

Dreidimensionale quantenmechanische Probleme

Zuerst die Einführung des Drehimpulsoperators als Erzeuger von infinitesimalen Drehungen. Betrachtet man die Linksdrehung eines Objektes (also die aktive Sicht einer Drehung) um die x-Achse:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

für einen infinitesimalen Winkel ϵ , so ergibt das:

$$x' = x, \quad y' = y - \epsilon z, \quad z' = z + \epsilon y.$$

Aus

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}') &= \phi(x', y', z') = \phi(x, y - \epsilon z, z + \epsilon y) \\ &= [1 - \epsilon z \partial_y + \epsilon y \partial_z] \phi(\vec{r}) \\ &= \left(1 + \frac{i}{\hbar} \epsilon l_x\right) \phi(\vec{r}) \end{aligned}$$

folgt der zugehörige Drehimpulsoperator

$$R_x(\epsilon) = 1 + \frac{i}{\hbar} \epsilon l_x$$

$$\begin{aligned} l_x &= i\hbar(z\partial_y - y\partial_z) \\ l_y &= i\hbar(x\partial_z - z\partial_x) \\ l_z &= i\hbar(y\partial_x - x\partial_y) \\ l_+ &= \hbar(z\partial_x + i\partial_y) - (x + iy)\partial_z \\ l_- &= i\hbar(z(i\partial_x + \partial_y) - (ix + y)\partial_z) \end{aligned}$$

Wobei l_{\pm} definiert sind als $l_{\pm} = l_x \pm l_y$.

Eine Drehung um einen Winkel ϕ erhält man daraus durch Taylorentwicklung der gedrehten Funktion nach dem Winkel. Man erhält so:

$$R(\phi, \vec{n}) = \exp\left(\phi \frac{i}{\hbar} \vec{n} \cdot \vec{l}_{op}\right)$$

Wobei \vec{n} die Drehachse angibt, um die aktiv nach links gedreht wird. Obwohl eine formale Ähnlichkeit zwischen diesem Drehoperator und der Darstellung einer Drehung durch die Cayley-Klein Parameter:

$$Q = \exp(i\vec{n}\vec{\sigma} \cdot (\phi/2))$$

besteht sind dies doch zwei völlig unterschiedliche Dinge. Der oben dargestellte Drehimpulsoperator wirkt auf eine Wellenfunktion und ist ein Differentialoperator. Die Matrix Q verwendet man um Matrizen P zu transformieren, die Punkten im 3-dim Raum entsprechen.

Nun zu einigen Kommutatorrelationen:

$$\begin{aligned} [l_x, l_y] &= l_z \text{ und zyklisch} \\ [\vec{l}, \vec{l}^2] &= 0 \\ [l_z, l_{\pm}] &= \pm \hbar l_{\pm} \\ [l_+, l_-] &= 2\hbar l_z \end{aligned}$$

Drehimpulsoperatoren in Kugelkoordinaten

Die Transformation von Kugelkoordinaten in Cartesische Koordinaten ist gegeben durch:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta$$

Die Funktionaldeterminante dieser Transformation:

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \cos \theta \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \sin \phi & \cos \phi \\ \cos \theta & -\sin \theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ r d\theta \\ r \sin \theta d\phi \end{pmatrix}$$

Ein kleiner Einschub darüber, warum diese Transformation zwischen orthonormierten Einheitsvektoren vermittelt: Berechnet man den Maßtensor $D_\phi^T D_\phi$, so ist dieser diagonal $D_\phi^T D_\phi = \text{diag}(1, r^2, r^2 \sin^2 \theta)$. Das bedeutet erstens, daß die drei Basisvektoren $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ senkrecht aufeinander stehen, da der Maßtensor diagonal ist, und daß die Beträge der drei Basisvektoren gegeben sind durch $1, r, r \sin \theta$, da die Matrixelemente des Maßtensors die Skalarprodukte $\langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle$ sind, wobei i, j aus der Menge $\{r, \theta, \phi\}$ sind.

Da die Transformation O zwischen orthonormierten Einheitsvektoren vermittelt ist sie eine Orthogonale Transformation und es gilt:

$$OO^T = 1 \quad O^{-1} = O^T$$

Daher ergibt O^T die Rücktransformation:

$$\begin{pmatrix} dr \\ r d\theta \\ r \sin \theta d\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix}$$

Hieraus kann man die partiellen Ableitungen nach der Kettenregel bestimmen:

$$\partial_x = \frac{\partial r}{\partial x} \partial_r + \frac{\partial \theta}{\partial x} \partial_\theta + \frac{\partial \phi}{\partial x} \partial_\phi$$

Somit erhält man für die Drehimpulsoperatoren deren Darstellung in Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} l_z &= -i\hbar \partial_\phi \\ l_\pm &= \hbar e^{\pm i\phi} (\pm \partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) \\ l_{op}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right) \\ \Delta &= \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r - \frac{(l_{op}^2/\hbar^2)}{r^2} = \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{(l_{op}/\hbar)^2}{r^2} \end{aligned}$$

Dabei ergab sich l_{op}^2 aus der Darstellung $l_{op}^2 = l_+ l_- + l_z^2 - \hbar l_z$.

Eigenfunktionen

Im Zusammenhang mit der Laplacegleichung sind die Kugelfunktionen Y_{lm} als Lösungen des Eigenwertproblems für den sphärischen Laplaceoperator $-l_{op}^2/\hbar^2$ bekannt:

$$l_{op}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

Wobei die Kugelfunktionen Y_{lm} definiert sind durch:

$$Y_l^m := (-1)^m \sqrt{\frac{l+1/2}{2\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad -l \leq m \leq l$$

$$P_l^m(z) = \frac{(1-z^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2-1)^l \quad \text{für } m \geq 0$$

$$P_l^{-m}(z) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(z)$$

Weiter kann man leicht zeigen, daß gilt:

$$l_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$$

d.h. die Kugelfunktionen sind simultane Eigenfunktionen zum Quadrat des Drehimpulsoperators und zum z-Drehimpulsoperator! Die Kugelfunktionen bilden ein vONS. Damit kann man nun das Zentralkraftproblem lösen.

Zentralkraftproblem

Den Hamiltonoperator des Zentralkraftproblems in Schwerpunktsystem

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r)$$

schreiben wir in Kugelkoordinaten um:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\right) + \frac{l_{op}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

Im betrachteten System sind alle Richtungen gleichberechtigt. Dies wird als Isotropie bezeichnet. Diese Isotropie wird durch die Eigenschaft des Hamilton-Operators

$$[H, l_{op}] = 0 \quad \text{Drehinvarianz}$$

ausgedrückt. Hieraus folgt sofort, daß die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators auch Eigenfunktionen zum Quadrat des Drehimpulsoperators und Eigenfunktionen zum z-Drehimpulsoperator sein müssen. Wir können also den Separationsansatz

$$\varphi(r, \theta, \phi) = \varphi_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

machen. Man erhält so

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E\right] \varphi_l(r) = 0$$

Substituiert man in diese Gleichung $u_l(r) = r\varphi_l(r)$, so gelangt man zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E\right] u_l(r) = 0$$

Schreibt man die Energie E um in $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$, so erhält man die Gleichung:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} - k^2\right] u_l(r) = 0$$

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von φ_l und u_l ergibt sich aus:

$$|\varphi_l(r)|^2 r^2 dr = |u_l|^2 dr$$

ist die Wahrscheinlichkeit des Teilchens sich im Intervall $[r, r + dr]$ aufzuhalten.

Einschub über die sphärische Grundlösung der Wellengleichung

Sieht man sich die freie Wellengleichung an

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \psi = 0$$

und führt bezüglich der Zeit eine Fouriertransformation durch:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int \psi(\vec{x}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

so geht die freie Wellengleichung in die freie Helmholtzgleichung über:

$$(\nabla^2 - \kappa^2)\psi(\vec{x}, \omega) = 0$$

wobei hier $\kappa = -i\omega/c$ und $k = \omega/c$ ist. Löst man diese Gleichung in Kugelkoordinaten, so separiert die Lösung in einen Winkel- und einen Radialanteil

$$\psi(\vec{x}, \omega) = \sum_{l,m} f_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

und der Radialanteil genügt der radialen Differentialgleichung

$$\left[\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_l(r) = 0.$$

Mit der Substitution $u_l(r) = r f_l(r)$ erhalten wir:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) u_l(r) = 0$$

Mit der dimensionslosen Größe $z = kr$ geht diese Gleichung in

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{l(l+1)}{z^2} + 1 \right) u_l(z) = 0$$

über. Dies ist die radiale Differentialgleichung der freien Wellengleichung. Die Lösungen sind weiter unten angegeben. Es sind die sphärische Besselfunktionen. Nun ist in der Quantenmechanik die freie zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi = E \psi \quad \Rightarrow \quad (\nabla^2 + k^2) \psi = 0 \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E$$

von der selben Gestalt wie die freie Helmholtzgleichung, so daß dessen Lösungen dieselben sind.

Verhalten am Ursprung

Bevor wir spezielle Potentiale betrachten wollen wir uns das Verhalten der Lösung für $r \rightarrow 0$ und $r \rightarrow \infty$ ansehen. Wir beschränken uns auf Potentiale für die gilt:

$$r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$$

Dann dominiert der Zentrifugalterm für $r \rightarrow 0$, also

$$u_l'' - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l \approx 0$$

Die Lösung dieser Gleichung ist von der Form $u_l = c \cdot r^k$ mit

$$k(k-1) - l(l+1) = 0, \quad \Rightarrow \quad k = \begin{cases} l+1 \\ -l \end{cases}$$

Der obere Fall heißt reguläre Lösung, der untere irreguläre. Die irreguläre kommt für den Bereich des Ursprungs nicht in Frage, da sonst dort die kinetische Energie $\langle E_{kin} \rangle$ unendlich groß wird. Die reguläre Lösung geht für $r \rightarrow 0$ wie $|u_l|^2 \propto r^{2l+2}$ gegen null. Der Faktor r^{2l} wird durch den Zentrifugalterm verursacht, der die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ursprung unterdrückt.

Speziell kurzreichweitige Potentiale, die der Bedingung

$$r V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

genügen. Für diese erhalten wir die Gleichung

$$u'' + k^2 \approx 0$$

dessen Lösung durch

$$u \propto \begin{cases} \exp(\pm \kappa r) & \text{für } k^2 < 0 \\ \exp(\pm ikr) & \text{für } k^2 > 0 \end{cases}$$

Dies ist das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion für kurzreichweitige Potentiale.

Kastenpotential

Zuerst betrachten wir den Fall des konstanten Potentials

$$V(r) = V_0$$

In der radialen Gleichung setzen wir

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

ein und erhalten

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) u_l(r) = 0$$

Mit der dimensionslosen Größe $z = kr$ geht diese Gleichung in

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{l(l+1)}{z^2} + 1 \right) u_l(z) = 0$$

über. Diese Gleichung hat die reguläre Lösung

$$u_l(z) = z j_l(z) \equiv z^{l+1} \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}$$

und die irreguläre Lösung

$$u_l(z) = z y_l(z) \equiv -z^{l+1} \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}$$

Diese Funktionen heißen sphärische Besselfunktionen. Die Bezeichnung regulär und irregulär kennzeichnen ihr Verhalten am Ursprung:

$$j_l \xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{2^l l! z^l}{(2l+1)!}$$

$$y_l \xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{-(2l)!}{2^l l! z^{l+1}}$$

In Analogie zu den Linearkombinationen $\exp(\pm iz) = \cos z \pm i \sin z$ führt man die sphärischen Hankelfunktionen $h_l^{(1)}$ und $h_l^{(2)}$ ein:

$$h_l^{(1)} = j_l + i y_l \quad h_l^{(2)} = j_l - i y_l = h_l^{(1)*}$$

Für das asymptotische Verhalten gilt:

$$h_l^{(1)}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (-i)^{l+1} \frac{\exp(ikr)}{kr} = -i \frac{\exp(i(kr - l\pi/2))}{kr}$$

und

$$j_l(kr) = \frac{h_l^{(1)} + h_l^{(2)}}{2} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr}$$

Gebundene Zustände im Kasten

Die gebundenen Zustände im Kasten können in FLIESSBACH *Quantenmechanik* auf S.189 nachgeschlagen werden. Hier sind keine exakten Lösungen der Quantenzahlen k_{nl} mehr möglich.

Entwicklung der Ebenenwelle nach Kugelfunktionen

Da

$$\varphi = \begin{cases} \exp(i\vec{k}\vec{r}) \\ j_l(kr)Y_{lm}(\theta, \phi) \text{ und } y_l(kr)Y_{lm}(\theta, \phi) \end{cases}$$

Lösungen zur selben Differentialgleichung in unterschiedlichen Koordinatensystemen ausgedrückt sind, muß sich jede spezielle Lösung als Linearkombination der jeweils anderen Lösungsform ausdrücken lassen.

Dazu verwenden wir die Vollständigkeitsrelation der Kugelfunktionen:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \phi') Y_{lm}(\theta, \phi) = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\phi' - \phi)$$

Mit Hilfe dieser Relation schreiben wir die ebene Welle um:

$$\begin{aligned} e^{i\vec{k}\vec{r}} &= e^{ikr \cos \theta} \\ &= \int_{-1}^1 d \cos \theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\phi' - \phi) \exp(ikr \cos \theta') \\ &= \sum_{l,m} Y_{lm}^*(\theta, \phi) \int_{-1}^1 d \cos \theta' \int_0^{2\pi} d\phi' Y_{lm}(\theta', \phi') \exp(ikr \cos \theta') \end{aligned}$$

mit $\int d\phi' \exp(im\phi') = 2\pi\delta_{m0}$ und $Y_{l0} = \sqrt{(2l+1)/4\pi} P_l$ erhält man:

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_l \frac{2l+1}{2} P_l(\cos \theta) I_l(r)$$

mit

$$I_l(r) = \int_{-1}^1 d \cos \theta' P_l(\cos \theta') \exp(ikr \cos \theta')$$

Setzen wir nun diese Lösung wieder in die DGL ein, so erhalten wir

$$\sum \frac{2l+1}{2} P_l(\cos \theta) \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] I_l(r) = 0$$

Da die Legendre-Polynome orthogonal sind, so ist diese Entwicklung nach den P_l eindeutig ???... Also müssen die I_l die Radialgleichung einzeln lösen, d.h. $I_l(r) = c j_l(kr)$. Die Konstante kann zu $2i^l$ bestimmt werden.

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) j_l(kr)$$

Streuung an einem Potential

Der einfallende Teilchenstrahl wird durch die ebene Welle

$$\varphi_{ein} = A \exp(ikz)$$

beschrieben. Dabei ist $|A|^2$ die (Wahrscheinlichkeits-) Dichte der Teilchen pro dz Einheit im einfallenden Strahl. Die Stromdichte berechnet sich wie folgt: In der klassischen Mechanik ist die Stromdichte j gegeben durch

$$j = \rho \cdot \vec{v} = \frac{1}{m} \rho \vec{p}$$

Der Übergang zur Quantenmechanik erfolgt durch die kanonische Quantisierung:

$$\rho \rightarrow \hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad p \rightarrow \hat{p}$$

Da es hier auf die Reihenfolge der beiden Operatoren ankommt muß dieser Ausdruck noch symmetrisiert werden, so daß man schließlich:

$$\hat{j} = \frac{1}{m} \frac{1}{2} (\hat{p}\hat{\rho} + \hat{\rho}\hat{p}) = \frac{1}{m} \frac{1}{2} (\hat{p}|\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi|\hat{p}) = \frac{1}{m} \frac{1}{2} (|\hat{p}\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\hat{p}\psi|)$$

erhält, wobei bei der letzten Umformung die Hermitezität des Operators \hat{p} ausgenutzt wurde. Wendet man diesen Operator auf die Einfallende Welle an, so erhält man:

$$\vec{j}_{ein} = \hat{j}\varphi_{ein} = \frac{1}{m} \frac{1}{2} (|\hat{p}\varphi\rangle\langle\varphi| + |\varphi\rangle\langle\hat{p}\varphi|) = \frac{1}{m} \frac{1}{2} (\hbar\vec{k}|\varphi\rangle\langle\varphi| + \hbar\vec{k}|\varphi\rangle\langle\varphi|) = \frac{\hbar\vec{k}}{m} |A|^2$$

Wobei ich in der letzten Zeile in die Ortsdarstellung gewechselt bin. Jede Lösung der Schrödingergleichung kann im Bereich verschwindenden Potentials aus den Funktionen $h_l^{(1)} Y_{lm}$ und $h_l^{(2)} Y_{lm}$ aufgebaut werden. Asymptotisch gilt

$$h_l^{(1)}(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (-i)^{l+1} \frac{\exp(ikr)}{kr} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

und $h_l^{(2)} \propto -\exp(-ikr)$. Daher entspricht $h_l^{(1)}$ einer einlaufenden Welle und $h_l^{(2)}$ einer auslaufenden Welle (was man auch am Vorzeichen der Stromdichten erkennen kann, die für $h_l^{(1)}$ positiv und für $h_l^{(2)}$ negativ ist). Da die gestreuten Teilchen von ihrem Streuzentrum aus nur nach außen laufen kommt für deren Beschreibung nur $h_l^{(1)}(kr) Y_{lm}(\theta, \phi)$ in Frage. Die asymptotische Streuwelle φ_{str} kann daher als Überlagerung der obigen asymptotischen Funktionen geschrieben werden:

$$\varphi_{str} = A f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (r \rightarrow \infty)$$

k ändert sich hierbei zwischen einlaufender und auslaufender Welle nicht, da wir uns im Schwerpunktsystem befinden. Den Faktor A haben wir aus der Streuamplitude $f(\theta, \phi)$ herausgezogen um später vereinfachen zu können. Der Betrag der Stromdichte der gestreuten Welle ergibt sich also zu:

$$j_{str} = \frac{\hbar k}{m} |\varphi_{str}|^2 = \frac{|f(\theta, \phi)|^2 \hbar k}{r^2} |A|^2$$

Die Versuchsanordnung impliziert, daß die gesuchte Lösung asymptotisch aus den beiden Anteilen φ_{ein} und φ_{str} aufgebaut ist.

$$\varphi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A (\exp(ikz) + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r})$$

Für radialsymmetrisches Potential ist die Versuchsanordnung symmetrisch bezüglich Drehungen um die z -Achse, so daß f nur noch von θ abhängen wird. Für das Flächenelement $r^2 d\Omega$ führt j_{str} zum Teilchenstrom

$$\frac{\text{gestreute Teilchen}}{\text{Zeit}} = j_{str} r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 |f(\theta)|^2 d\Omega$$

Das Verhältnis $j_{str}r^2/j_{ein}$ bezeichnen wir als *differentiellen Wirkungsquerschnitt*:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

Bei der Stromberechnung der des Stromes, der in einem Detektor gemessen wird gibt es Interferenzen zwischen der einlaufenden und der auslaufenden Stromdichte. Man kann jedoch zeigen, daß sie für $r \rightarrow \infty$ keine Rolle mehr spielen.

Der (totale) Wirkungsquerschnitt σ gibt die effektive Fläche an, an der die Teilchen gestreut werden.

Partialwellenzerlegung

Bei der Streuung an einem sphärischen Potential ist der Drehimpuls erhalten. Es ist daher sinnvoll, die Wellenfunktionen nach Drehimpulsen zu zerlegen. Die einzelnen Partialwellen sind dann voneinander unabhängig. Bei niedriger Streuenergie tragen oft nur wenige Partialwellen zum Wirkungsquerschnitt bei. Von nun an setzen wir $A = 1$, da diese Konstante aus allen interessanten Größen herausfällt.

Da die Wellenfunktion die freie Wellengleichung für $r > R$ (R die Reichweite des Potentials) erfüllen muß ist die Streulösung darstellbar als???:

$$\varphi_{str} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} h_l^{(1)}(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2} a_l h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \theta)$$

Der letzte Schritt ist nur zulässig für sphärisch symmetrische Potentiale. φ setzt sich aber aus einlaufender ebener Welle und auslaufender Welle zusammen, so daß man für φ erhält:

$$\varphi(r) = i^l(2l+1) \left(j_l(kr) + \frac{a_l}{2} h_l^{(1)}(kr) \right) P_l(\cos \theta) \quad (r > R)$$

Für $r \rightarrow \infty$ gilt:

$$h_l^{(1)}(kr) \rightarrow -i \frac{\exp[i(kr - l\pi/2)]}{kr} \quad j_l(kr) \rightarrow \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr}$$

Setzt man dies in obige Gleichung ein erhält man die asymptotische Lösung:

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1) \left(\frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + \frac{a_l}{2} (-i) \frac{\exp[i(kr - l\pi/2)]}{kr} \right) P_l(\cos \theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2ikr} ((1 + a_l) \exp[i(kr - l\pi/2)] - \exp[-i(kr - l\pi/2)]) P_l(\cos \theta) \end{aligned}$$

Die Streumatrix $S_{l'l}$ ist definiert als Quotient aus auslaufender Amplitude mit Drehimpuls l' durch einlaufender Amplitude mit Drehimpuls l . Da wir hier einen Prozess mit Drehimpulserhaltung betrachten hat die Matrix S nur Diagonalelemente

$$S_l = 1 + a_l$$

Außerdem folgt aus der Drehimpulserhaltung, daß in jeder einzelnen Partialwelle der einlaufende Strom gleich dem auslaufenden Strom sein muß, d.h.

$$\begin{aligned} |j_{ein}| &= \frac{\hbar k}{m} |\varphi_{ein}|^2 = |j_{aus}| = \frac{\hbar k}{m} |\varphi_{aus}|^2 \\ \Rightarrow |\exp[-i(kr - l\pi/2)]| &= |(1 + a_l) \exp[i(kr - l\pi/2)]| \quad \Rightarrow |S_l| = 1 \end{aligned}$$

oder

$$S_l = \exp(2i\delta_l(k)) \quad \text{mit} \quad -\frac{\pi}{2} < \delta_l < \frac{\pi}{2}$$

mit der reellen Streuphase δ_l .

Für $r \rightarrow \infty$ gilt also nun, was wir oben schon festgestellt haben:

$$\varphi_{str} = f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

und die Darstellung der Streulösung als:

$$\varphi_{str} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2} a_l h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2} a_l \frac{1}{i^{l+1}} \frac{\exp(ikr)}{r} P_l(\cos \theta)$$

Also kann die Streuamplitude $f(\theta)$ geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_l) \sin(\delta_l) P_l(\cos \theta) \end{aligned}$$

Mit Hilfe von

$$\int_{-1}^1 dx P_{l'}(x) P_l(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{l'l}$$

erhält man für den Wirkungsquerschnitt σ :

$$\sigma = 2\pi \int_{-1}^1 d \cos \theta |f(\theta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Außerdem kann durch Einsetzen von $P_l(1) = 1$ sofort gezeigt werden, daß das optische Theorem gilt:

$$\Im m f(\theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma$$

Klassisch entspricht der Drehimpuls $l\hbar$ einem Stoßparameter $b = l\hbar/p$ wobei $p = \hbar k$ der Impuls ist. Bei einem Potential der endlichen Reichweite R werden Teilchen mit $b > R$ nicht mehr gestreut. Dies bedeutet quantenmechanisch, daß nur die Partialwellen mit

$$l \leq l_0 \approx kR$$

zum Wirkungsquerschnitt beitragen. Die Vernachlässigung der höheren Partialwellen bedeutet

$$\delta_l \approx 0 \text{ für } l - l_0 \gg 1$$

Für hinreichend niedrige Energien kann die Berechnung einiger weniger Streuphasen genügen; für $kR \ll 1$ rägt nur die Partialwelle mit $l = 0$ bei.

Für ein Potential endlicher Reichweite R und für $l_0 \gg 1$ können wir eine obere Grenze σ_{max} für den totalen Wirkungsquerschnitt angeben:

$$\sigma \leq \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) = \frac{4\pi}{k^2} (l_0 + 1)^2 \approx 4\pi \frac{l_0^2}{k^2} \approx 4\pi R^2 = \sigma_{max} = 4\sigma_{geom}$$

Für viele Potentiale endlicher Reichweite R kommt der Hauptbeitrag zum differentiellen Wirkungsquerschnitt vom Drehimpuls l_0 . Dies liegt an dem Gewichtsfaktor $2l+1$ in den l -Summen. Dieser Faktor ist eine Folge davon, daß die Ringfläche, die dem Drehimpuls $(l \pm 1/2)\hbar$ im einfallenden Strahl entspricht, immer größer wird.

Wenn der Drehimpuls l_0 den dominierenden Beitrag ergibt, dann ist die Winkelverteilung näherungsweise druch

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto [P_{l_0}(\cos\theta)]^2$$

gegeben. Zu dem angeführten Grund für eine mögliche Dominanz von l_0 kommt noch hinzu, daß die Partialwellen mit kleinerem l oft absorbiert werden und dann nicht zum (hier betrachteten) elastischen Wirkungsquerschnitt beitragen.

Streuung an einer harten Kugel

Das Vorgehen sieht nun folgendermaßen aus: Man löst die Schrödingergleichung im Bereich des Potentials. Außerhalb des Potentials muß die Lösung der Lösung für freie Teilchen entsprechen. Die Streuphasen δ_l ergeben sich dann aus der Anschlußbedingung beider Lösungen.

Wenn nun das Potential auch noch sphärisch symmetrisch ist, so müssen, da die gesamte Anordnung Drehsymmetrisch um die z-Achse ist, die Lösungen von der Form:

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos\theta)$$

sein.

Für die gestreute Lösung im Bereich außerhalb des Potentials setzt man für die Lösung auslaufende Kugelwellen an:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} h_l^{(1)}(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2} a_l h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos\theta)$$

Die Gesamte Lösung für den Bereich außerhalb des Potentials ist dann die Superposition der einlaufenden ebenen Welle in z-Richtung und dieser auslaufenden Kugelwelle, wie oben gezeigt.

$$\begin{aligned} \frac{u_l(r)}{r} &= i^l (2l+1) (j_l + a_l h_l^{(1)}) = i^l \frac{2l+1}{2} [(a_l + 1) h_l^{(1)} + h_l^{(2)}] \\ &= i^l \frac{2l+1}{2} \exp(i\delta_l) [\exp(i\delta_l) h_l^{(1)} + \exp(-i\delta_l) h_l^{(2)}] \\ &= i^l (2l+1) \exp(i\delta_l) [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l y_l(kr)] \end{aligned}$$

Die Anschlußbedingung läßt sich also auf den Teil $u_l(r)$ abwälzen. Für die harte Kugel mit

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & (r \leq R) \\ 0 & (r > R) \end{cases}$$

ist u_l gegeben durch:

$$\frac{u_l(r)}{r} = A \cdot \begin{cases} 0 & (r \leq R) \\ \cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l y_l(kr) & (r > R) \end{cases}$$

Da u_l im Anschlußbereich stetig sein muß sind die Streuphasen als Funktion von k gegeben durch:

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(kR)}{y_l(kR)}.$$

Zum Schluß sei noch erwähnt, daß der Wirkungsquerschnitt bei bestimmten Energien vollständig verschwinden kann. Dieser quantenmechanische Effekt, der klassisch nicht zu verstehen ist, heißt RAMSAUER-EFFEKT. Ramsauer entdeckte 1921, daß der Wirkungsquerschnitt für die Streuung langsamer Elektronen ($E \sim 0,7\text{eV}$) an Edelgasatomen ungewöhnlich klein ist. Die Edelgasatome sind dadurch ausgezeichnet, daß ihr Wechselwirkungspotential mit Elektronen mit dem Abstand besonders schnell abfällt. Daher kann hierfür das Modell des Potentialkastens mit endlicher Reichweite verwendet werden.

Klassischer Wirkungsquerschnitt

Betrachtet man die Flugbahn eines Teilchens als Flächenabbildung, so gelangt man zum Begriff des (differenziellen) Wirkungsquerschnitts. Ausgangssituation ist ein Streuexperiment, bei dem ein Teilchenstrahl (idealisiert) aus dem unendlichen, parallel zur z-Achse auf ein Target geschossen wird. Nachdem der Streuprozess beendet ist wird jedes Teilchen asymptotisch in eine bestimmte Raumrichtung ins unendliche weglaufen. Betrachtet man eine Ebene parallel zur x-y-Ebene, die jedes einfallende Teilchen im negativ unendlichen z-Bereich durchstößt, so können jedem Teilchen die Polarkoordinaten b, ψ zugeordnet werden, wobei b den Abstand des Teilchens von der z-Achse und ψ den dazugehörigen Polarwinkel bezeichnet. Dann sieht man sich den ausfallenden Strahl an, wo dieser im (idealisiert) unendlichen eine Kugel mit Radius $R \rightarrow \infty$ durchstößt. So hat man erneut zwei Koordinaten, die sphärischen Winkel θ , und ϕ . Also vermittelt der Teilchenstrahl zwischen den Ebenen koordinaten b, ψ und den Kugelflächenkoordinaten θ, ϕ . Diese Abbildung nenne ich $f : E^2 \rightarrow S^2$. Dabei war es oben nötig den Radius der Kugel gegen unendlich gehen zu lassen, um den konstanten Abstand vom Ursprung der Teilchentrajektorie gegen null gehen zu lassen. Nun ist jedem Punkt der Einfallsebene ein Punkt auf der Sphäre zugeordnet. Diese Abbildung wird aber nicht immer eindeutig umkehrbar sein. Meist wird sie nur lokal umkehrbar sein. Bezeichnen wir also die Urbildmenge einer Umgebung V von \vec{x} (einem Punkt auf der Sphäre) mit $\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_N$ mit deren Umgebungen U_k :

$$f(\vec{y}_k) = \vec{x}; \quad f[U_k] = V.$$

Auf U_k jedoch sei f eindeutig umkehrbar: f_k^{-1} :

$$f^{-1}[V] = \bigcup_1^N U_k; \quad U_k \cap U_l = \emptyset \text{ für } k \neq l$$

Wobei die Umkehrung gegeben ist durch:

$$b = b_k(\theta, \phi), \quad \psi = \psi_k(\theta, \phi), \quad k = 1, \dots, N$$

Als Raumwinkel Ω bezeichnet man eine Fläche auf einer Kugel mit Radius R dividiert durch R^2 . Der Flächeninhalt von U_k ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} F(U_k) &= \int \int_{U_k} d(y^1, y^2) = \int \int b_k db_k d\psi \\ &= \int \int_V b_k \left| \frac{\partial(b_k, \psi_k)}{\partial(\theta, \phi)} \right| d\theta d\phi \\ &= \int \int_{\Omega} b_k \left| \frac{\partial(b_k, \psi_k)}{\partial(\theta, \phi)} \right| \frac{1}{\sin \theta} d\Omega \end{aligned}$$

Nun definiert man den differentiellen Wirkungsquerschnitt als:

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \sum_{k=1}^N \frac{b_k(\theta, \phi)}{\sin \theta} \left| \frac{\partial(b_k, \psi_k)}{\partial(\theta, \phi)} \right|$$

Und den (totalen) Wirkungsquerschnitt als:

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

Anschaulich haben diese Größen folgende Bedeutung: Der totale Wirkungsquerschnitt gibt die Fläche des Strahls an, der an der Streuung teilnimmt. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist dagegen ein Umrechnungsfaktor von Raumwinkelelement zu Fläche in der x-y-Ebene.

Handelt es sich nun um eine Streuung im Zentralpotential, so ist die gesamte Versuchsanordnung rotationssymmetrisch um die z-Achse, und der differentielle Wirkungsquerschnitt (DWQ) kann nur noch von θ abhängen. Somit erhält man:

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \sum_{k=1}^N \frac{b_k(\theta)}{\sin\theta} \left| \frac{db_k}{d\theta} \right|$$

Ein wichtiger Spezialfall hiervon ist die Rutherford-Streuung im Coulomb-Potential:

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}.$$

Es ergibt sich

$$b^2 = \left(\frac{\alpha}{2E} \right)^2 \frac{\cos^2 \theta/2}{\sin^2 \theta/2}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\alpha}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta/2}$$

Experimentelle Bestimmung des differentiellen Wirkungsquerschnitts

Um Schreibarbeit zu sparen bezeichnet in diesem Abschnitt $\sigma(\Omega)$ den differentiellen Wirkungsquerschnitt.

Die experimentelle Situation besteht aus einem einfallenden Teilchenstrahl mit der homogenen Stromdichte \vec{j}_{ein} und einem Detektor, der um das Streuzentrum herum die Winkelverteilung der gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit $\Sigma(V_R)$ mißt. Belege also der Detektor eine Fläche V_R im Abstand R vom Streuzentrum. Dieser Fläche entspricht ein Raumwinkelanteil von $\Delta\Omega = V_R/R^2$. Dieser Raumwinkelanteil entspricht im einfallenden Strahl einer Fläche von $F(f^{-1}(\Delta\Omega))$:

$$F(f^{-1}(\Delta\Omega)) = \int_{\Delta\Omega} \sigma(\Omega) d\Omega = \sigma_0 \Delta\Omega$$

Wobei die letzte Umformung eine Folge des Mittelwertsatzes ist. Also entspricht diese Fläche einer Teilchenzahl pro Zeiteinheit von

$$\Sigma(F(f^{-1}(\Delta\Omega))) = j_{ein} \cdot \sigma_0 \Delta\Omega$$

und die gesamte Gleichung liest sich wie folgt:

$$\Sigma(V_R) = \Sigma(F(f^{-1}(\Delta\Omega))) \Rightarrow \Sigma(V_R) = j_{ein} \cdot \sigma_0 \Delta\Omega \Rightarrow \sigma_0(\Omega) = \frac{\Sigma(V_R)}{j_{ein} \Delta\Omega}$$

Der Grenzübergang $\Delta\Omega \rightarrow 0$

$$\lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{\Sigma(V_R)}{\Delta\Omega} = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{\Sigma(V_R) R^2}{R^2 \Delta\Omega} = \lim_{V_R \rightarrow 0} \frac{\Sigma(V_R) R^2}{V_R} = j_{str} R^2$$

führt zu

$$\sigma(\Omega) = \frac{j_{str} R^2}{j_{ein}},$$

was der Definition des quantenmechanischen Wirkungsquerschnitts entspricht!

Bornsche Näherung

Ausgangspunkt für die Bornsche Näherung ist die etwas umgeschriebene zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$(\Delta + k^2)\varphi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})\varphi(\vec{r}).$$

Vergessen wir einen Augenblick lang, daß auf der rechten Seite dieser Gleichung die gesuchte Funktion $\varphi(\vec{r})$ auftaucht, so ist diese Gleichung die inhomogene Helmholtzgleichung mit der formalen Lösung:

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_0(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}')\varphi(\vec{r}')$$

Wobei φ_0 die homogene Lösung, also ebene Wellen bezeichnet.

Setzt man für das Potential $V(\vec{r})$ den Ansatz $V(\vec{r}) = V_0(\vec{r}) + \lambda V_1(\vec{r})$ ein (wobei für unseren Spezialfall $V_0 = 0$ gilt), so wird die erhaltene Lösung $\varphi_\lambda(\vec{r})$ eine Funktion des Parameters λ sein und man kann diese Funktion nach Potenzen von λ entwickeln:

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_0(\vec{r}) + \lambda \varphi_1(\vec{r}) + \lambda^2 \varphi_2(\vec{r}) + \dots$$

Unsere Gleichung nimmt damit die Gestalt

$$(\Delta + k^2)(\varphi_0(\vec{r}) + \lambda \varphi_1(\vec{r}) + \dots) = (V_0 + \lambda V_1)(\varphi_0(\vec{r}) + \lambda \varphi_1(\vec{r}) + \dots)$$

an. Nimmt man z.B. auf beiden Seiten die n-te Ableitung nach λ : ∂_λ^n und läßt $\lambda \rightarrow 0$ gegen null gehen, so erkennt man, daß diese Gleichung nun für jede Ordnung von λ separat gelöst werden kann.

In nullter Ordnung in λ haben wir die Gleichung

$$(\Delta + k^2)\varphi_0 = V_0\varphi_0 = 0,$$

die als Lösung $\varphi_0 = \exp(i\vec{k}\vec{r})$ ebene Wellen hat. Mit dieser Lösung geht man nun in die erste Ordnung

$$(\Delta + k^2)\varphi_1 = V_1\varphi_0 + V_0\varphi_1 = V_1\varphi_0$$

dessen Lösung gegeben ist durch:

$$\varphi_1 = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V_1(\vec{r}') \varphi_0(\vec{r}')$$

wobei für uns $V_1 = 2\mu V(\vec{r})/\hbar^2$ ist. Nun erhalten wir bis zur ersten Ordnung in λ die Lösung:

$$\varphi(\vec{r}) \approx \exp(i\vec{k}\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V_1(\vec{r}') \exp(i\vec{k}\vec{r}')$$

Da wir diese Gleichung zur Bestimmung von Streuquerschnitten verwenden wollen spezialisieren wir $\varphi_0 = \exp(ikz) = \varphi_{ein}$, was eine auf das Target einlaufende ebene Welle darstellt. Den zweiten Summanden identifizieren wir als Überlagerung von Kugelwellen, die vom Target nach außen laufen (in der Tat wären sowohl einlaufende Kugelwellen als auch auslaufende Kugelwellen Lösungen der Gleichung bis zur ersten Ordnung gewesen, aber da uns nur auslaufende Kugelwellen interessieren habe ich auch nur diese angegeben!). Sie hatten wir oben als φ_{str} bezeichnet.

Die Gültigkeitsbedingung für diese Lösung ist, daß der Lösungsterm zur ersten Ordnung klein gegenüber dem der nullten Ordnung ist. Dies kann für Potentiale der endlichen Reichweite R und einer Stärke von der Größe \bar{V} , so daß $|\int dr V| \sim R\bar{V}$, umgeformt werden für hochenergetische Teilchen in

$$|\varphi_{str}| \sim \frac{\mu R \bar{V}}{k \hbar^2} \ll 1, \quad kR \gg 1$$

(und ist praktisch für hochenergetische Teilchen immer erfüllbar). Für niederenergetische Teilchen ergibt sich die Bedingung

$$|\varphi_{str}| \sim \frac{\mu R^2 \bar{V}}{\hbar^2} \ll 1, \quad kR \ll 1$$

was bedeutet, daß das Potential schmal und flach sein muß!

Wirkungsquerschnitt unter Born'scher Näherung

Da wir ein kurzreichweitiges Potential voraussetzen können wir

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} + O(r'^2/r^2)$$

entwickeln und die Exponentialfunktion wird zu:

$$\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|) \approx \exp(ikr) \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}')$$

wobei $\vec{k}' = k\hat{r}$ definiert ist, zeigt also vom Target zum Detektor. Außerdem setzen wir nun $1/|\vec{r} - \vec{r}'| \approx 1/r$ ein und erhalten:

$$\varphi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r}) + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

mit der Streuamplitude

$$f(\theta, \phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\vec{r}') \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{q})$$

wobei $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ gilt. Die Winkel θ, ϕ geben die Richtung von \vec{k}' relativ zu \vec{k} an, also genau so wie wir es erwarten würden, der Winkel zwischen Einfallrichtung und Detektor. Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt gilt somit:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\tilde{V}(\vec{q})|^2$$

Bei gegebener Streuenergie $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ sind die durch das Experiment bestimmbaren Fourierkomponenten $\tilde{V}(\vec{q})$ durch $q \leq 2k$ begrenzt. Damit sind in $V(\vec{r})$ nur Einzelheiten aufgelöst, die größer als

$$\Delta r_{\min} \sim 1/k$$

sind.

Einschub: Die Argumentation könnte hier wie folgt laufen: Man stellt sich ein kleines Objekt in Form einer Gauß'schen Glockenkurve vor

$$f(x) = \exp(-x^2/2a^2),$$

dann ist dessen Fouriertransformierte (hier wird eine andere Konvention der F-Trafo verwendet also oben!)

$$\hat{f}(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{-x^2/2a^2} = a^n \exp(-a^2\xi^2/2)$$

wobei bei $f(x)$ die Standardabweichung um den Ursprung a beträgt und bei $\hat{f}(\xi)$ ist die Standardabweichung mit $1/a$ gegeben. Ist das durch die Streuung zu vermessende Objekt nun von der Größe $\Delta r = a \gg 1$, so ist die Fourier-Transformierte sehr schmal und man muß im Experiment nur bis zu $\xi \approx 1/a \ll 1$ messen, da außerhalb die F-Transformierte sowieso null ist. Also reicht eine Kugel um den Ursprung des Impulsraums mit Radius $1/a$ um das Objekt im Realraum originalgetreu zu rekonstruieren. Ist dagegen $\Delta r = a \ll 1$, so muß man im Impulsraum bis zu Impulsen $\xi \approx 1/a \gg 1$ messen um das Objekt im Realraum zu rekonstruieren. Also ist das Auflösungsvermögen umgekehrt proportional zum Impuls des einfallenden Teilchenstrahls was oben angegeben wurde.

Nun noch etwas genauer betrachtet. Sei $V(\vec{x})$ das zu untersuchende Potential. Gemessen wird aber die Funktion $\chi_{K_n(q_{max})} \cdot \hat{V}(\vec{q}) = \tilde{V}(\vec{q})$. Nun ist die Fouriertransformierte der charakteristischen Funktion der n -dimensionalen Einheitskugel $\chi(K_n(1))$ gegeben durch:

$$\hat{f}(\vec{\xi}) = \frac{J_{n/2}(|\vec{\xi}|)}{|\vec{\xi}|^{n/2}}$$

was für die Spezialfälle $n = 1$ und $n = 3$

$$\begin{aligned} n = 1 : \quad \hat{f}(\vec{\xi}) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin |\vec{\xi}|}{|\vec{\xi}|} \\ n = 3 : \quad \hat{f}(\vec{\xi}) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[\frac{\sin |\vec{\xi}|}{|\vec{\xi}|^3} - \frac{\cos |\vec{\xi}|}{|\vec{\xi}|^2} \right] \end{aligned}$$

Außerdem gilt für $g(\vec{x}) = f(\lambda\vec{x})$

$$\hat{g}(\vec{\xi}) = \frac{1}{|\lambda|^n} \hat{f}\left(\frac{\vec{\xi}}{\lambda}\right)$$

so daß wir nun die Fourierrücktransformation von \tilde{V} unter Verwendung des Faltungstheorems vornehmen können:

$$\bar{F}[\tilde{V}](\vec{x}) = \frac{q_{max}^n}{(2\pi)^{n/2}} \int d\vec{y} V(\vec{x} - \vec{y}) \hat{f}(q_{max}\vec{y})$$

was bedeutet, daß nur noch auf eine im Bereich $\Delta r \sim 1/k$ gemittelte Funktion $V(\vec{x})$ zurückgeschlossen werden kann!

Ende des Einschubs.

Für sphärisch symmetrische Potentiale gilt

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\vec{q}) &= \int d^3r' \exp(-i\vec{q}\vec{r}') \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr' r'^2 \int_{-1}^{+1} d\cos\theta' \exp(-iqr' \cos\theta') V(r') \\ &= 4\pi \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') \frac{\sin(qr')}{qr'} = \tilde{V}(q) \end{aligned}$$

Damit wird der Wirkungsquerschnitt zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\tilde{V}(2k \sin(\theta/2))|^2$$

Für das abgeschirmte Coulombpotential

$$V(r) = \pm \frac{e^2}{r} \exp(-r/r_0)$$

erhalten wir so:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu e^2/\hbar^2}{4k^2 \sin^2(\theta/2) + 1/r_0^2} \right)^2$$