

Streuung von Teilchen an Potentialen

Einführung

Die drei Grundtypen von Spektren selbstadjungierter Hamiltonoperatoren, das *rein diskrete Spektrum* mit oder ohne Entartung, das *rein kontinuierliche Spektrum* und das *gemischte Spektrum* sowie die zugehörigen Eigenfunktionen enthalten wichtige Informationen über die physikalischen Systeme, die durch sie beschrieben werden. Aus *physikalischer* Sicht sind die bisherigen Ergebnisse allerdings noch weitgehend leer, solange wir nicht wissen, wie wir diese Informationen durch konkrete Messungen sichtbar machen können. Das statische Spektrum des Hamiltonoperators zum Beispiel, der das Wasserstoffatom beschreibt, und die räumliche Verteilung seiner stationären Eigenfunktionen sind für uns makroskopische Beobachter *a priori* nicht sichtbar, solange das Atom nicht gezwungen wird, durch Wechselwirkung mit äußeren elektromagnetischen Feldern oder mit vorgegebenen Strahlen von Elektronen seinen Zustand zu ändern. Mit anderen Worten: Die rein stationären Systeme, die wir bis hierher studiert haben, müssen noch nichtstationären Wechselwirkungen in einer im Experiment präparierbaren und nachweisbaren Form unterworfen werden, bevor wir entscheiden können, ob sie die Wirklichkeit beschreiben oder nicht. Da diese Fragestellung von zentraler Bedeutung ist, schiebe ich an dieser Stelle und noch vor der Behandlung des formalen Rahmens der Quantenmechanik ein kurzes Kapitel ein, das neben einigen allgemeinen Bemerkungen eine erste Beschreibung von elementaren Streuprozessen im Rahmen der so genannten *Potentialstreuung* enthält.

Inhalt

2.1 Makroskopische und mikroskopische Skalen	127
2.2 Streuung am Zentralpotential	130
2.3 Partialwellenanalyse	134
2.4 Born'sche Reihe und Born'sche Näherung	146
2.5* Analytische Eigenschaften der Partialwellenamplituden ..	154
2.6 Inelastische Streuung mit Partialwellenanalyse	166

2.1 Makroskopische und mikroskopische Skalen

Wenn wir ein makroskopisches, klassisches System studieren, so sind wir gewohnt, dass es immer möglich ist, Beobachtungen daran praktisch störungsfrei durchzuführen: Wir sitzen mit der Stoppuhr in der Hand vor dem schwingenden Pendel einer Standuhr und messen den maximalen Ausschlag und die Periode, vielleicht sogar die momentane Geschwindigkeit beim Durchgang durch die Vertikale, einfach durch „Hinschauen“ und ohne in merklicher Weise in die Bewegung des Pendels einzugreifen. Selbst sehr präzise Messungen an Satelliten

oder Planeten mittels Radarimpulsen und Interferometrie haben praktisch keine Rückwirkung auf deren Bewegungszustand. Dieser vertraute, fast selbstverständliche Sachverhalt wird durch die Aussage umschrieben, dass das Objekt, d. h. das isolierte physikalische System, das man studieren möchte, vom Beobachter mit seinen Messapparaturen in dem Sinne klar getrennt ist, dass man die Rückwirkung des Messvorgangs auf das Objekt vernachlässigen kann. Die Störung des Systems durch die Messung ist entweder ganz vernachlässigbar oder in nachträglich korrigierbarer Weise klein. Das System wird auch nicht dadurch beeinflusst, dass es überhaupt beobachtet wird.

Es kommt aber noch ein anderer Aspekt hinzu: Die Längenskalen und die Zeitskalen makroskopischer Prozesse sind die typischen Skalen unserer gewohnten Umwelt oder sind nur wenig, d. h. in noch vorstellbarer Weise von diesen entfernt. Man denke etwa an die tausendstel Bruchteile von Sekunden, auf die es bei sportlichen Wettbewerben ankommt, oder an die sehr präzisen Längenmessungen in der Fein- oder der Mikromechanik.

All dies ist ganz anders, wenn das Objekt der Untersuchung ein Mikrosystem ist, z. B. ein Molekül, ein Atom, ein Atomkern oder ein einzelnes Elementarteilchen:

1. Zum einen bedeutet jede Messung an einem Mikrosystem einen mehr oder minder massiven Eingriff, der das System stark verändern oder gar zerstören kann. Man denke hier als Beispiel an ein durch eine Lösung $\psi(t, \mathbf{x})$ beschriebenes Atom. Wenn man dieses Atom mit einem relativ „groben“ Strahl, z. B. einem unpolarisierten Lichtstrahl, bombardiert, so wird intuitiv einleuchtend sein, dass die subtilen Phasenbeziehungen, die für die Interferenzfähigkeit der Wellenfunktion verantwortlich sind, partiell oder vollständig zerstört werden. Dieser Aspekt der Untrennbarkeit von Objekt und Messapparatur gehört zu den schwierigsten der Quantentheorie und wird uns später an verschiedenen Stellen eingehend beschäftigen.
2. Zum anderen sind die räumlichen und zeitlichen Skalen typischer quantenmechanischer Prozesse im Allgemeinen klein im Vergleich zu räumlichen Distanzen bzw. Zeitintervallen eines Experiments zu ihrem Nachweis. Ein Beispiel wird dies erläutern: Das Wasserstoffatom hat eine Ausdehnung von der Größenordnung des Bohr'schen Radius (1.8), also etwa 10^{-10} m. Das ist eine sehr kleine Größe im Vergleich zum Abstand des Wasserstofftargets von der Quelle des einlaufenden Strahls, mit dem man das Atom untersuchen und zum Abstand des Detektors, mit dem man den gestreuten Strahl nachweisen will. Ähnliches gilt für die zeitlichen Verhältnisse an einem Atom. Charakteristische Zeiten des Atoms werden durch die Übergangsenergien definiert,

$$\tau(m \rightarrow n) = \frac{2\pi}{c} \frac{\hbar c}{E_m - E_n},$$

für den ($2p \rightarrow 1s$)-Übergang im Wasserstoff somit $\tau(2 \rightarrow 1) \approx 4 \cdot 10^{-16} \text{ s}$ – eine Zeit, die kurz ist im Vergleich mit den Zeittakten eines typischen Experiments.

Generell folgt daraus, dass wir im Allgemeinen nur *asymptotische* Zustände beobachten können, lange vor bzw. lange nach dem eigentlichen Prozess und räumlich weit davon entfernt. Konkreter ausgedrückt heißt das Folgendes: Wir wollen ein für sich allein genommen stationäres quantenmechanisches System mit Hilfe eines Strahls von Teilchen untersuchen. Das System ist als Target vorgegeben, die Teilchen werden als Projektile eingeschossen bzw. in Detektoren nachgewiesen. Der Wechselwirkungsprozess Strahl–System findet in einem Zeitintervall Δt um $t = 0$ statt, räumlich ist er in einem Volumen V am Ursprung $\mathbf{x} = 0$ lokalisiert, das durch den Radius R_0 bestimmt ist. Der Strahl wird bei $t \rightarrow -\infty$ in einem asymptotisch großen Abstand vom Target in kontrollierter Weise erzeugt und bildet, zusammen mit dem Target, den so genannten *in*-Zustand. Bei $t \rightarrow +\infty$ werden die gestreuten Teilchen, oder allgemeiner die Reaktionsprodukte des Streuprozesses, im Detektor nachgewiesen, der sich ebenfalls in einem asymptotisch großen Abstand vom Target befindet. Die gestreuten Teilchen zusammen mit dem Endzustand des Targets bilden den so genannten *out*-Zustand.¹

Andere Situationen, in denen wir Messungen vornehmen können, bieten Systeme, die zwar stationär definiert, aber aufgrund von Wechselwirkungen instabil sind. Das Wasserstoffatom im $2p$ -Zustand zum Beispiel ist instabil, weil es in einer Zeit von der Größenordnung 10^{-9} s durch Emission eines Photons in den stabilen $1s$ -Zustand zerfällt. Hier ist der *in*-Zustand das Atom im angeregten $2p$ -Zustand, der *out*-Zustand besteht aus dem auslaufenden Photon und dem Atom im stabilen Grundzustand. Auch hier stammt unsere Information über das (instabile) System aus einer asymptotischen Messung, die Zerfallsprodukte werden asymptotisch lange nach dem Zerfallsprozess und räumlich weit davon entfernt nachgewiesen.²

Allgemein halten wir fest, dass die experimentelle Information über quantenmechanische Systeme aus asymptotischen, einlaufenden oder auslaufenden Zuständen stammt. In das eigentliche Wechselwirkungsgebiet und in die typische Zeitskala der Wechselwirkung können wir nicht eingreifen. In der Quantenmechanik von Molekülen, Atomen und Kernen sind die wichtigsten Untersuchungsmethoden die Streuung von Teilchen, das sind Elektronen, Protonen, Neutronen oder α -Teilchen, an diesen Systemen sowie Anregung und Zerfall ihrer angeregten Zustände durch Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld. Die erstgenannten Streuprozesse können wir schon mit den bis jetzt bereitgestellten Hilfsmitteln behandeln und dies ist der Inhalt dieses Kapitels. Die Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld erfordert umfangreichere Vorbereitung und wird daher auf später verschoben. Auch die Streutheorie wird später in einem physikalisch allgemeineren und formalen Rahmen noch einmal aufgenommen.

¹ Nach den englischen Ausdrücken *in-coming* und *outgoing states*.

² Der instabile Zustand muss natürlich selbst erst einmal erzeugt werden und man mag fragen, warum man den Präparationsvorgang nicht als *in*-Zustand mit aufnimmt bzw. wann dies notwendig wird. Die Antwort ist eine qualitative: Die totale Zerfallswahrscheinlichkeit des instabilen Zustandes, mit \hbar multipliziert, ergibt die Energieunschärfe oder Breite Γ des Zustandes. Wenn $\Gamma \ll E_\alpha$, d. h. wenn die Breite Γ im Vergleich zur Energie E_α des Zustandes sehr klein ist, dann ist der Zustand *quasistabil*, der Prozess, der zu seiner Präparation geführt hat, kann vom Zerfallsprozess getrennt werden.

2.2 Streuung am Zentralpotential

Wir setzen voraus, dass ein vorgegebenes Potential $U(x)$, das die Wechselwirkung zweier Teilchen beschreibt, kugelsymmetrisch und von endlicher Reichweite ist. Formal drückt sich dies wie folgt aus:

$$U(x) \equiv U(r) \quad \text{mit} \quad r = |\mathbf{x}|, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} [rU(r)] = 0. \quad (2.1)$$

Kugelsymmetrische Potentiale wie etwa

$$U(r) = U_0 \Theta(r_0 - r) \quad \text{oder} \quad U(r) = g \frac{e^{-r/r_0}}{r},$$

von denen das erste außerhalb vom festen Radius r_0 verschwindet, während das zweite exponentiell abklingt, erfüllen die zweite Bedingung, das Coulombpotential

$$U_C(r) = \frac{e_1 e_2}{r}$$

erfüllt sie nicht. Wir wollen die Streuung eines Teilchens der Masse m (im Fall eines Zweiteilchensystems ist das die reduzierte Masse) an diesem Potential untersuchen und den zugehörigen differentiellen Wirkungsquerschnitt berechnen. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist eine Observable, d. h. eine klassische Größe und er ist genau wie in der klassischen Mechanik definiert (Band 1, Abschn. 1.27) als das Verhältnis der Zahl dn der Teilchen, die pro Zeiteinheit in Winkel gestreut werden, die zwischen θ und $\theta + d\theta$ liegen, zur Zahl n_0 der pro Zeiteinheit und Flächeneinheit einfallenden Teilchen. Man bestimmt also die Zahl der wirklich gestreuten Teilchen und normiert auf den einfallenden Fluss. Im Gegensatz zur klassischen Situation bestimmen wir diese Zahlen aber nicht aus Trajektorien der Teilchen, die es ja nicht mehr gibt, sondern über die Born'sche Interpretation aus der Stromdichte (1.54) (mit $\mathbf{A} \equiv 0$), die den Fluss der Aufenthaltswahrscheinlichkeit beschreibt.

Ganz korrekt müssten wir einen in 3-Richtung einlaufenden Zustand in Form eines Wellenpakets mit mittlerem Impuls $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{e}}_3$ bei $t = -\infty$ konstruieren, die zeitliche Entwicklung dieses Pakets aus der Schrödinger-Gleichung berechnen und den bei $t \rightarrow +\infty$ auslaufenden Fluss analysieren. Da dies sehr aufwändig ist, bedient man sich hier einer intuitiven Methode, die wesentlich einfacher ist und zu den richtigen Ergebnissen führt. Man betrachtet den Streuvorgang als eine stationäre Situation, bei der eine stationäre ebene Welle den einfallenden Strahl beschreibt und eine ebenfalls stationäre, auslaufende Kugelwelle, die für den Streuzustand steht. Asymptotisch weit vom Streuzentrum entfernt hat das Wellenfeld dann die Form

$$r \rightarrow \infty: \quad \psi(\mathbf{x}) \sim e^{ikx^3} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad k = \frac{1}{\hbar} |\mathbf{p}|, \quad (2.2)$$

wobei der erste Term den mit Impuls $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{e}}_3$ entlang der 3-Achse einlaufenden Strahl, der zweite die auslaufende Kugelwelle darstellt. Diesen Ansatz nennt man die *Sommerfeld'sche Ausstrahlungsbedingung*.

Die Bedeutung der im Allgemeinen komplexen Amplitude $f(\theta)$ wird klar, wenn wir die Stromdichten des einlaufenden und des auslaufenden Anteils berechnen. Hier und im Folgenden ist es nützlich, die schief-symmetrische Ableitung, die in (1.54) auftritt, durch ein eigenes Symbol abzukürzen, indem wir

$$f^*(\mathbf{x}) \overleftrightarrow{\nabla} g(\mathbf{x}) := f^*(\mathbf{x}) \nabla g(\mathbf{x}) - [\nabla f^*(\mathbf{x})] g(\mathbf{x}) \quad (2.3)$$

setzen, wobei f und g komplexe Funktionen sind, die mindestens C^1 , d. h. mindestens einmal stetig differenzierbar sind. Für die einlaufende ebene Welle ist

$$\mathbf{j}_{\text{in}} = \frac{\hbar}{2mi} e^{-ikx^3} \overleftrightarrow{\nabla} e^{ikx^3} = \frac{\hbar k}{m} \hat{\mathbf{e}}_3 = v \hat{\mathbf{e}}_3,$$

mit $v \hat{\mathbf{e}}_3$ der Geschwindigkeit des einlaufenden Teilchens.

Für den auslaufenden Anteil verwendet man sphärische Kugelkoordinaten, in denen

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right).$$

Mit den folgenden Ausdrücken für den Gradienten von $\psi = f(\theta) e^{ikr}/r$ und sein konjugiert Komplexes

$$\begin{aligned} (\nabla \psi)_r &= \frac{\partial \psi}{\partial r} = \left(-\frac{1}{r^2} + \frac{ik}{r} \right) f(\theta) e^{ikr}, \\ (\nabla \psi)_\theta &= \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} e^{ikr}, \quad (\nabla \psi)_\phi = 0, \end{aligned}$$

lässt die auslaufende Stromdichte sich leicht berechnen,

$$\mathbf{j}_{\text{out}} = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \hat{\mathbf{e}}_r + \frac{\hbar}{2mi} \frac{1}{r^3} f^*(\theta) \overleftrightarrow{\nabla} f(\theta) \hat{\mathbf{e}}_\theta.$$

Der erste Term hiervon, wenn man ihn mit dem Flächenelement $r^2 d\Omega$ einer Kugel mit Radius r um den Ursprung multipliziert, gibt einen Wahrscheinlichkeitsstrom in radialer Richtung, der proportional zu $|f(\theta)|^2$ ist. Der zweite Term hingegen liefert einen mit $1/r$ abklingenden Strom, den wir asymptotisch vernachlässigen müssen. Der Fluss von Teilchen durch den Konus mit Öffnungswinkel $d\Omega$ in auslaufender radialer Richtung ist (für große Werte von r)

$$\mathbf{j}_{\text{out}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} r^2 d\Omega \quad (r \rightarrow \infty).$$

Normiert man noch auf den einfallenden Fluss, so entsteht der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma_{\text{el}} = \frac{\mathbf{j}_{\text{out}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r r^2 d\Omega}{|\mathbf{j}_{\text{in}}|} = |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Daraus folgt die physikalische Bedeutung der Amplitude $f(\theta)$: Sie bestimmt den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\boxed{\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2} \quad (2.4)$$

und wird *Streuamplitude* genannt. Sie ist im Sinne der Born'schen Interpretation eine Wahrscheinlichkeitsamplitude, das Quadrat ihres Betrages liefert den Wirkungsquerschnitt als klassische Observable. Wie wir gleich sehen werden, beschreibt sie einen *elastischen* Streuprozess, daher die Bezeichnung. Der totale elastische Wirkungsquerschnitt ist durch das Integral über alle Raumwinkel gegeben

$$\boxed{\sigma_{\text{el}} = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = 2\pi \int_0^\pi \sin\theta d\theta |f(\theta)|^2} \quad (2.5)$$

Bevor wir fortfahren und Methoden zur Berechnung der Streuamplitude und der Wirkungsquerschnitte diskutieren, ergänzen und kommentieren wir die bisherigen Resultate durch einige Bemerkungen.

Bemerkungen

1. Das Ergebnis für die asymptotische Form von j_{out} zeigt, dass es berechtigt war, die beiden Terme in (1.135), Abschn. 1.9.3, als *auslaufende* bzw. *einlaufende* Kugelwellen zu bezeichnen.
2. Im Zwei-Teilchen-Problem mit Zentralkraft ist r die Relativkoordinate, m die reduzierte Masse

$$m \mapsto \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{und} \quad \theta \mapsto \theta^*$$

ist der Streuwinkel im Schwerpunktssystem. Die Amplitude $f(\theta)$ ist daher die *Streuamplitude im Schwerpunktssystem*.

3. Das Potential $U(r)$ muss reell sein, wenn der Hamiltonoperator selbstadjungiert sein soll. Wenn das aber so ist, dann gibt es nur *elastische* Streuung: Ganz gleich wie es gestreut wird, das Teilchen muss sich im Endzustand wiederfinden, oder, im Sinne der Quantenmechanik ausgedrückt, die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum anzutreffen, muss erhalten bleiben. Der Ausdruck (2.4) beschreibt somit den differentiellen Querschnitt für *elastische* Streuung, der Ausdruck (2.5) den integrierten elastischen Wirkungsquerschnitt. Nun gibt es auch Prozesse, bei denen der Endzustand nicht mehr derselbe ist wie der Anfangszustand. Ein Elektron, das am Atom streut, kann Energie verlieren und das Atom in einem angeregten Zustand hinterlassen. Ein Photon als Projektil kann am Atom inelastisch gestreut werden oder sogar ganz absorbiert werden. In solchen Fällen befindet sich der Endzustand, wie man sagt, in einem anderen *Kanal* als der Anfangszustand. Der Hamiltonoperator muss jetzt neben dem für die elastische Streuung verantwortlichen,

reellen Potential auch Wechselwirkungsterme enthalten, die aus dem Anfangskanal in andere, inelastische Kanäle überführen. In einer solchen Situation wird die gesamte Wahrscheinlichkeit, das Teilchen anzutreffen, nach der Streuung auf mehrere Endzustandskanäle verteilt. Ein Teil der Wahrscheinlichkeit wird dem elastischen Kanal „entzogen“ und erscheint in den inelastischen Kanälen, die durch die Streuung bevölkert werden. In Abschn. 2.6 lernen wir eine pauschale Methode kennen, eine solche Situation zu beschreiben, auch ohne die detaillierte Reaktionsdynamik zu kennen.

4. Der Ansatz (2.2) ist intuitiv einleuchtend, die darauf folgende Rechnung ist aber streng genommen nicht richtig. Die Ausstrahlungsbedingung (2.2) setzt eine stationäre Wellenfunktion voraus, bei der sowohl die einlaufende ebene Welle als auch die auslaufende Kugelwelle zu allen Zeiten vorhanden sind. Insbesondere, wenn man die Stromdichte (1.54) berechnet, müssten auch Interferenzterme zwischen dem einlaufenden und dem auslaufenden Teil auftreten. Statt dessen haben wir bei der Berechnung der Stromdichten so getan, als wäre bei $t = -\infty$ nur die ebene Welle, bei $t = +\infty$ nur die gestreute Kugelwelle vorhanden. Auch wenn die Ableitung auf der Intuition aufbaut und streng genommen nicht korrekt ist, so führt sie doch zum richtigen Ergebnis. Das liegt daran, dass die ebene Welle eine Idealisierung darstellt und eigentlich durch ein geeignet zusammengesetztes Wellenpaket ersetzt werden muss. Wir überspringen diese wesentlich aufwändigere Rechnung, referieren an dieser Stelle aber das wesentliche Resultat: Verfolgt man die Streuung eines Wellenpakets, das bei $t \rightarrow -\infty$ ein lokalisiertes Teilchen mit mittlerem Impuls $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{e}}_3$ beschreibt, so entsteht für große positive Zeiten und in asymptotischen Abständen vom Streuzentrum eine auslaufende Kugelwelle mit der angenommenen Form. Interferenzterme zwischen dem Anfangszustand und dem Endzustand treten zwar auf, aber da sie sehr rasch oszillieren, werden sie bei der Integration über das Impulsspektrum des Pakets vernachlässigbar klein. Außer in der Vorwärtsrichtung, d. h. für eine Streuung, bei der $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$ ist, ist der Ansatz (2.2) mit der gegebenen Interpretation richtig.
5. Es ist instruktiv, die quantenmechanische Beschreibung mit der Theorie der elastischen Streuung in der klassischen Mechanik zu vergleichen. Die Definition des differentiellen Wirkungsquerschnitts (Zahl der pro Zeiteinheit in das Raumwinkelement $d\Omega$ gestreuten Teilchen, normiert auf den einfallenden Fluss) ist dieselbe, der physikalische Vorgang dahinter ist aber nicht derselbe. Das klassische Teilchen, das mit Impuls $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{e}}_3$ und Stoßparameter b einläuft, befindet sich auf einer vollständig festgelegten Trajektorie und es genügt, dieser Bahn von $t = -\infty$ bis $t = +\infty$ zu folgen, um mit Sicherheit aussagen zu können, wohin es gestreut wird. In der Quantenmechanik ordnen wir dem Teilchen ein Wellenpaket zu, das beispielsweise nur aus Impulsen in 3-Richtung besteht und bei $t = -\infty$ um den Wert $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{e}}_3$ zentriert ist. Werte seiner 3-Koordinate zu

dieser Zeit lassen sich nach Maßgabe der Unschärferelation eingrenzen. Da es keine Impulskomponente in 1- oder 2-Richtung besitzt, d. h. da \mathbf{p}_1 und \mathbf{p}_2 den scharfen Wert 0 haben, ist die Position des Teilchens in der zur 3-Richtung senkrechten Ebene dagegen völlig unbestimmt. Bei $t \rightarrow +\infty$ liefert die Quantenmechanik eine Wahrscheinlichkeitsaussage dafür, das Teilchen in einem unter dem Streuwinkel θ ausgerichteten Detektor nachzuweisen. Für ein einzelnes Teilchen ist es nicht möglich vorherzusagen, wohin es gestreut werden wird. Die durch die komplexe Streuamplitude $f(\theta)$ definierte Wahrscheinlichkeit $d\sigma_{\text{el}}/d\Omega$ wird erst dann bestätigt, wenn man sehr viele Teilchen unter identischen experimentellen Bedingungen streuen lässt.

2.3 Partialwellenanalyse

Natürlich hängt die Streuamplitude von der Energie $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ des einlaufenden Teilchenstrahls ab oder, was das Gleiche ist, von seiner Wellenzahl k . Wenn es auf diese Abhängigkeit von der Energie ankommt, müssen wir korrekterweise $f(k, \theta)$ statt $f(\theta)$ schreiben. Der Wirkungsquerschnitt hat die physikalische Dimension [Fläche], die Streuamplitude daher die Dimension [Länge]. Im physikalisch zulässigen Bereich $\theta \in [0, \pi]$ bzw. $z \equiv \cos \theta \in [-1, +1]$ ist $f(k, \theta)$ bei festem k eine nichtsinguläre und im Allgemeinen quadratintegrale³ Funktion von θ . Daher lässt sie sich nach sphärischen Kugelfunktionen $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ entwickeln. Da sie nur von θ , aber nicht von ϕ abhängt, treten in dieser Entwicklung nur die Funktionen $Y_{\ell 0}$ auf, die proportional den Legendrepolyomen sind,

$$Y_{\ell 0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(z = \cos \theta).$$

Wir können also immer folgenden Ansatz machen:

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) a_{\ell}(k) P_{\ell}(z). \quad (2.6)$$

³ Mit der Einschränkung (2.1) ist f in der Tat quadratintegabel. Beim Coulombpotential wird sie in der Vorwärtsrichtung $\theta = 0$ wie $1/\sin \theta$ singulär und ist infolgedessen nicht mehr quadratintegabel. Dennoch kann man die Streuamplitude auch hier nach Legendrepolyomen entwickeln. Allerdings ist die Reihe (2.6) in der Vorwärtsrichtung nicht mehr konvergent und der Ausdruck (2.7) für den integrierten Wirkungsquerschnitt divergiert.

Den Faktor $1/k$ haben wir eingeführt, um der physikalischen Dimension der Streuamplitude Rechnung zu tragen, der Faktor $(2\ell+1)$ ist Sache der gewählten Konvention und wird sich weiter unten als nützlich erweisen. Die durch den Ansatz (2.6) definierten komplexen Größen $a_{\ell}(k)$ nennt man *Partialwellenamplituden*. Sie hängen nur von der Energie des einlaufenden Strahls bzw. seiner Wellenzahl ab. Die Kugelfunktionen sind orthogonal und auf 1 normiert. Der integrierte Wirkungsquerschnitt (2.5) ist somit

$$\sigma_{\text{el}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell, \ell'} \sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)} a_{\ell}(k) a_{\ell'}^*(k) \int d\Omega Y_{\ell' 0}^* Y_{\ell 0}$$

oder, aufgrund der Orthogonalität der Kugelfunktionen,

$$\sigma_{\text{el}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) |a_{\ell}(k)|^2. \quad (2.7)$$

Diese Ausdrücke sind ebenso wie die Formeln (2.4) und (2.5) ganz allgemein und haben noch keinen Gebrauch von der zugrunde liegenden Dynamik, hier also der Schrödinger-Gleichung mit dem Zentralpotential $U(r)$, gemacht. Wir zeigen jetzt, dass man die Amplituden $a_{\ell}(k)$ berechnen kann, wenn man für jede Partialwelle die Radialgleichung (1.127) lösen kann. Dass dies nicht nur eine im Prinzip exakte, sondern physikalisch gesehen besonders sinnvolle Methode ist, die elastische Streuung zu studieren, folgt aus den in Abschn. 1.9.3 im Vergleich mit der klassischen Situation angestellten physikalischen Überlegungen. Nach Voraussetzung hat das Potential eine endliche Reichweite, d. h. erfüllt die Bedingung (2.1). In der entsprechenden *klassischen* Situation bleibt ein Teilchen mit großem Wert des Bahndrehimpulses ℓ_{kl} weiter entfernt von $r=0$ als eines mit kleinem Wert von ℓ_{kl} und spürt die Wirkung des Potentials entsprechend weniger stark. Auch quantenmechanisch wird das effektive Potential

$$U_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + U(r)$$

für große Werte von ℓ vom Zentrifugalterm dominiert und wir erwarten, dass die Amplituden a_{ℓ} mit wachsendem ℓ rasch abklingen. Die Reihen (2.6) und (2.7) sollten demnach gut konvergieren.

Setzt man die ℓ -te Partialwelle in der Form

$$R_{\ell}(r)Y_{\ell m} = \frac{u_{\ell}(r)}{r}Y_{\ell m}$$

an, so genügt $u_{\ell}(r)$ der Differentialgleichung

$$u_{\ell}''(r) - \left(\frac{2m}{\hbar^2} U_{\text{eff}}(r) - k^2 \right) u_{\ell}(r) = 0, \quad (2.8)$$

(s. auch Abschn. 1.9.5). Bei $r=0$ muss die Radialfunktion regulär sein, d. h. wir müssen die Lösung mit $R_{\ell} \sim r^{\ell}$ bzw. $u_{\ell} \sim r^{\ell+1}$ aussuchen. Für $r \rightarrow \infty$ ist das effektive Potential gegenüber k^2 vernachlässigbar,

$$r \rightarrow \infty : u_{\ell}''(r) + k^2 u_{\ell}(r) \approx 0,$$

woraus wir schließen können, dass das asymptotische Verhalten der Partialwelle durch

$$r \rightarrow \infty : u_{\ell}(r) \sim \sin \left(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_{\ell}(k) \right) \quad (2.9)$$

gegeben sein muss. Die Phase $\delta_{\ell}(k)$, die durch diese Gleichung definiert wird, nennt man die *Streuphase* in der Partialwelle mit Bahndrehimpuls ℓ .

Wie natürlich der Ansatz (2.9) ist, macht man sich durch folgende Überlegung klar: Zum einen ist die Funktion $u_\ell(r)$ reell (bzw. kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit reell gewählt werden), wenn $U(r)$ reell ist. Unter dieser Voraussetzung muss die Streuphase daher ebenfalls reell sein. Zum anderen kennen wir die Asymptotik der kräftefreien Lösungen aus der Asymptotik (1.133) der sphärischen Besselfunktionen,

$$u_\ell^{(0)}(r) = (kr) j_\ell(kr) \sim \sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right),$$

die bei $r = 0$ regulär sind. Wenn das wahre Potential $U(r)$ identisch verschwindet, dann sind alle Streuphasen gleich Null. Diese „messen“ daher, wie stark das asymptotische, oszillatorische Verhalten der Radialfunktion $u_\ell(r)$ gegenüber dem der kräftefreien Lösungen $u_\ell^{(0)}(r)$ verschoben wird.

Es bleibt uns die Aufgabe, die Streuamplitude oder, was damit gleichwertig ist, die Amplituden $a_\ell(k)$ durch die Streuphasen auszudrücken. Die Idee zur Lösung dieser Aufgabe ist, die gesuchte Streulösung $\psi(\mathbf{x})$ der Schrödinger-Gleichung als Linearkombination von Partialwellen anzusetzen,

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell R_\ell(r) Y_{\ell 0}(\theta) = \frac{1}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell u_\ell(r) Y_{\ell 0}(\theta) \quad (2.10)$$

und diese so zu wählen, dass die einlaufende Kugelwelle $\alpha_{\text{in}} e^{-ikr}/r$, die für $r \rightarrow \infty$ darin enthalten ist, mit derjenigen übereinstimmt, die in der Ausstrahlungsbedingung (2.2) vorkommt. Beginnen wir mit dieser: Entwickelt man die ebene Welle nach Kugelfunktionen (s. (1.136)),

$$e^{ikx^3} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} j_\ell(kr) Y_{\ell 0},$$

und verwendet die Asymptotik (1.133) der sphärischen Besselfunktionen

$$j_\ell(kr) \sim \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2ikr} (e^{ikr} e^{-i\ell\pi/2} - e^{-ikr} e^{i\ell\pi/2}),$$

so lässt sich der Anteil proportional zu e^{-ikr}/r ablesen. Die auslaufende Kugelwelle in (2.2) andererseits enthält neben dem proportional zur Streuamplitude $f(\theta)$ angesetzten Term auch einen Anteil aus der ebenen Welle, den man hier ebenfalls ablesen kann. Insgesamt schreibt man die Sommerfeld'sche Ausstrahlungsbedingung (2.2) somit wie folgt in Kugelwellen um:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{Somm}}(\mathbf{x}) \sim & -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\ell\pi/2} Y_{\ell 0} \right) \\ & + \frac{e^{ikr}}{2ikr} \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{-i\ell\pi/2} Y_{\ell 0} + 2ik f(\theta) \right). \end{aligned}$$

Geht man andererseits im Ansatz (2.10) nach $r \rightarrow \infty$ und verwendet noch einmal (2.9), so folgt

$$\psi(\mathbf{x}) \sim -\frac{e^{-ikr}}{2ir} \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} e^{-i\delta_{\ell}} e^{i\ell\pi/2} Y_{\ell 0} \right) + \frac{e^{ikr}}{2ir} \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} e^{i\delta_{\ell}} e^{-i\ell\pi/2} Y_{\ell 0} \right).$$

Die einlaufenden Kugelwellen von ψ_{Somm} und ψ sind dann gleich, wenn die Koeffizienten c_{ℓ} wie folgt gewählt werden

$$c_{\ell} = \frac{i^{\ell}}{k} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_{\ell}}$$

Der Rest der Herleitung besteht einfach im Vergleich der erhaltenen Formeln. Setzt man das Ergebnis für c_{ℓ} in den auslaufenden Anteil von (2.10) ein, so ergibt sich

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2i} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_{\ell 0} \\ = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2i} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta),$$

wobei wir wieder den Zusammenhang

$$Y_{\ell 0}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta)$$

benutzt haben. Durch Vergleich mit der Reihenentwicklung (2.6) erhalten wir schließlich folgenden expliziten und exakten Ausdruck für die Amplituden $a_{\ell}(k)$ als Funktion der Streuphasen,

$$a_{\ell}(k) = \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2i} = e^{i\delta_{\ell}(k)} \sin \delta_{\ell}(k). \quad (2.11)$$

Anwendungen und Bemerkungen

1. Zunächst stellen wir fest, dass es in der Tat sinnvoll war, die Amplituden a_{ℓ} so zu definieren, dass der Faktor $(2\ell+1)$ in (2.6) auftritt. Die Amplituden bleiben dann dem Betrage nach kleiner oder gleich 1. Die zweite Form auf der rechten Seite von (2.11) ist richtig, weil die Phase δ_{ℓ} reell ist.⁴
2. Das Ergebnis (2.11) für die Partialwellenamplituden, das aus der Schrödinger-Gleichung folgt, hat eine bemerkenswerte Eigenschaft: Der Imaginärteil von a_{ℓ} ist positiv-semidefinit

$$\text{Im } a_{\ell}(k) = \sin^2 \delta_{\ell} \geq 0.$$

⁴ Diese Bemerkung ist deshalb wichtig, weil man die Streuung an einem komplexen, absorptiven Potential mit derselben Analyse behandeln kann, es dann aber mit komplexen Streuphasen zu tun hat. Der erste Teil der Formel (2.11) bleibt richtig, der zweite gilt nicht.

Berechnet man die elastische Streuamplitude (2.6) in der Vorwärtsrichtung $\theta = 0$, wo $P_\ell(z = 1) = 1$ ist, so ist ihr Imaginärteil

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \operatorname{Im} a_\ell(k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell(k).$$

Aus (2.7) folgt der integrierte elastische Wirkungsquerschnitt zu

$$\sigma_{\text{el}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell(k).$$

Mit reellem Potential gibt es nur elastische Streuung und der integrierte Wirkungsquerschnitt (2.7) ist zugleich der totale Wirkungsquerschnitt. Vergleicht man die erhaltenen Ergebnisse, so folgt eine wichtige Relation zwischen dem Imaginärteil der elastischen Streuamplitude in der Vorwärtsrichtung und dem totalen Wirkungsquerschnitt

$$\boxed{\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0)}. \quad (2.12)$$

Diese Beziehung wird *optisches Theorem* genannt.⁵ Sie ist eine Konsequenz der Erhaltung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

3. Wie wir in Abschn. 2.6 und in Band 4 sehen werden, gilt das optische Theorem auch in wesentlich allgemeineren Situationen. Wenn zwei Teilchen A und B aneinander gestreut werden, so können neben der elastischen Streuung $A + B \rightarrow A + B$ im Allgemeinen auch inelastische Prozesse auftreten, bei denen eines von ihnen oder beide in angeregte Zustände versetzt werden, $A + B \rightarrow A + B^*$, $A + B \rightarrow A^* + B^*$, oder bei denen weitere Teilchen erzeugt werden, $A + B \rightarrow A + B + C + \dots$. Abkürzend seien die möglichen Endzustände mit „ n “ bezeichnet. Das optische Theorem verknüpft dann den Imaginärteil der *elastischen* Vorwärtsstreuamplitude bei gegebenem Wert der Energie im Schwerpunktsystem mit dem *totalen* Wirkungsquerschnitt bei dieser Energie,

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_n \sigma(A + B \rightarrow n).$$

Das optische Theorem (2.12) lautet demnach präziser

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_{\text{el}}(k, \theta = 0);$$

die Größe k ist dabei immer der Betrag des Impulses \mathbf{k}^* im Schwerpunktsystem.

⁵ Tatsächlich kommt der Begriff aus der klassischen Optik und war in einem anderen physikalischen Kontext vor Entwicklung der Quantenmechanik bekannt.



<http://www.springer.com/978-3-642-37715-0>

Theoretische Physik 2

Nichtrelativistische Quantentheorie Vom
Wasserstoffatom zu den Vielteilchensystemen

Scheck, F.

2013, XIII, 368 S. 50 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-642-37715-0