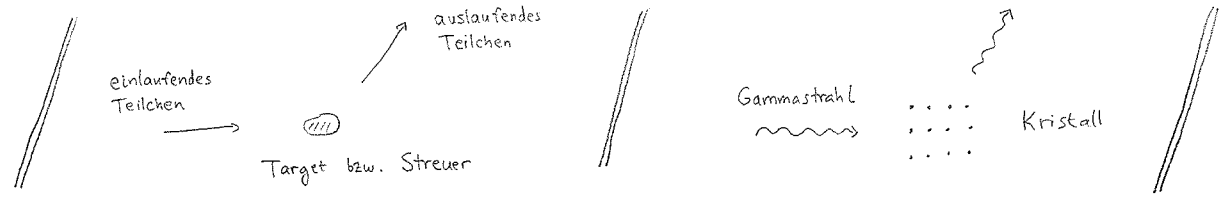


2. Streuung

Streuexperimente sind unter den wichtigsten Methoden, die zur Untersuchung der mikroskopischen Struktur der Materie benutzt werden können. Deshalb wurde in diesem Zusammenhang auch viel Formalismus entwickelt; im Folgenden werden einige der Hauptbegriffe eingeführt.



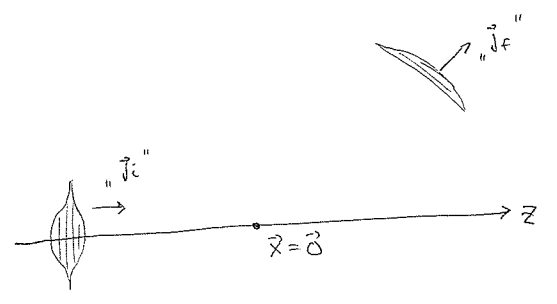
2.1 Lippmann-Schwinger-Gleichung

[Sakurai 7.1, 11]

Betrachte elastische Streuung: ein Teilchen rein, ein Teilchen raus (bzw. „ $\vec{a} \rightarrow \vec{a}$ “, wenn Streuer als Teilchen gezählt wird); Masse unverändert; $V(\vec{r})$ enthält keine Zeit \Rightarrow Energie bleibt erhalten (vgl. Fermis goldene Regel).

Bis jetzt (vgl. Kapitel 1.2) wurde Streuung als ein zeitabhängiges Phänomen behandelt: ein freies Teilchen bei $t = -\infty$; Streuung bei $t \approx 0$; mit welcher Wahrscheinlichkeit wird ein anderer freier Zustand bei $t = +\infty$ beobachtet?

Wie in der Quantenmechanik I, sollte aber auch eine „stationäre“ bzw. zeitunabhängige Behandlung möglich sein: ein freies Teilchen bei $\vec{x} \approx -\infty \hat{e}_z$; Streuung bei $\vec{x} \approx \vec{0}$; welchen Wahrscheinlichkeitsstrom wird bei $|\vec{x}| \rightarrow +\infty$ beobachtet?



Ganz konkret: Seiten 9+10 $\Rightarrow \frac{d\Omega_f}{d\Omega_i} = \frac{1}{|\vec{j}_f|} \cdot \frac{\partial x}{\partial \hbar} \cdot |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \cdot \frac{dN_f}{dE_f}$

wobei $|i\rangle$ ein freier zeitunabhängiger Zustand ist, und $|i\rangle$ Wechselwirkungen enthält:

$$|i\rangle = |i\rangle - \frac{1}{\hat{H}_0 - E - i0^+} \hat{V} |i\rangle$$

„Lippmann-Schwinger“

Hier ist alles zeitunabhängig!

Also: Wie können wir die Lippmann-Schwinger-Gleichung „verstehen“?

Zur Erinnerung: Lösung linearer Differentialgleichungen:

$$\mathcal{D}_z \Psi(z) = f(z) \Rightarrow \Psi(z) = \Psi_0(z) + \int_{-\infty}^{\infty} dz_0 G(z; z_0) f(z_0)$$

Differenzialoperator
zu bestimmende Funktion
inhomogener Term

$\Psi_0(z)$: allgemeine Lösung von $\mathcal{D}_z \Psi_0(z) = 0$
(homogene Gleichung)

$G(z; z_0)$: "Greensche Funktion":= eine spezielle
(nicht eindeutige) Lösung der Gleichung
 $\mathcal{D}_z G(z; z_0) = \delta(z - z_0)$.

In Fourier-Darstellung: $G(z; z_0) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ik(z-z_0)} \tilde{G}(k)$, $\delta(z-z_0) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ik(z-z_0)}$

$\Rightarrow \mathcal{D}_{(ik)} \tilde{G}(k) = 1 \Rightarrow G(z; z_0) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ik(z-z_0)}}{\mathcal{D}_{(ik)} \pm i\epsilon}$

Für $\tilde{\Psi}(q) := \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-iqz} \Psi(z)$: $\tilde{\Psi}(q) = \tilde{\Psi}_0(q) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{i(k-q)z}}{\mathcal{D}_{(ik)} \pm i\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dz_0 e^{-ikz_0} f(z_0)$

$\Leftrightarrow \tilde{\Psi}(q) = \tilde{\Psi}_0(q) + \frac{\tilde{f}(q)}{\mathcal{D}_{(iq)} \pm i\epsilon}$

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$i\hbar \partial_t |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\Psi\rangle$
 $\Leftrightarrow (i\hbar \partial_t - \hat{H}_0) |\Psi\rangle = \hat{V} |\Psi\rangle$

Wenn wir jetzt $\hat{V} |\Psi\rangle$ in die Rolle des inhomogenen Terms setzen, und $|\Psi\rangle$ als Energie-Eigenzustände wählen, d.h. $|\Psi\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |\Psi_I\rangle$, finden wir durch Identifikation $q \leftrightarrow -\frac{E}{\hbar}$ die allgemeine "Lösung":

$|\Psi_I\rangle = |\Psi_{I0}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V} |\Psi_I\rangle$

Diese wird durch $|\Psi_I\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}_I\rangle$, $|\Psi_{I0}\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}_{I0}\rangle$ zur Lippmann-Schwinger.

Die Wahl von $E \pm i\epsilon$ kann durch ein Rücktransformation in die Zeitkoordinate

$G(t; t_0) = \int \frac{dq}{2\pi} \frac{e^{iq(t-t_0)}}{\mathcal{D}_{(iq)} \pm i\epsilon} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \frac{e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}}}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon}$

begründet werden (vgl. Aufgabe 3.1).

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Dieselbe Logik funktioniert auch, wenn wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung als Ausgangspunkt wählen und diesmal \hat{H}_0 als Differentialoperator (\mathcal{D}_z) betrachten:

$\hat{H} |\Psi_I\rangle = E |\Psi_I\rangle$
 $\Leftrightarrow (\hat{H}_0 - E) |\Psi_I\rangle = -\hat{V} |\Psi_I\rangle$
 $\Rightarrow |\Psi_I\rangle = |\Psi_{I0}\rangle - \frac{1}{\hat{H}_0 - E \pm i\epsilon} \hat{V} |\Psi_I\rangle$

Dass "E+iε" (bzw. -E-i0+) auch hier die sinnvolle Wahl ist, soll im Folgenden klar werden.

Greensche Funktion in Ortsdarstellung („Propagator“)

Um die Wahl „ $-E-i0^+$ “ der Lippmann-Schwinger-Gleichung zu begründen berechnen wir zuerst

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') := \frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{x} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{x}' \rangle$$

Seite 7 bzw. 10: $\langle \vec{x} | \vec{q} \rangle := \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}}$ (d.h. $c=1$ auf Seite 10).

Es folgt: $\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') = \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = A \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} = A \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \Rightarrow \boxed{A=1}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3\vec{q} \langle \vec{x} | \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m} \pm i\epsilon} | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \vec{x}' \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m} \pm i\epsilon} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \quad \left| \begin{array}{l} E := \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ E' := \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \end{array} \right. \\ &= \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon'} \end{aligned}$$

Wähle Richtung von $\vec{x} - \vec{x}'$ als z-Achse; $q = |\vec{q}|$; $k := |\vec{k}|$; $\vec{q} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') = q|\vec{x} - \vec{x}'| \cos\theta$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} dq q^2 \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \frac{e^{iq|\vec{x} - \vec{x}'| \cos\theta}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon'} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 i |\vec{x} - \vec{x}'|} \int_0^{\infty} dq q \frac{e^{iq|\vec{x} - \vec{x}'|} - e^{-iq|\vec{x} - \vec{x}'|}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon'} \\ &\stackrel{q \rightarrow -q \text{ im 2. Term}}{=} \frac{1}{4\pi^2 i |\vec{x} - \vec{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dq q \frac{e^{iq|\vec{x} - \vec{x}'|}}{k^2 \pm i\epsilon' - q^2} \end{aligned}$$

Schreibe: $\frac{q}{k^2 \pm i\epsilon' - q^2} = \frac{q}{(k_{\pm} - q)(k_{\pm} + q)} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{k_{\pm} - q} - \frac{1}{k_{\pm} + q} \right]$; $k_{\pm} := (k^2 \pm i\epsilon')^{\frac{1}{2}}$

$$\Rightarrow G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{-1}{4\pi i |\vec{x} - \vec{x}'|} \cdot \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{iq|\vec{x} - \vec{x}'|} \left[\frac{1}{q + k_{\pm}} + \frac{1}{q - k_{\pm}} \right] \frac{-k_{\pm} x}{-k_{\pm}^2} \Bigg|_{\frac{x k_{\pm}}{x k_{\pm}}}$$

Komplexe Analysis: Bei $e^{iq|\vec{x} - \vec{x}'|}$ soll man den Integrationsweg in der oberen Hälfte abschließen, weil $e^{i[\text{Re}q + i\text{Im}q]|\vec{x} - \vec{x}'|}$ dort klein wird.

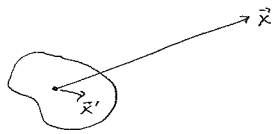
Also: „+“ \Rightarrow Pol bei $q = k_+$ $\Rightarrow G_+ = \frac{-1}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} e^{ik_+ |\vec{x} - \vec{x}'|}$
 „-“ \Rightarrow „-“ $q = -k_- \Rightarrow G_- = \frac{-1}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} e^{-ik_- |\vec{x} - \vec{x}'|}$

Fazit:

$$\langle \vec{x} | \vec{k}_i \rangle_{\pm} = \langle \vec{x} | \vec{k}_i \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\vec{x}' \frac{e^{\pm ik_i |\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} \langle \vec{x}' | \hat{V} | \vec{k}_i \rangle_{\pm}$$

Physikalische Interpretation

Sei \hat{V} nur vom \hat{x} abhängig, so dass $\langle \vec{x}' | \hat{V} | \vec{k}_i \rangle_{\pm} = V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \vec{k}_i \rangle_{\pm}$ gilt, und sei weiterhin $V(\vec{x}')$ nur in einem begrenzten Raumbereich ungleich null:



(wie bei der Multipolentwicklung).

Wie sieht die Lösung bei Abständen $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|_{\max}$ aus?

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = \left(|\vec{x}|^2 - 2\vec{x} \cdot \vec{x}' + |\vec{x}'|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = |\vec{x}| \left(1 - \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{|\vec{x}|^2} + \mathcal{O}\left(\frac{|\vec{x}'|^2}{|\vec{x}|^2}\right) \right)$$

$$= |\vec{x}| - \vec{e}_{\vec{x}} \cdot \vec{x}' + \mathcal{O}\left(\frac{1}{|\vec{x}|}\right)$$

$$\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} = \frac{1}{|\vec{x}|} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{|\vec{x}|^2}\right)$$

$$e^{\pm ik_i |\vec{x} - \vec{x}'|} \approx e^{\pm ik_i |\vec{x}|} e^{\mp i \vec{k}_f \cdot \vec{x}'}, \quad \vec{k}_f := k_i \vec{e}_x \quad \begin{cases} \vec{e}_x = \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} \\ k_f = |\vec{k}_f| = k_i \end{cases}$$

$$\Rightarrow \langle \vec{x} | \vec{k}_i \rangle_{\pm} \approx \langle \vec{x} | \vec{k}_i \rangle - \frac{\rho_m}{\hbar^2} \cdot \frac{e^{\pm ik_f |\vec{x}|}}{4\pi |\vec{x}|} \cdot \underbrace{\int d^3x' e^{\mp i \vec{k}_f \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \vec{k}_i \rangle_{\pm}}_{\text{unabhängig vom } |\vec{x}| !}$$

$$= \langle \vec{x} | \vec{k}_i \rangle + \frac{e^{\pm ik_f |\vec{x}|}}{|\vec{x}|} \mathcal{F}(\vec{k}_f, \vec{k}_i)$$

Hier ist $\frac{e^{+ik_f |\vec{x}|}}{|\vec{x}|}$ eine „auslaufende Kugelwelle“* und $\frac{e^{-ik_f |\vec{x}|}}{|\vec{x}|}$ eine „einlaufende Kugelwelle“; nur die Ersterere stellt eine physikalisch sinnvolle Randbedingung dar; deshalb also immer $E = +i\epsilon$!

* Seite 10 : $\text{Fluß} = \vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \Psi^* \nabla \Psi \}$.

In Kugelkoordinaten: $\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$\text{Jetzt ist } |\vec{x}| \leftrightarrow r \Rightarrow \nabla \left(\frac{e^{ik_f r}}{r} \right) = \left(ik_f - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ik_f r}}{r} \vec{e}_r$$

$$\frac{e^{-ik_f r}}{r} \nabla \left(\frac{e^{ik_f r}}{r} \right) = \left(ik_f - \frac{1}{r} \right) \frac{\vec{e}_r}{r^2}$$

$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{\hbar k_f}{m} \cdot \frac{\vec{e}_r}{r^2} \quad \leftarrow \text{zeigt nach draußen !}$$