

2.3 Partialwellenentwicklung. [Sakurai 7.5-6; Münster 22.2]

In der Bornschen Näherung (Seite 19) gilt:

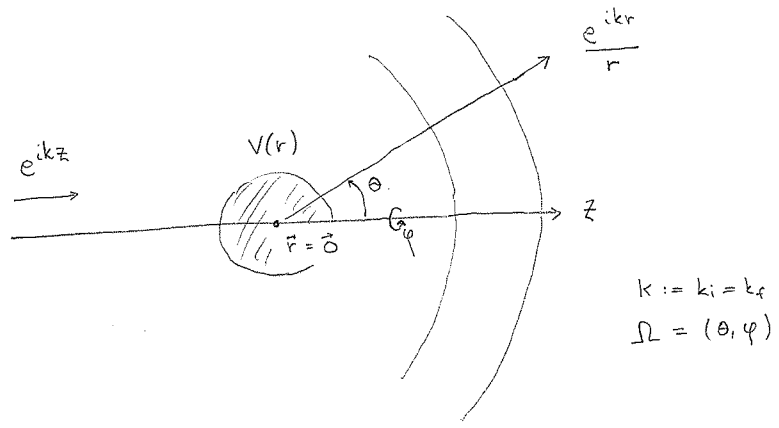
$$\langle \vec{x} | \vec{k}_f \rangle \approx \frac{c}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} - \frac{m}{2\pi \hbar^2} \tilde{V}(\vec{k}_f - \vec{k}_i) \frac{e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{x}}}{|\vec{x}|} \right\}_{k_f = k_i = |\vec{k}_i|}$$

$$\frac{d\beta_{fi}}{d\Omega_f} \approx \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 |\tilde{V}(\vec{k}_f - \vec{k}_i)|^2$$

Aber sind Korrekturen von höheren Ordnungen klein?

In speziellen Fällen sind auch exakte Aussagen möglich (d.h. zu allen Ordnungen von V). Dieses verlangt allerdings weitere Annahmen. Hier: V(r) sei kugelsymmetrisch, d.h. V(r), und besitze endliche Reichweite.

Geometrie:



Grundidee:

Kugelsymmetrie =>

die exakten Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (bzw. der Lippmann-Schwinger-Gleichung, vgl. Seite 16) sind Eigenzustände von \hat{L}^2, \hat{L}_z .

Zur Erinnerung:

In der Ortsdarstellung:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad ; \quad \hat{L}_z Y_{\ell m_z}(\theta, \varphi) = \hbar m_z Y_{\ell m_z}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad ; \quad \hat{L}^2 Y_{\ell m_z}(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m_z}(\theta, \varphi)$$

Die $Y_{\ell m_z}$ heißen „Kugelflächenfunktionen“.

„Normierung“: $\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell m_z}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'_z}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{m_z m'_z}$

„Vollständigkeit“: $f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_z=-\ell}^{\ell} a_{\ell m_z} Y_{\ell m_z}(\theta, \varphi)$ wobei $a_{\ell m_z} = \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell m_z}^*(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi)$

„Radialgleichung“: $\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell, m_z} \frac{u_\ell(r)}{r} Y_{\ell m_z}(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right) u_\ell(r) = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_E u_\ell(r)$$

Freier Limes:

Sei zuerst $V(r)=0$ und $\psi_0 := e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$.
 Wie kann ψ mittels Y_{lm} dargestellt werden?

Weil keine Abhängigkeit von φ vorhanden ist, gibt nur $m=0$ einen Beitrag. Man schreibt normalerweise

$$Y_{l0}(\theta, \varphi) =: \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta),$$

wobei P_l ein (Legendre) Polynom des Grades l ist.

$$(P_0(t)=1, P_1(t)=t, P_2(t)=\frac{1}{2}(3t^2-1), \dots; P_l(1)=1; P_l(-1)=(-1)^l)$$

Normierung: $\int_{-1}^{+1} dt P_l(t) P_{l'}(t) = \frac{2}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{l0}^*(\theta, \varphi) Y_{l'0}(\theta, \varphi) = \frac{2 \delta_{ll'}}{2l+1}$

Ansatz: $\psi_0(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \theta)$

„Helmholtz-Gleichung“

Exakte Lösung: die Radialgleichung $\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l = 0$
 kann durch die „sphärischen Bessel-Funktionen“ $j_l(s) := (-s)^l \left(\frac{1}{s} \frac{d}{ds} \right)^l \left(\frac{\sin s}{s} \right)$
 sowie die „sphärischen Neumann-Funktionen“ $n_l(s) := (-s)^l \left(\frac{1}{s} \frac{d}{ds} \right)^l \left(-\frac{\cos s}{s} \right)$
 gelöst werden: $R_l(r) = a_l j_l(kr) + b_l n_l(kr)$.
 R_l sei endlich bei $r=0 \Rightarrow b_l = 0$.
 R_l habe die richtige Normierung (ψ_0) bei $r \rightarrow \infty \Rightarrow a_l = (2l+1)(i)^l$.
 ↑ Seite 28

Asymptotische Lösung ($r \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} R_l(r) &= \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{+1} dt P_l(t) \psi_0(r, \theta) \Big|_{t=\cos \theta} \\ &= \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{+1} dt P_l(t) e^{ikr t} \\ &= \frac{2l+1}{2ikr} \left\{ e^{ikr} P_l(1) - e^{-ikr} P_l(-1) \right\} + O\left(\frac{1}{(kr)^2}\right) \\ &= \frac{2l+1}{2ikr} \cdot \underbrace{e^{i\frac{\pi}{2}l}}_{i^l} \left\{ e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})} \right\} + O\left(\frac{1}{(kr)^2}\right) \end{aligned}$$

Fazit: $e^{ikr \cos \theta} \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} \cdot i^l \cdot \left\{ e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})} \right\} P_l(\cos \theta)$

„auslaufende Kugelwelle“

„einlaufende Kugelwelle“

Wechselwirkender Fall:

Auch bei $V(r) \neq 0$ kann die Lösung in der Basis von $P_\ell(\cos\theta)$ entwickelt werden. Für $r \rightarrow \infty$ ist die auslaufende (gestreute) Kugelwelle der Form

$$\begin{aligned} \Psi_S(r, \theta) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} f(\theta, k) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell(k) P_\ell(\cos\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2ik} \left(\frac{2ik c_\ell(k)}{2\ell+1} \right) \frac{e^{i(kr - \frac{\pi\ell}{2})}}{r} \cdot P_\ell(\cos\theta) \end{aligned}$$

Die Gesamtlösung übernimmt die Form

$$\Psi(r, \theta) = \Psi_0(r, \theta) + \Psi_S(r, \theta)$$

$$\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2ikr} i^\ell \left\{ S_\ell(k) e^{i(kr - \frac{\pi\ell}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi\ell}{2})} \right\} P_\ell(\cos\theta)$$

wobei $S_\ell(k) := 1 + \frac{2ik c_\ell(k)}{2\ell+1}$

Behauptung: $|S_\ell(k)| = 1 \quad \forall \ell, k$

Beweis: Wahrscheinlichkeitserhaltung („Unitarität“) verlangt, dass $\lim_{r \rightarrow \infty} \int_{|\vec{x}|=r} r^2 d\Omega \vec{e}_r \cdot \vec{j} = 0$ gilt.

Wie immer: $\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \Psi^* \nabla \Psi \}$

$$\begin{aligned} \nabla \Psi &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2r} i^\ell \left\{ S_\ell(k) e^{i(kr - \frac{\pi\ell}{2})} + e^{-i(kr - \frac{\pi\ell}{2})} \right\} P_\ell(\cos\theta) \vec{e}_r \\ \Psi^* &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell'+1}{-2ikr} (-i)^{\ell'} \left\{ S_{\ell'}^*(k) e^{-i(kr - \frac{\pi\ell'}{2})} - e^{i(kr - \frac{\pi\ell'}{2})} \right\} P_{\ell'}(\cos\theta) \end{aligned}$$

$$\int d\Omega P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta) \stackrel{\text{Seite 24}}{=} \frac{4\pi}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{|\vec{x}|=r} r^2 d\Omega \vec{e}_r \cdot \vec{j} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \pi(2\ell+1) \text{Im} \left\{ \frac{i}{k} \left[S_\ell^* S_\ell + S_\ell^* e^{-2i(kr - \frac{\pi\ell}{2})} - 1 - S_\ell e^{2i(kr - \frac{\pi\ell}{2})} \right] \right\} \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\pi(2\ell+1)}{k} \left\{ |S_\ell(k)|^2 - 1 \right\} \stackrel{\text{imaginär!}}{=} 0 \Rightarrow \square \\ &\text{„}\ell\text{'s unabhängig(?)“} \end{aligned}$$

Notation: $S_\ell(k) =: e^{2i\delta_\ell(k)}, \quad \delta_\ell(k) \in \mathbb{R}$

$\delta_\ell(k)$ wird die Streuphase genannt.

Folge:

$$\frac{c_\ell(k)}{2\ell+1} = \frac{S_\ell(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_\ell(k)} - 1}{2ik}$$

$$= \frac{e^{i\delta_\ell(k)} \sin \delta_\ell(k)}{k}$$

$$= \frac{\cos \delta_\ell \sin \delta_\ell + i \sin^2 \delta_\ell}{k} = \frac{\sin \delta_\ell}{k (\cos \delta_\ell - i \sin \delta_\ell)}$$

$$= \frac{1}{k (\cot \delta_\ell(k) - i)}$$

Wirkungsquerschnitt & optisches Theorem

Wir haben gelernt, dass die Funktion $f(\theta, k)$ in

$$\langle \vec{x} | \vec{k}^{(in)} \rangle = \frac{c}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{ikz} + f(\theta, k) \frac{e^{ikr}}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right\}$$

für kugelsymmetrisches V unbedingt folgender Form ist:

$$f(\theta, k) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta), \quad \delta_l(k) \in \mathbb{R}.$$

„Partialwellenentwicklung“

Es folgt: $\ast \frac{d\mathcal{Z}}{d\Omega} \stackrel{\text{Seite 19}}{=} |f(\theta, k)|^2$

$$= \frac{1}{k^2} \sum_{l, l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i[\delta_l(k) - \delta_{l'}(k)]} \sin \delta_l(k) \sin \delta_{l'}(k) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta)$$

„kompliziert“

$$\ast \mathcal{Z} = \int d\Omega \frac{d\mathcal{Z}}{d\Omega} = 2\pi \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \frac{d\mathcal{Z}}{d\Omega}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k)$$

„einfach“

(Bemerkung: Konvergiert die Summe? Ja, falls $\delta_l \approx \frac{1}{l^{1+\alpha}}, \alpha > 0$, bei großem l .*)

$$\ast \text{Im } f(\theta, k) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) P_l(\cos \theta) \quad ; \quad P_l(1) = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{Z} = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(\theta, k)}$$

„Optisches Theorem“

Bemerkung: $\hat{S} = \hat{1} - i\hat{T}$ (Seite 22)

$$\Rightarrow \hat{1} = \hat{S}^\dagger \hat{S} = (\hat{1} + i\hat{T}^\dagger)(\hat{1} - i\hat{T}) = \hat{1} + i(\hat{T}^\dagger - \hat{T}) + \hat{T}^\dagger \hat{T}$$

$$\Leftrightarrow \hat{T}^\dagger + \hat{T} = i(\hat{T}^\dagger - \hat{T})$$

\uparrow \sim Imaginärteil der Amplitude
 \uparrow $\sim |Amplitude|^2 \sim$ Wahrscheinlichkeit $\sim \mathcal{Z}$

Fazit: $f(\theta, k)$ und \mathcal{Z} können mittels der Streuphasen $\delta_l(k)$ ohne Näherungen parametrisiert werden. (Es stellt sich natürlich die Frage, ob $\delta_l(k)$ selbst ohne Näherungen bestimmt werden können!)

* Um dieses zu garantieren ist eine „endliche Reichweite“ des Potentials wichtig!