Moderne Theoretische Physik III (TP)

Vorlesung 1

Kirill Melnikov
TTP KIT
April 17, 2024

1 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 $\vec{r} = \infty$ in Richtung von Target 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 sehr gross ist. D.h. für $r = \infty$ sind die Teilchen frei. Die Energie des Teilchens und sein Wellenfunktion ist dann vollständig bekannt

$$\psi_{\text{in}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{1.1}$$

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

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} = \psi_{\text{in}}(\vec{r}) + \psi_{\text{out}}(\vec{r}). \tag{1.2}$$

Die Größe $f(\theta)$ nennt man die Streuamplitude.[1] Wir wählen die z-Achse den einlaufende Impuls entlang, sodass $\vec{k} = k\vec{e}_z$. Dann ist θ in der obigen Gleichung der übliche Polarwinkel.

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

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\partial}\psi - c.c.\right). \tag{1.3}$$

Für die einlaufende Welle ergibt sich

$$\vec{j}_{\text{in}} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}. \tag{1.4}$$

Im Fall der gestreuten Welle müssen wir aufpassen, dass wir die richtige Stromkomponente berechnen. In der Tat ist die Zahl der Teilchen, die in

[1] Im allgemeinen Fall, kann $f(\theta)$ auch von Azimuthalwinkel ϕ abhängig sein.

dem Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ fliegen, durch die folgende Formel gegeben ist

$$\lim_{r\to\infty} \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\mathrm{out}} = \mathrm{d}\Omega \lim_{r\to\infty} r^2\ \vec{e}_r\cdot\vec{j}_{\mathrm{out}}. \tag{1.5}$$

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

$$\vec{j}_{\mathrm{out}}\cdot\vec{e}_r = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*_{\mathrm{out}}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\mathrm{out}} - \frac{\partial\psi^*_{\mathrm{out}}}{\partial r}\psi_{\mathrm{out}}\right) = \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} + \mathcal{O}(1/r^3). \tag{1.6}$$

D.h.

$$\lim_{r\to\infty} \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\mathrm{out}} = \mathrm{d}\Omega\ v|f(\theta)|^2. \tag{1.7}$$

Das Verhältnis von ein- und auslaufenden Strömen ergibt den Wirkungsquerschnitt

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{\lim_{r\to\infty}\mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\mathrm{out}}}{j_{\mathrm{in}}} = \mathrm{d}\Omega|f(\theta)|^2. \tag{1.8}$$

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

$$\sigma = \int \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\,\mathrm{d}\Omega. \tag{1.9}$$

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

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l,m} C_{l,m}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_{l,m}(\theta,\varphi)\frac{u_l(r)}{r}, \tag{1.10}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}^2u_l}{\mathrm{d}r^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l(r) = 0, \tag{1.11}$$

und der Normierungsfaktor $\sim 1/\sqrt{2l+1}$ in Gl. (1.10) 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

$$Y_{l0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta), \tag{1.12}$$

wobei $P_l(\cos\theta)$ Legendrepolynome sind.

Wir können Gl. (1.10) umschreiben ($C_{l,m} \to C_{l,0} \to C_l$)

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_l C_l P_l(\cos\theta) \frac{u_l(r)}{r}. \tag{1.13}$$

Die Legendrepolynome sind orthogonal

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1}. \tag{1.14}$$

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

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta P_l(\cos\theta) e^{ikr\cos\theta} = \frac{2C_l}{2l+1} \frac{u_l(r)}{r}. \tag{1.15}$$

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. (1.15) passiert, weil

$$\lim_{r\to\infty} u_l(r) = \sin(kr - l\pi/2) + \mathcal{O}(1/r). \tag{1.16}$$

Eine gunstige Art das Integral auf der Linke Seite in Gl. (1.15) zu berechnen ist die Entwicklung in $1/r$ aufzubauen. Das können wir mit Hilfe von partieller Integration erreichen. Wir schreiben $\cos\theta = x$ und dann

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x P_l(x) e^{ikrx} = P_l(x) \frac{e^{ikrx}}{ikr}\Bigg|_{-1}^{1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \frac{\mathrm{d}P_l(x)}{\mathrm{d}x} e^{ikrx}. \tag{1.17}$$

Der zweite Term ist $\mathcal{O}(1/r^2)$ (um das zu sehen, sollen wir noch einmal partiell integrieren) und kann deswegen vernachlässigt werden. Wir benutzen dann $P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l$, vergleichen Gleichungen (1.15,1.16,1.17) und erhalten

$$C_l = \frac{(2l+1)\, i^l}{k}. \tag{1.18}$$

Die Entwicklung der ebenen Welle in Kugelflächenfunktionen ist dann

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_l \frac{(2l+1)i^l}{kr} P_l(\cos\theta) u_l(r). \tag{1.19}$$

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

$$\begin{aligned} \lim_{r\to\infty} e^{ikz} \to \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l P_l(\cos\theta)}{2ikr} \left\{ e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)} \right\} \\ = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l P_l(\cos\theta)}{2ikr} \left\{ (-i)^l e^{ikr} - (i)^l e^{-ikr} \right\} \\ = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)\ P_l(\cos\theta)}{2ikr} \left\{ e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right\}. \end{aligned} \tag{1.20}$$

Wir konzentrieren uns jetzt auf die l-Summen. Wir benutzen noch einmal die Gleichungen $P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l$ und schreiben beide Summen im Gl. (1.20) um als

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) P_l(\cos\theta_\pm), \tag{1.21}$$

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

Die Legendrepolynome erfüllen die Vollständigkeitsbedingung

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(x) P_l(x') = 2\delta(x - x'). \tag{1.22}$$

D.h., dass

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) P_l(\cos\theta_\pm) = 2\delta(\cos\theta - \cos\theta_\pm), \tag{1.23}$$

sodass

$$\lim_{r\to\infty} e^{ikr\cos\theta} = \frac{1}{ikr}\left(\delta(1-\cos\theta)e^{ikr} - \delta(1+\cos\theta)e^{-ikr}\right) + \mathcal{O}(r^{-2}). \quad (1.24)$$

Weil bei $r \to \infty$ $\psi(\vec{r}) = \psi_{\rm in}(\vec{r}) + \psi_{\rm out}(\vec{r})$ ist, bekommen wir drei Terme, wenn wir den Strom berechnen. Wir schreiben

$$\vec{j} = \vec{j}_{\rm in} + \vec{j}_{\rm out} + \vec{j}_{\rm int}, \quad (1.25)$$

wobei, wie wir oben berechnet haben,

$$\vec{j}_{\rm in} = v\vec{e}_z, \quad \vec{e}_r \cdot \vec{j}_{\rm out} = v\,\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}. \quad (1.26)$$

Die Formel für "gestreuten" Ström gilt nur bei $r = \infty$.

Die Interferenz lautet

$$\vec{j}_{\rm int} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*_{\rm in}\,\vec{\partial}\psi_{\rm out} + \psi^*_{\rm out}\,\vec{\partial}\psi_{\rm in} - c.c.\right). \quad (1.27)$$

Wir wollen $\vec{j}_{\rm int}$ für $r \to \infty$ berechnen; dazu benutzen wir in Gl. (1.27) die asymptotische Form der Wellenfunktionen

$$\psi_{\rm in} = \frac{1}{ikr}\left(\delta(1-\cos\theta)e^{ikr} - \delta(1+\cos\theta)e^{-ikr}\right), \quad \psi_{\rm out} = \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}. \quad (1.28)$$

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

$$\lim_{r\to\infty} r^2\,\vec{e}_r \cdot \vec{j}_{\rm int} \quad (1.29)$$

besitzen. D.h., dass wenn wir $\vec{j}_{\rm int}$ in Gl. (1.27) berechnen, müssen wir nur $e^{\pm ikr}$ in Gl. (1.28) nach r ableiten. Wir erhalten

$$r^2\vec{e}_r \cdot \vec{j}_{\rm int} = \frac{i\hbar}{m^2}\left[f(\theta) - f^*(\theta)\right]\delta(1-\cos\theta) = -\frac{2\hbar}{m}\,{\rm Im}\left[f(0)\right]\,\delta(1-\cos\theta). \quad (1.30)$$

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

$$0 = \lim_{r\to\infty}\int d\vec{S}\cdot\vec{j}. \quad (1.31)$$

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

$$\begin{aligned}
&\lim_{r\to\infty} \int \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\text{in}} \sim \int \mathrm{d}\cos\theta\ \cos\theta = 0, \\
&\lim_{r\to\infty} \int \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\text{out}} = v\int \mathrm{d}\Omega |f(\theta)|^2 = v\sigma \qquad (1.32) \\
&\lim_{r\to\infty} \int \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{j}_{\text{int}} = -\frac{4\pi\hbar}{m}\mathrm{Im}\left[f(0)\right].
\end{aligned}$$

Wir erhalten dann das "optische Theorem"

$$0 = v\sigma - \frac{4\pi\hbar}{m}\mathrm{Im}\left[f(0)\right], \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\left[f(0)\right]. \tag{1.33}$$

Das optische Theorem kann verallgemeinert werden. Statt die z-Achse mit dem Impuls des inlaufenden Teilchen immer zu identifizieren, können wir das Setup ohne diese Behauptung betrachten. Dan schreiben wir

$$\lim_{r\to\infty} \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{f(\vec{k}',\vec{k})}{r}e^{ikr}, \tag{1.34}$$

wobei $\vec{k}$ der Impuls inlaufendes Teilchen und $\vec{k}' = |\vec{k}|\vec{r}/r$ der Impuls gestreutes Teilchen sind. Es ist zu merken dass $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ und, falls $\vec{k}||\vec{e}_z$, ist das Skalarprodukt $\vec{k}'\cdot\vec{k}/k^2 = \vec{r}\cdot\vec{e}_z/r = \cos\theta$. In diesem Fall ist die Streuamplitude $f(\vec{k}',\vec{k}) = f(\cos\theta)$, die uns schon bekannt ist.

Die Amplituden $f(\vec{k}',\vec{k})$ erfüllen folgende Gleichung

$$\frac{1}{2i}\left[f(\vec{k}',\vec{k}) - f^*(\vec{k},\vec{k}')\right] = \frac{k}{4\pi}\int \mathrm{dd}\Omega_{\vec{k}''}\ f^*(\vec{k}'',\vec{k}')f(\vec{k}'',\vec{k}). \tag{1.35}$$

Falls wir jetz $\vec{k}' = \vec{k}$ nehmen, erhalten wir aus Gl. (1.35) das optische Theorem.

Wir können mit Hilfe von Gl. (1.35) die so-gennante *Streumatrix* definieren. Die Idee ist folgende. Wir führen den Streuoperator $\hat{T}$ ein, der aus einer ebenen Welle bei $|\vec{r}| = \infty$ eine Menge von gestreuten ebenen Wellen bei $|\vec{r}| = \infty$ mit dem gleichen Betrag von $\vec{k}'$ erzeugt

$$\hat{T}|\vec{k}\rangle = \int \frac{\mathrm{d}\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi}\ |\vec{k}'\rangle\ f(\vec{k}',\vec{k}). \tag{1.36}$$

Die Streuamplitude ist das Matrixelement des Streuoperators

$$\langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle = f(\vec{k}', \vec{k}). \tag{1.37}$$

Das entspricht der Normierung

$$\langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = 4\pi \delta(\vec{n}' - \vec{n}), \tag{1.38}$$

und der Vollständigkeitsbedingung

$$\hat{1} = \int \frac{d\Omega_{\vec{n}'}}{4\pi} |\vec{k}'\rangle\langle\vec{k}'|. \tag{1.39}$$

Alle diese Relationen gelten für $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$.

Wir können dann Gl. (1.35) umschreiben zu

$$\hat{T} - \hat{T}^\dagger = 2ik\, T^\dagger T \tag{1.40}$$

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

$$\hat{S} = 1 + 2ikT \tag{1.41}$$

und finden dass die Gl. (1.40) bedeutet, dass die $\hat{S}$-Matrix unitär ist

$$\hat{S}\,\hat{S}^\dagger = \hat{1}. \tag{1.42}$$

Die Unitarität der Streumatrix entspricht die Wahrscheinlichkeiterhaltung.