Vorlesung 9

Die elastische Streuung, optisches Theorem, Streumatrix

Streuexperimente sind ein wichtiges Instrument, das uns erlaubt die Eigenschaften der Materie bei kleinsten Skalen zu studieren. Ein typisches Setup sieht so aus: Ein Strahl von Teilchen wird von $\vec{r} = \infty$ aus geschickt. Die Teilchen wechselwirken mit dem Target und werden gestreut. Wir messen die (relative) Zahl der gestreuten Teilchen als eine Funktion des Streuwinkels. Wir versuchen aus diesen Messungen etwas über die Eigenschaften des Streuzentrums (Target) zu lernen.

Wie beschreiben wir dieses Setup in der Quantenmechanik? Wir nehmen an dass die Wechselwirkung zwischen unseren Teilchen und dem Target verschwindet, wenn der Abstand größer wird. D.h. für $r = \infty$ sind die Teilchen frei. Die Energie der Teilchen und ihre Wellenfunktion ist dann vollständig bekannt

$$\psi_{\text{in}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{1}$$

Wir nehmen an, dass die Streuung elastisch ist; d.h., dass die Energie des Teilchens erhalten bleibt. Die Streuung ändert die Wellenfunktion bei $\vec{r} = \infty$

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} = \psi_{\text{in}}(\vec{r}) + \psi_{\text{out}}(\vec{r}). \tag{2}$$

Die Größe $f(\theta)$ nennt man die Streuamplitude. Wir wählen das einlaufende $\vec{k} = k\vec{e}_z$, sodass θ in der obigen Gleichung der Polarwinkel ist.

Um die Zahl der gestreuten Teilchen berechnen zu können, brauchen wir den Strom

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\partial}\psi - c.c.\right). \tag{3}$$

Für die einlaufende Welle ergibt sich

$$\vec{j}_{\text{in}} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}. \tag{4}$$

Im Fall der gestreuten Welle müssen wir aufpassen, dass wir die richtige Stromkomponente berechnen. In der Tat ist die Zahl der Teilchen, die in dem Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ fliegen, durch die folgende Formel gegeben ist

$$\lim_{r\to\infty} \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\text{out}} = \mathrm{d}\Omega \lim_{r\to\infty}\; r^2\; \vec{e}_r\cdot\vec{j}_{\text{out}}. \tag{5}$$

D.h., wir brauchen die $\vec{e}_r$-Komponente des Stroms. Weil $\vec{\partial} = \vec{e}_r\partial/\partial r + ...$, haben wir

$$\vec{j}_{\text{out}}\cdot\vec{e}_r = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*_{\text{out}}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\text{out}} - \frac{\partial\psi^*_{\text{out}}}{\partial r}\psi_{\text{out}}\right) = \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} + \mathcal{O}(1/r^3). \tag{6}$$

D.h.

$$\lim_{r\to\infty} \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\mathrm{out}} = \mathrm{d}\Omega\; v|f(\theta)|^2. \tag{7}$$

Das Verhältnis von ein- und auslaufenden Strömen ergibt den Wirkungsquerschnitt

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{\lim_{r\to\infty} \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\mathrm{out}}}{j_{\mathrm{in}}} = \mathrm{d}\Omega|f(\theta)|^2. \tag{8}$$

Wenn wir über den Raumwinkel integrieren, bekommen wir den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \int \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\,\mathrm{d}\Omega. \tag{9}$$

Es gibt eine wichtige Relation zwischen dem totalen Wirkungsquerschnitt und dem Wert der Streuamplitude bei $\theta = 0$. Diese Relation folgt aus der Wahrscheinlichkeitserhaltung. Die Wahrscheinlichkeitserhaltung umfasst einlaufende und auslaufende Ströme sowie deren Interferenzen; ohne die Interferenz kann man die Wahrscheinlichkeitserhaltung nicht erfüllen.

Um die Interferenz berechnen zu können, brauchen wir eine alternative Beschreibung der einlaufenden ebenen Welle $\Psi_{\mathrm{in}} = e^{ikz}$. Diese Beschreibung beruht auf der Entwicklung der ebenen Welle in Kugelflächenfunktionen

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l,m} C_{l,m}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_{l,m}(\theta,\varphi)\frac{u_l(r)}{r}, \tag{10}$$

wobei $u_l(r)$ die Lösungen der freien Schrödinger Gleichung sind

$$\frac{\mathrm{d}^2u_l}{\mathrm{d}r^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l(r) = 0 \tag{11}$$

und der Normierungsfaktor $\sim \sqrt{2l+1}$ in Gl. (10) zur Vereinfachung der folgenden Rechnungen eingeführt worden ist.

Wir wollen die Koeffizienten $C_{l,m}$ bestimmen. Weil e^{ikz} von Azimuthwinkel φ unabhängig ist, finden wir $C_{lm} \sim \delta_{m0}$; wir wissen auch dass

$$Y_{l0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta). \tag{12}$$

D.h., wir können Gl. (10) umschreiben ($C_{l,m} \to C_{l,0} \to C_l$)

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_l C_l P_l(\cos\theta)\frac{u_l(r)}{r}, \tag{13}$$

Die Legendre-Polynome sind orthogonal

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1}. \tag{14}$$

D.h., dass wir die Koeffizienten C_l von Gl. (13) bekommen, indem wir e^{ikz} über $\cos\theta$ mit Gewicht $P_l(\cos\theta)$ integrieren

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta P_l(\cos\theta) e^{ikr\cos\theta} = \frac{2C_l}{2l+1}\frac{u_l(r)}{r}. \tag{15}$$

Dieses Ergebnis ist exakt und gilt deswegen für alle r, insbesondere für $r = \infty$. Für $r \to \infty$ wissen wir, was auf der rechten Seite von Gl. (15) passiert, weil

$$\lim_{r\to\infty} u_l(r) = \sin(kr - l\pi/2) + \mathcal{O}(1/r). \tag{16}$$

Auf der linke Seite in Gl. (15) führen wir eine partielle Integration aus

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta P_l(\cos\theta) e^{ikr\cos\theta} = P_l(\cos\theta)\frac{e^{ikr\cos\theta}}{ikr}\Bigg|_{-1}^{1} - \frac{1}{ikr}\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta \frac{\mathrm{d}P_l(\cos\theta)}{\mathrm{d}\cos\theta} e^{ikr\cos\theta}. \tag{17}$$

Der zweite Term ist $\mathcal{O}(1/r^2)$ (um das zu sehen, muss man noch einmal partiell integrieren) und kann vernachlässigt werden. Wir benutzen dann $P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l$, vergleichen Gl. (15,16,17) und bekommen

$$C_l = \frac{(2l+1)\, i^l}{k}. \tag{18}$$

Die Entwicklung der ebenen Welle in Kugelflächenfunktionen ist dann

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_l \frac{(2l+1)i^l}{kr} P_l(\cos\theta) u_l(r). \tag{19}$$

Wir nehmen den Grenzwert $r \to \infty$ in der obigen Gleichung und bekommen

$$\begin{aligned}
\lim_{r\to\infty} e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l P_l(\cos\theta)}{2ikr}\left\{e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right\} + \mathcal{O}(r^{-2}) \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l P_l(\cos\theta)}{2ikr}\left\{(-i)^l e^{ikr} - (i)^l e^{-ikr}\right\} + \mathcal{O}(r^{-2}) \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)\; P_l(\cos\theta)}{2ikr}\left\{e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right\} + \mathcal{O}(r^{-2}).
\end{aligned} \tag{20}$$

Wir konzentrieren uns jetzt auf die l-Summen. Wir benutzen noch einmal $P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l$ und schreiben diese beide Summen um als

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta_\pm), \tag{21}$$

wobei $\theta_+ = 0$ und $\theta_- = \pi$ ist.

Die Legendrepolynome erfüllen die Vollständigkeitsbedingung

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(x)P_l(x') = 2\delta(x-x'). \tag{22}$$

D.h., dass

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta_\pm) = 2\delta(\cos\theta - \cos\theta_\pm), \tag{23}$$

sodass

$$\lim_{r\to\infty} e^{ikr\cos\theta} = \frac{1}{ikr}\left(\delta(1-\cos\theta)e^{ikr} - \delta(1+\cos\theta)e^{-ikr}\right) + \mathcal{O}(r^{-2}). \tag{24}$$

Weil $\psi(\vec{r}) = \psi_{\text{in}}(\vec{r}) + \psi_{\text{out}}(\vec{r})$ ist, bekommen wir drei Terme, wenn wir den Strom berechnen

$$\vec{j} = \vec{j}_{\text{in}} + \vec{j}_{\text{out}} + \vec{j}_{\text{int}}, \tag{25}$$

wobei, wie wir oben berechnet haben,

$$\vec{j}_{\text{in}} = \vec{v}, \quad \vec{j}_{\text{out}} = v\ \vec{e}_r\ \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}, \tag{26}$$

und

$$\vec{j}_{\text{int}} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*_{\text{in}}\ \vec{\partial}\psi_{\text{out}} + \psi^*_{\text{out}}\ \vec{\partial}\psi_{\text{in}} - c.c.\right). \tag{27}$$

Wir wollen $\vec{j}_{\text{int}}$ für $r \to \infty$ berechnen; dazu benutzen wir in Gl. (27) die asymptotische Form der Wellenfunktionen

$$\psi_{\text{in}} = \frac{1}{ikr}\left(\delta(1-\cos\theta)e^{ikr} - \delta(1+\cos\theta)e^{-ikr}\right), \quad \psi_{\text{out}} = \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}. \tag{28}$$

Außerdem brauchen wir nur die radiale Komponente von $\vec{j}_{\text{int}}$ und nur solche Terme, die ein endliches Limit

$$\lim_{r\to\infty} r^2\ \vec{e}_r \cdot \vec{j}_{\text{int}} \tag{29}$$

besitzen. D.h., dass wenn wir $\vec{j}_{\text{int}}$ in Gl. (27) berechnen, müssen wir nur $e^{\pm ikr}$ in Gl. (28) nach r ableiten. Wir erhalten

$$r^2\vec{e}_r \cdot \vec{j}_{\text{int}} = \frac{i\hbar}{m^2}\left[f(\theta) - f^*(\theta)\right]\delta(1-\cos\theta) = -\frac{2\hbar}{m}\ \text{Im}f(0)\ \delta(1-\cos\theta). \tag{30}$$

Weil die Teilchen nicht erzeugt und vernichtet werden, muss dass Flächenintegral des Stroms $\vec{j}$ bei unendlich Null sein

$$0 = \lim_{r\to\infty} \int \mathrm{d}\vec{S} \cdot \vec{j}. \tag{31}$$

Die Limits der drei Komponenten von $\vec{j}$ ergeben jeweils

$$\begin{aligned}
\lim_{r\to\infty} \int \mathrm{d}\vec{S} \cdot \vec{j}_{\mathrm{in}} &\sim \int \mathrm{d}\cos\theta \ \cos\theta = 0, \\
\lim_{r\to\infty} \int \mathrm{d}\vec{S} \cdot \vec{j}_{\mathrm{out}} &= v \int \mathrm{d}\Omega |f(\theta)|^2 = v\sigma \\
\lim_{r\to\infty} \int \mathrm{d}\vec{S} \cdot \vec{j}_{\mathrm{int}} &= -\frac{4\pi\hbar}{m} \mathrm{Im} f(0).
\end{aligned} \tag{32}$$

Wir erhalten so das "optische Theorem"

$$0 = v\sigma - \frac{4\pi\hbar}{m}\mathrm{Im}f(0), \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0). \tag{33}$$

Das optische Theorem kann verallgemeinert werden. Das Ergebnis lautet

$$\frac{1}{2i}\left[f(\vec{k}', \vec{k}) - f^*(\vec{k}, \vec{k}')\right] = \frac{k}{4\pi}\int \mathrm{d}\vec{n}'' \ f^*(\vec{k}'', \vec{k}') f(\vec{k}'', \vec{k}), \tag{34}$$

wobei $f(\vec{k}', \vec{k})$ durch das asymptotische Verhalten der Wellenfunktionen definiert ist

$$\lim_{r\to\infty} \psi = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{f(\vec{k}', \vec{k})}{r} e^{ikr}, \tag{35}$$

und $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ (falls $\vec{k}||\vec{e}_z$ ist und $\vec{k}' \cdot \vec{k}/k^2 = \cos\theta$ ist, dann ist $f(\vec{k}', \vec{k}) = f(\cos\theta)$ die Streuamplitude, die uns schon bekannt ist).

Wir führen jetzt den Streuoperator $\hat{T}$ ein, der aus einer ebenen Welle eine ebene Welle in die andere Richtung macht

$$\hat{T}|\vec{k}\rangle = \int \frac{\mathrm{d}\vec{n}'}{4\pi} f(\vec{k}', \vec{k}) |\vec{k}'\rangle \tag{36}$$

Die Streuamplitude ist das Matrixelement des Streuoperators

$$\langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle = f(\vec{k}', \vec{k}). \tag{37}$$

Das entspricht der Normierung

$$\langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = 4\pi\delta(\vec{n}' - \vec{n}) \tag{38}$$

und der Vollständigkeitsbedingung

$$\hat{1} = \int \frac{\mathrm{d}\Omega_{\vec{n}''}}{4\pi} |\vec{k}''\rangle\langle\vec{k}''|. \tag{39}$$

Wir können dann Gl. (34) umschreiben zu

$$\hat{T} - \hat{T}^\dagger = 2ik\, T^\dagger T \tag{40}$$

Um die Bedeutung dieser Gleichung zu sehen, führen wir die Streumatrix $\hat{S}$ ein

$$\hat{S} = 1 + 2ikT \tag{41}$$

und finden dass die Gl. (40) bedeutet, dass die $\hat{S}$-Matrix unitär ist

$$\hat{S}\ \hat{S}^\dagger = \hat{1}. \tag{42}$$