenzwertprozess

Definiere:

$$\langle \underline{r}|\hat{G}_0^{(\pm)}(E)|\underline{r}'\rangle = \frac{A}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{ix}\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\frac{p\,e^{ipx}}{E-p^2\pm i\varepsilon} \qquad \varepsilon \text{ positiv},\ \varepsilon \to 0^+$$

Auswertung der Integrale (in der komplexen Zahlenebene) durch Residuensatz

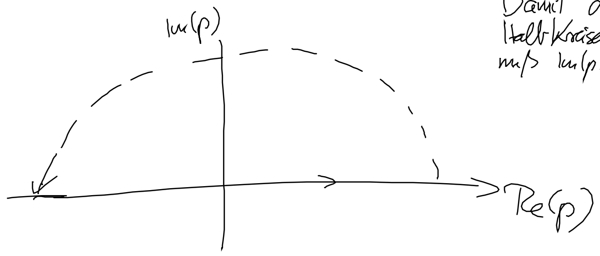
$\Rightarrow$ ersetze Integral über reelle p durch Kurvenintegral in der komplexen Ebene

$$p \to Re(p) + i\,Im(p)$$

Integrationsweg muss in der <u>oberen</u> Halbebene geschlossen werden!

$$e^{ipx} = e^{i\,Re(p)x + i^2 Im(p)x} = e^{i\,Re(p)x \underset{!!}{\uparrow}{-}\, Im(p)x}$$

Damit der Betrag des Halbkreises verschwindet, muss $Im(p) > 0$ sein!



Berechnung der Pole:

$$\underbrace{E - p_0^2}_{\text{Pole}} \pm i\varepsilon = 0 \quad \Leftrightarrow \quad p_0^2 = E \pm i\varepsilon \qquad (E>0)$$

$$p_0 = \pm\sqrt{\underbrace{E \pm i\varepsilon}_{E(1\pm i\frac{\varepsilon}{E})}} = \pm\sqrt{E}\underbrace{\sqrt{1\pm\frac{\varepsilon}{E}}}_{\text{entwickeln...}} \qquad \varepsilon \text{ klein}$$

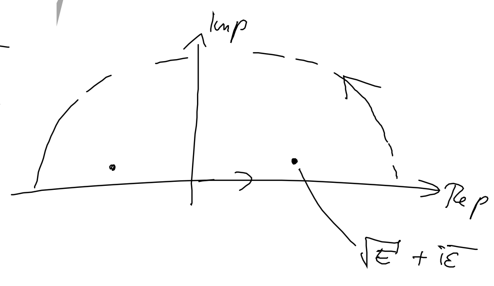
$$= \pm\sqrt{E}\left(1 \pm i\frac{1}{2}\frac{\varepsilon}{E} + O(\varepsilon^2)\right)$$

$$\approx \pm\sqrt{E} + i\bar{\varepsilon} \qquad \text{mit } \bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{E}}$$

$\Rightarrow$ Die Pole liegen bei

$$p_0^+ = +\sqrt{E} + i\bar{\varepsilon} \qquad \text{relevant für } G_0^+$$

$$p_0^- = -(\sqrt{E} - i\bar{\varepsilon}) \qquad \text{für } G_0^-$$



Die Pole sind erster Ordnung:

und es gilt $(p_0 - p)(p_0 + p) = p_0^2 - p^2$

$$= E \pm i\varepsilon - p^2 \qquad \text{wie gefordert}$$

Jetzt: Anwendung des Residuensatz

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\circlearrowleft} f(z)\,dz = \sum_{\alpha=1}^{n} \mathrm{Res}_{z_\alpha} f(z) \qquad \text{mit } \mathrm{Res}\, z_\alpha = \lim_{z \to z_\alpha} (z - z_\alpha) f(z)$$

Summe über Pol

für Pole erster Ordnung

hier: $f(z) = \dfrac{p\, e^{ipx}}{(p_0 - p)(p_0 + p)}$

$$\mathrm{Res}_{p_0} f(z) = \lim_{p \to p_0} \frac{p\, e^{ipx} (p - p_0)}{(p_0 - p)(p_0 + p)} = -\lim_{p \to p_0} \frac{p\, e^{ipx}}{p_0 + p}$$

$$= -\frac{p_0\, e^{ip_0 x}}{2 p_0} = -\frac{1}{2} e^{ip_0 x}$$

$$\langle \underline{r} | \hat{G}_0^{(\pm)} | \underline{r}' \rangle = \frac{A}{2\pi x} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \frac{p\, e^{ipx}}{E - p^2 \pm i\varepsilon}$$

$$\underset{\varepsilon \to 0}{\overset{\text{Residuensatz}}{=}} -\frac{A}{4\pi} \frac{e^{\pm i \sqrt{E}\, x}}{x}$$

$A = \dfrac{2m}{\hbar^2}$

$x = |\underline{r} - \underline{r}'|$

Beachte: die physikalisch richtige Lösung ist $\hat{G}_0^{(+)}$

$\Leftrightarrow$ auslaufende Kugelwelle!

Rücksubstitution: $\sqrt{E} \to \sqrt{E} = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}} = k = |\underline{k}|$

$$\langle \underline{r} | \hat{G}_0(E)^{(\pm)} | \underline{r}' \rangle = -\frac{2m}{4\pi \hbar^2} \frac{e^{\pm i k x}}{x}$$

Green'sche Funktion

$$\underbrace{\langle \underline{r} | \psi_{\underline{k}}^{(\pm)} \rangle}_{\downarrow} = \underbrace{\langle \underline{r} | \underline{k} \rangle}_{e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}} + \int d\underline{r}' \langle \underline{r} | \hat{G}_0^{(\pm)}(E) | \underline{r}' \rangle \underbrace{\langle \underline{r}' | \hat{V} | \psi_{\underline{k}}^{(\pm)} \rangle}_{V(\underline{r}')\,\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}')}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' \frac{e^{\pm ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|} V(\underline{r}')\, \psi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}')} \quad (*)$$

Lippmann-Schwinger-Gleichung

Bemerkungen:

- (*) ist eine exakte Integralgleichung für die Streuzustände. Diese tauchen auf beiden Seiten der Gleichung auf!
  → implizite Gleichung

- (*) liefert wichtige Ausgangspunkt für Näherungen, insbesondere die Born'sche Näherung für die Streuamplitude → später

- die "Resolvente" $\hat{G}_0(E)$ ist wichtiges Element der formalen Streutheorie → später

- Das Ergebnis (*) hätte wir auch einfacher haben können durch „Rückbesinnung" auf Elektrodynamik!

  betrachte zeitunabh. Schrödingergl. in Ortsdarstellung, Fokus auf Lösung $\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r})$

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = V(\underline{r})\,\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \qquad \Big| \cdot \frac{2m}{\hbar^2}$$

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

$$\Rightarrow (k^2 + \Delta)\,\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \hat{V}(\underline{r})\,\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \quad \text{mit } \hat{V} = \frac{2m}{\hbar^2} V$$

homogenes Problem: $\hat{V} = 0$

$$\boxed{(k^2 + \Delta)\,\varphi_{\underline{k}}^{0}(\underline{r}) = 0}$$

entspricht Helmholtz-Gleichung

Die Struktur ist bekannt aus ~~dem~~ den Potentialgleichungen zu den homogenen Maxwell-Gleichungen (Coulombeichung)

$$\Box\,\phi(\underline{r},t) \Leftrightarrow (\Delta + \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}}_{k^2})\,\phi(\underline{r},t) = 0$$

Zur Lösung der inhomogenen Gl. hatten wir in der Elektrodynamik kennengelernt: Methode der Green'schen Funktion, Darstellung der vollen Lösung als Faltungsintegral

Bedeutung hier:

$$\varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \underbrace{\varphi_{\underline{k}}^{0}(\underline{r})}_{\text{Lösung des homogenen Problems}} + \int d\underline{r}'\, G(\underline{r}-\underline{r}')\,\hat{V}(\underline{r}')\,\varphi_{\underline{k}}(\underline{r}')$$

mit $(k^2 + \Delta)\,G(\underline{r}-\underline{r}') \stackrel{!}{=} \delta(\underline{r}-\underline{r}')$

$\Rightarrow G$ ist die Lösung des Streuproblems für eine fiktive punktförmige Streuquelle bei $\underline{r}'$!

Die explizite Form von G^0 beim Streuproblem ist dieselbe wie die bei den inhomogenen Maxwell-Gleichungen!

III.4. Streuamplitude und Born'sche Näherung

erstes Ziel:

Verbindung der Lippmann-Schwinger-Gl. mit unserem ursprünglichen Ansatz für die Streuzustände

$$\varphi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} + f^{(\pm)}(k\underline{e}_r, \underline{k})\,\frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

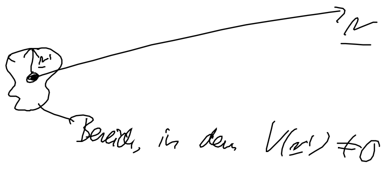
andererseits (Lippmann-Schwinger-Gl.)

$$\varphi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\underline{r}'\,\frac{e^{\pm ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\,V(\underline{r}')\,\varphi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}')$$

Betrachte dazu in der Lippmann-Schwinger-Gl. den Fall $r \gg r'$, $\frac{r}{r'} \gg 1$

Annahme dahinter:

Streuzentrum ist im Ursprung lokalisiert, betrachte Abstände r weit außerhalb der Ausdehnung des Potentials $V(\underline{r}')$



In der Green'schen Funktion $\sim \frac{e^{\pm ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$ approximiere im Zähler und Nenner

Nenner: $\frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \approx \frac{1}{r} + \underline{r}'\cdot\frac{\underline{r}}{r^3} + \dots$ (wie bei Multipolentwickl. in der Elektrodynamik)

$$\approx \frac{1}{r}$$

Im Exponenten:

$$|\underline{r}-\underline{r}'| = \sqrt{r^2+r'^2-2\underline{r}\cdot\underline{r}'} = r\sqrt{1+\underbrace{\left(\frac{r'}{r}\right)^2}_{\ll 1}-\frac{2\underline{r}\cdot\underline{r}'}{r^2}} \approx r\sqrt{1-\frac{2\underline{r}\cdot\underline{r}'}{r^2}}$$ Wurzel entwickeln

$$\approx r - \frac{\underline{r}\cdot\underline{r}'}{r}$$

$$= r - \underline{r}'\cdot\underline{e}_r$$

mit $\underline{e}_r = \frac{\underline{r}}{r}$

$$\Rightarrow \frac{e^{\pm ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \overset{r \gg r'}{\approx} \frac{e^{\pm ikr}}{r}\, e^{\mp ik\underline{e}_r\cdot\underline{r}'}$$

Einsetzen in die Lippmann-Schwinger Gl.:

$$\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{\pm ikr}}{r}\int d\underline{r}'\, e^{\mp ik\underline{e}_r\cdot\underline{r}'}\, V(\underline{r}')\,\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}')$$

Vergleiche das mit ursprüngl. Ansatz für die Streuzustände

⇒ Für die Streuamplitude ergibt sich.

$$\boxed{f^{(\pm)}(k\underline{e}_r, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\underline{r}'\, e^{\mp i k \underline{e}_r\cdot \underline{r}'}\, V(\underline{r}')\, \psi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r}')}$$

Expliziter Ausdruck für die Streuamplitude, ausgedrückt durch den Streuzustand und das Potential V !

Asymptotisch exakt (weit weg vom Streuzentrum)

Allerdings braucht man zum Auswerten des Integrals immer noch den vollen Streuzustand $\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}(\underline{r})$, der ja wieder von V abh...

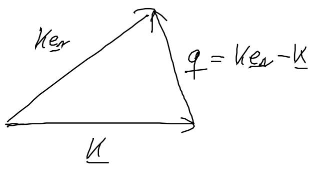
Born'sche Näherung

(betrachte physikalische Lösung "+")

Ersetze den Streuzustand $\psi_{\underline{k}}^{+}(\underline{r}')$ im Integral durch den Zustand im Fall $V=0$, also die ebene Welle!

$$\Rightarrow f^{(+)}_{\text{Born}}(k\underline{e}_r, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\underline{r}'\, e^{-ik\underline{e}_r\cdot\underline{r}'}\, V(\underline{r}')\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}'}$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\underline{r}'\, e^{-i(k\underline{e}_r - \underline{k})\underline{r}'}\, V(\underline{r}')$$



$$\Rightarrow \boxed{f^{+}_{\text{Born}}(k\underline{e}_r, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\, \tilde{V}(\underline{q})}\quad , \quad \underline{q} = k\underline{e}_r - \underline{k}$$

„Impulsübertrag" (nur Richtungsänderung!)

Streuamplitude entspricht also bis auf Vorfaktor der Fouriertransformierten des Streupotentials!

Erinnerung: $d\sigma \sim |f^+|^2$ Zusammenhang zw. experimentellen Meßgröße und Streupotential!!

Wirkungsquerschnitt

Ergebnis für f^+_{Born} speziell für kugelsymmetr. Potential $V(\underline{r}') = V(r')$ hier: ohne Herleitung

$$\Rightarrow f^+_{Born} = f^+_{Born}(q) = -\frac{2m}{\hbar^2}\,\frac{1}{q}\int_0^\infty dr'\, r'\, V(r')\, \sin(qr') \qquad q = \underbrace{|k\underline{e}_r - \underline{k}|}_{=|\underline{q}|}$$

mit $q = 2k \sin\frac{\vartheta}{2}$

$f^+_{Born}(q) = f^+_{Born}(\vartheta)$ Streuwinkel