Skript zur 24. Vorlesung "Quantenmechanik", Freitag den 15. Juli, 2011.

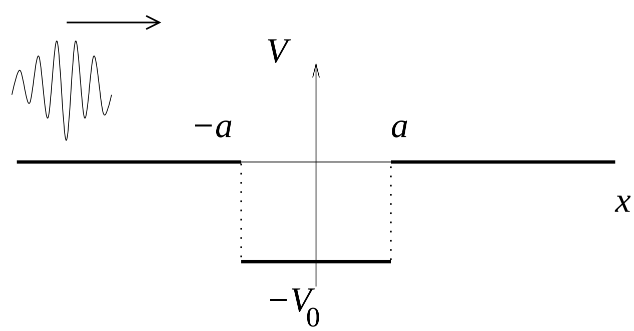
15.5 Anwendung: Streutheorie

In einem Streuproblem betrachtet man die Situation, das ein Teilchen von einem Hamilton-Operator der Form

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

beschrieben wird, wobei $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$ der Hamilton-Operator eines freien Teilchens ist und die Störung $\hat{H}_1 = V(\mathbf{r})$ ein Potential ist, das nur nicht-null ist in der Umgebung des "Streuzentrums", das wir im Ursprung unseres Koordinatensystems wählen. Ein freies Teilchen (Wellenpaket), dass dem Streuzentrum nähert, kann durch das Streupotential $\hat{H}_1$ seinen Zustand (d.h. Energie, Bewegungsrichtung) ändern. Man sagt: Das Teilchen wird gestreut. Wir werden hier nur zeit-unabhängige Streupotentiale $V(\mathbf{r})$ betrachten. In diesem Fall ist die Energie erhalten und kann das Teilchen durch die Streuung nur seine Bewegungsrichtung ändern.

Ein Beispiel eines Streuproblems in einer Dimension ist der Potentialtopf. In diesem Fall wird das Streuproblem durch die Wahrscheinlichkeiten R und T dass das Teilchen reflektiert bzw. durchgelassen wird beschrieben. In 6.5 haben wir besprochen, wie man R und T quantenmechanisch berechnet. Ein wichtiger Punkt in dieser Berechnung war, dass sie mit Wellen anstatt Wellenpakete ausgeführt werden konnte.



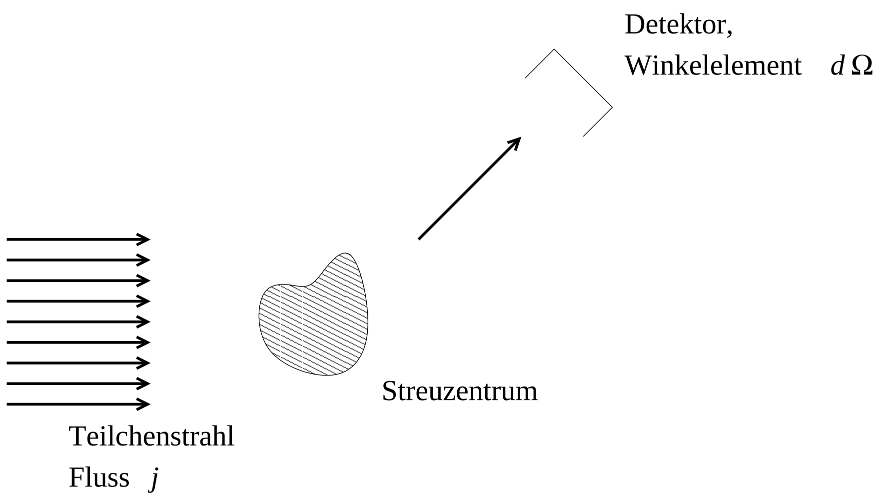
In drei Dimensionen wird ein Streuproblem durch den differentiellen Streuquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ beschrieben. Dieser ist definiert als

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\dot{N}(\Omega)}{j},$$

wobei $\dot{N}(\Omega)d\Omega$ die Zahl der Teilchen ist, die pro Zeiteinheit in einem Detekter mit Winkelelement $d\Omega$ gemissen wird, und j der eingehende Fluss oder Stromdichte der einfallenden Teilchen, d.h. die Zahl der Teilchen pro Zeiteinheit und pro Oberflächeneinheit im einkommenen Teilchenstrahl. Der totale Streuquerschnitt ist als

$$\sigma = \int d\Omega \, \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

definiert.



Wir berechnen nun $d\sigma/d\Omega$ in Störungstheorie. Das Streuzentrum wird "eingebettet" in einem Volumen L^3 mit periodischen Randbedingungen (damit alle Zustände normiert sind und wir die Ergebnisse der zeitabhängigen Störungstheorie anwenden können).

Anfangszustand:

$$\psi_{\mathrm{i}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} e^{ikz}$$

Endzustand:

$$\psi_{\mathrm{f}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k}_f z}$$

Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, dass ein Teilchen i $\to$ f gestreut wird:

$$\Gamma_{\mathrm{fi}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathrm{f} | \hat{H}_1 | \mathrm{i} \rangle \right|^2 \delta(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}}).$$

Hieraus folgt, dass

$$\dot{N}d\Omega = \sum_{\mathrm{f}:\mathbf{k}_\mathrm{f}\ \mathrm{in}\ d\Omega} \Gamma_{\mathrm{fi}} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle \mathrm{f}|\hat{H}_1|\mathrm{i}\rangle\right|^2 \Omega(E)\frac{d\Omega}{4\pi},$$

wobei $\Omega(E)$ die totale Zustandsdichte und $\Omega(E)(d\Omega/4\pi)$ die Dichte der Zustände mit $\mathbf{k}$ im Winkelelement $d\Omega$ ist. Die Energie $E = E_\mathrm{i} = E_\mathrm{f}$. Wir wissen aus den Übungen, dass

$$\Omega(E) = \frac{L^3 m}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2mE}.$$

Der Fluss j wird von j = Geschwindigkeit / Volumen gegeben, d.h.

$$j = \frac{\hbar k/m}{L^3}.$$

Alles kombinierend findet man dass der differentiellen Streuquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ durch

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= L^6\left|\langle \mathrm{f}|\hat{H}_1|\mathrm{i}\rangle\right|^2 \frac{m^2}{(2\pi)^2\hbar^4}\\ &= \frac{m^2}{(2\pi)^2\hbar^4}\left|\int d\mathbf{r}\, e^{ikz-i\mathbf{k}_\mathrm{f}\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\right|^2\end{aligned}$$

gegeben wird, wobei wir in der letzten Gleichung $\hat{H}_1 = V(\hat{\mathbf{r}})$ eingesetzt haben. Dieses Ergebnis ist als die Bornsche Näherung für den Streuquerschnitt bekannt.

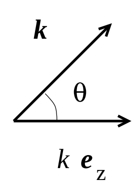
Für ein kugelsymmetrisches Potential kann man diesen Ausdruck vereinfachen:

$$\int d\mathbf{r}\, e^{ikz-i\mathbf{k}_\mathrm{f}\mathbf{r}}V(r) = \int d\mathbf{r}\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{z}}V(r),$$

mit $\mathbf{q} = k\mathbf{e}_z - \mathbf{k}_\mathrm{f}$. Dann:

$$\int d\mathbf{r}\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}V(r) = 2\pi\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta'\int_0^\infty dr\, r^2 e^{iqr\cos\theta'}V(r) = \frac{4\pi}{9}\int_0^\infty dr\, r\sin(qr)V(r).$$

Für die Länge q des Vektors $\mathbf{q}$ findet man, dass



$$q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \qquad ,$$

wobei θ der Winkel zwischen $k\mathbf{e}_z$ und $\mathbf{k}_\mathrm{f}$ ist.

$$\Rightarrow \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2}{\hbar^4 q^2}\left|\int_0^\infty dr\, r\sin(qr)V(r)\right|^2.$$

Bemerkungen:

1. Wenn das Potential V nur nicht-null ist für $r \lesssim a$ <u>und</u> wenn $ka \ll 1$, dann findet man, dass
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{(2\pi)^2\hbar^4} \left| \int d\mathbf{r}\, V(\mathbf{r}) \right|^2$$
unabhängig von Ω und auch für nicht-kugelsymmetrische Potentiale $V(\mathbf{r})$.

2. Dieses Ergebnis ist eine Annäherung, die nur gültig ist für V schwach genug. Praktisch bedeutet das häufig, dass
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \ll \left(\frac{2\pi}{k}\right)^2 = (\text{Wellenlänge})^2 .$$

3. Die Bornsche Näherung kann auch auf Streuprobleme in 1 Dimension angewendet werden. In diesem Fall findet man:

   Reflektionswahrscheinlichkeit:
$$R = \frac{\dot{N}}{J} = \frac{\text{Zahl der reflektierten Teilchen pro Zeiteinheit}}{\text{Teilchenstrom=Zahl der einfallenden Teilchen pro Zeiteinheit}}$$
   Mit
$$\psi_{\mathrm{i}}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \qquad \psi_{\mathrm{f}}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_{\mathrm{f}}x}, \quad k_{\mathrm{f}} = -k$$
   findet man dann:
$$\dot{N} = \sum_{k_{\mathrm{f}} \approx -k} \Gamma_{\mathrm{fi}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathrm{f} | \hat{H}_1 | \mathrm{i} \rangle \right|^2 \Omega(E)\, \frac{1}{2},$$
   wobei
$$\Omega(E) = \frac{L}{m\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}$$
   die Zustandsdichte in einer Dimension ist, und der Faktor 1/2 der relative Anteil der Zustände mit k_{f} negativ gibt. Der Strom der einfallenden Teilchen ist
$$J = \frac{\frac{\hbar k}{m}}{L} = \frac{\text{Geschwindigkeit}}{\text{Länge}}.$$
   Hieraus folgt, dass die Reflektionswahrscheinlichkeit
$$R = \frac{L^2 m^2}{\hbar^4 k^2} \left| \langle \mathrm{f} | \hat{H}_1 | \mathrm{i} \rangle \right|^2 = \frac{m^2}{k^2\hbar^4} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx\, V(x) e^{2ikx} \right|^2 .$$
   In diesem Fall ist die Störungstheorie gültig, solange $R \ll 1$. (Im Limes $k \to 0$ divergiert R aber!)