

III. Streutheorie:

→ theoretische Beschreibung von Streu- und Stoßprozessen atomares Teilchen

Motivation: Aufschlüsse über Teilchenwechselwirkungen und über den Aufbau der Materie

III. 1. Vorbemerkungen

a) Unterschied zur Spektroskopie:

Dort wird ein System aus dem Grundzustand in einen angeregten Zustand versetzt und dann das emittierte Licht beim Übergang zurück in den Grundzustand analysiert

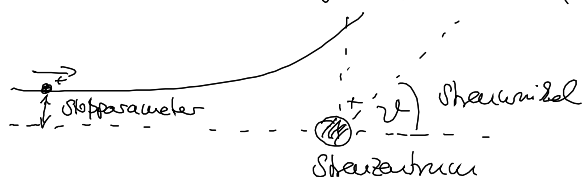
m.a.w. es handelt sich um gebundene Zustände

Streuprozesse: dort liegen Anfangs- und Endzustände im kontinuierlichen Teil des Spektrums
(Schlüsselwort: Bound state in continuum)
das sind die Streuzustände

b) Unterschied zur klassischen Streutheorie:

„Rutherfordstreuung“, siehe z.B. Buch von Goldstein über klassische Mechanik

Klassisches Streuproblem: Stoß zweier Teilchen, der sich komplett deterministisch berechnen lässt
(wichtige Größe: Bahnradius, Stoßparameter) [Newton]



qm. Streuproblem: nur Wahrscheinlichkeitsaufgaben möglich!

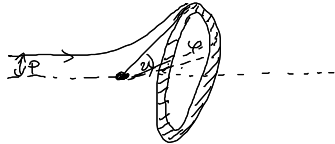
Mit welcher Wahrscheinlichkeit wird ein Streuprozess detektiert mit Hilfe experimentell aufgefälliger Parameter.
[Schrödingergl.]

c) Zentrale Größen

Analog zur klassischen Streuung fokussiert man auf den
differenziellen Wirkungsquerschnitt (\Leftrightarrow Streuquerschnitt)

$\hat{=}$ Zahl der um den Winkel $(2\theta, \varphi)$ in das Raumwinkel-
element $d\Omega$ gestreuten Teilchen, relativ zur ~~Flächen~~Fläche
des einfallenden Teilchen

Das ist eine experimentell zugängliche Größe.



Ziel der Theorie: Verbindung des Wirkungsquerschnitts
mit den elementaren Wechselwirkungspotentialen

mit folgenden: Fokus auf nicht-relativistische Streuprozesse!

III.2. Zeitunabhängige Potentialstreuung: Problemstellung

Betrachte nicht-relativistische Systeme (Teilchen) der Masse m in 3D
in Anwesenheit eines Potentials $V(r)$ [hängt nicht vom Impuls ab]

Beispiel: $V(r)$ beschreibt eine harte Kugel (standard mit Radius
„Streuzentrum“)

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

Frage: geeigneter Ansatz für die Streuzustände (Eigenzustände
von \hat{H} mit kontinuierlichem Teil des Spektrums) $\hat{=}$
[Fitzpatrick scattering, Texas]

Spezialfall $V=0$: Streuzustände sind ebene Wellen, also
 $\langle \underline{r} | \underline{k} \rangle = \psi(\underline{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}}$

(Analogie zur Normierung: Volumen $V=L^3$)

Ansatz für $V(\underline{r}) \neq 0$?

Annahmen : • elastische Streuung (Teilchen/Brechenmittel ändert nur seine Richtung, nicht seine kinetische Energie!) $|\underline{k}| = |\underline{p}| = \text{const.}$

- Streupotential besitzt nur endliche Reichweite
 $V(\underline{r}) \rightarrow 0, |\underline{r}| \rightarrow \infty$ (Streuzentrum mit Ursprung)
- wir vernachlässigen Spin

Physikalisches Bild :

- Teilchen bewegt sich als Wellenpaket mit Ausbreitungsrichtung \underline{z}
- in großer Entfernung vom Streuzentrum (vor der Streuung) sieht es nichts vom Potential \rightarrow es verhält sich wie eine ebene Welle $\sim e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$
- innerhalb der Reichweite von $V(\underline{r})$ sieht es den Einfluss
 \Rightarrow für große Abstände vom Streuzentrum verhält es sich (nach der Streuung) wie eine auslaufende Kugelwelle $\sim \frac{1}{r} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$

Bau : Warum Kugelwelle?

- das Potential $V(\underline{r})$ sieht in großer Entfernung wie ein kugel-symmetrisches Potential aus
- Kugelwellen sind Eigenzustände des freien Hamilton-Operators (ausgedrückt in Kugelkoordinaten)

das sieht man wie folgt :

$$e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} = e^{i\underline{k} \cdot \underline{r} \cos \vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(\underline{k}r) P_l(\cos \vartheta)$$

Legendrepolynome

sphärische Besselfunktionen

$$\approx \text{für } j_l(\underline{k}r) \xrightarrow{r \gg r_0} \frac{\sin(\underline{k}r - \frac{l\pi}{2})}{\underline{k}r}$$

$$= \frac{1}{2i\underline{k}r} \left[e^{i(\underline{k}r - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(\underline{k}r - \frac{l\pi}{2})} \right]$$

asymptotisch entspricht eine ebene Welle einer Überlagerung einer auslaufenden und einlaufenden Kugelwelle.

Ansatz : (für $r = |\underline{r}| \rightarrow \infty$)

$$\psi^+(\underline{r}) = e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} / \sqrt{4\pi} + f^{(+)}(\underline{k} \cdot \underline{r}, \underline{r}) \frac{e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}}{r} \quad (*)$$

\uparrow Ausbreitungsrichtung
 \uparrow Ausbreitungsrichtung
 Auslaufende Welle einlaufende Welle

dabei $f^{(+)}(\underline{k} \cdot \underline{r}, \underline{r})$ ist die Streuamplitude. sie definiert das Streuere in $\underline{r} = \frac{\underline{r}}{|\underline{r}|}$ gestreuten Anteiles

Beachte : In der Streuamplitude steckt die Information über das streuende Potential.

Weitere Bemerkungen:

- \otimes enthält nur auslaufende Kugelwellen, da diese erst durch die Wechselwirkung mit V erzeugt wird \Leftrightarrow physikalische Lösung

- Malog lässt sich folgende Wellenfunktion konstruieren

$$\psi^{(-)}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} / L^{3/2} + f^{(-)}(k, \underline{r}) \frac{e^{-ikr}}{r}$$

$\hat{=}$ Überlagerung einer ebenen Welle mit einlaufender Kugelwelle. Die Lösung ist unphysikalisch, wird aber in der formalen Streutheorie gebraucht.

Zusammenhang mit Wirkungsquerschnitt: (siehe Vorlesung)

Sei $f^{(+)}(k, \underline{r}) = f^{(+)}(r, \underline{e}_r)$ mit $r \neq (\underline{r}, \underline{e}_r)$ (plausibel für kugel-symmetrisches Potential)

dann gilt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma(r) = \frac{\vec{j}_s \cdot d\vec{F}}{|\vec{j}_0|} \quad \text{mit } d\vec{F} = r^2 d\Omega \vec{e}_r \quad (\text{Fläche, die durch den Detektor abgedeckt wird})$$

\vec{j}_s : Stromdichte der Streuwelle (des auslaufenden Kugelwells)

\vec{j}_0 : Stromdichte der einfallenden ebenen Welle

(Anteil der ebenen Welle nach Streuung trifft nicht auf Detektor und nur wichtig für den totalen F_{tot})

$$\text{es gilt: } \vec{j}_s \sim \frac{\hbar}{2m\epsilon} (\psi_s^*(\underline{r}) \nabla \psi_s(\underline{r}) - \psi_s(\underline{r}) \nabla \psi_s^*(\underline{r}))$$

$$\text{und } \vec{j}_s \text{ hat Richtung } \frac{\underline{r}}{|\underline{r}|} \text{ mit } \psi_s = f^{(+)}(r, \underline{e}_r) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\vec{j}_0 \sim \frac{\hbar}{2m\epsilon} (\psi_0^*(\underline{r}) \nabla \psi_0(\underline{r}) - \psi_0(\underline{r}) \nabla \psi_0^*(\underline{r})) \quad , \quad \psi_0 = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} / L^{3/2}$$

$$\text{dann ergibt sich (nimm für } r \rightarrow \infty) \quad \boxed{d\sigma(r) = |f^{(+)}(r, \underline{e}_r)|^2 d\Omega}$$

$\hat{=}$ der differentielle Wirkungsquerschnitt ist vollständig durch die Streuamplitude bestimmt! Ziel ist also die Berechnung von $f^{(+)}(r, \underline{e}_r)$!!

III. 2. Lippmann-Schwinger-Gleichung:

⇒ Aufstellung einer formal exakten Integralgleichung für die Streuzustände (nicht beschränkt auf kugelsymmetrische Potentiale)!

Ausgangspunkt: zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\hat{H} |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = E |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle \quad \text{und} \quad \langle \underline{\Omega} | \psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} \frac{1}{r} + f(\underline{k}, \underline{\Omega}) \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

$$\text{und} \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + V(\underline{r}), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{wegen elastischer Streuung})$$

umschreiben: $(E - \hat{H}_0) |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = \hat{V} |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle$

wir wissen $\hat{V} = 0$ gilt $|\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = |\underline{k}\rangle$, $\langle \underline{\Omega} | \underline{k}\rangle = \frac{e^{i\underline{k} \cdot \underline{\Omega}}}{r_{\underline{k}}}$
 also $(E - \hat{H}_0) |\underline{k}\rangle = 0$

$$(E - \hat{H}_0) |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle - \underbrace{(E - \hat{H}_0) |\underline{k}\rangle}_{=0} = \hat{V} |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle$$

wir definieren $\hat{G}_0(E) = (E - \hat{H}_0)^{-1}$ ist Operator („Resolvente“)

$$\Rightarrow |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0(E) \hat{V} |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle$$

Ortdarstellung: $\langle \underline{\Omega} | \psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = \langle \underline{\Omega} | \underline{k}\rangle + \langle \underline{\Omega} | \hat{G}_0(E) \hat{V} |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle$

$$= \langle \underline{\Omega} | \underline{k}\rangle + \int d\underline{\Omega}' \underbrace{\langle \underline{\Omega} | \hat{G}_0(E) | \underline{\Omega}'\rangle \langle \underline{\Omega}' | V | \psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle}_{\text{Darstellung des Streuanteils zur Wellenfunktion!}}$$

Darstellung des Streuanteils zur Wellenfunktion!

zu berechnen: $\langle \underline{\Omega} | \hat{G}_0(E) | \underline{\Omega}'\rangle = \langle \underline{\Omega} | \frac{1}{E - \hat{H}_0} | \underline{\Omega}'\rangle$ „freie ungestörte Green'sche Fkt.“