

Streutheorie

Hendrik van Hees

15. Mai 1997

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	1
1 Formale Aspekte der Streutheorie	1
1.1 Møller-Operatoren	4
1.2 Die S-Matrix	8
2 Zeitunabhängige Streutheorie	9
3 Streutheorie in der Ortsdarstellung	12
3.1 Die Lippmann-Schwinger-Gleichung	12
3.2 Energie-Drehimpuls-Eigenfunktionen des freien Teilchens	14
3.3 Die Partialwellenmethode	20
3.4 Der Streuquerschnitt	23
4 Analytizitätseigenschaften der Radialwellenfunktionen	23
4.1 Der $l=0$ -Kanal	23
4.2 Beispiel: $l=0$ -Kanal für sphärisch symmetrische Potentialmulde	29
4.3 Der allgemeine Fall $l > 0$	30
A Das Additionstheorem der Kugelfunktionen	33
Literaturverzeichnis	35

1 Formale Aspekte der Streutheorie

In diesem Abschnitt soll die Quantentheorie der Streuprozesse mit rein formalen Mitteln der Hilbertraumtheorie behandelt werden. Dazu sind einige Bemerkungen mehr mathematischer Art notwendig. Doch betrachten wir zunächst die physikalische Situation.

Ein Streuexperiment besitzt i.a. folgenden groben Aufbau. Es werden Teilchen weit entfernt vom Target beschleunigt und gelangen mit einem durch die Präpariergenauigkeit mit statistischer Streuung versehenem Impuls zum Target, wo sie infolge der Wechselwirkung mit demselben abgelenkt werden. Die eigentliche Messung besteht darin, daß (wieder in großer Entfernung vom Target) mit Hilfe von Detektoren die Anzahl der in eine bestimmte Richtung gestreuten Teilchen ermittelt wird.

Die Streutheorie versucht nun, die Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen, in eine bestimmte Richtung gestreut zu werden, zu bestimmen (und die dafür relevanten Größen zu definieren). Dabei läßt man sich von dem eben kurz skizzierten naiven Bild eines Streuexperimentes leiten: Wir betrachten ein Teilchen. Dieses Teilchen wird weit entfernt vom Target (Streuzentrum) präpariert, d.h. quantenmechanisch, daß zu einer Zeit t_0 ein Anfangszustand festgelegt wird, der sich zunächst (solange die Wechselwirkung des Teilchens mit dem Streuzentrum vernachlässigt werden kann) nach dem freien Hamiltonoperator

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (1)$$

zeitlich entwickelt. Hier und im folgenden beziehen wir uns auf die nichtrelativistische Quantentheorie und das Schrödingerbild. Wir bemerken sogleich, daß dieses Teilchen keine scharfe Energie besitzen kann, weil das Spektrum des Hamiltonoperators eines freien Teilchens kontinuierlich ist. Der Zustand eines Teilchens ist aber ein Hilbertraumvektor, der nicht Eigenvektor zu einem Wert im kontinuierlichen Spektrum sein kann.

Gelangt nun das Teilchen in den Wirkungsbereich des Streuzentrums, entwickelt sich der Zustand nach dem exakten Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}. \quad (2)$$

Entfernt sich das Teilchen wieder weit vom Streuzentrum, befindet sich das Teilchen wieder in einem Zustand, der sich dann wieder nach dem freien Hamiltonoperator entwickelt. Es ist nun nach der Wahrscheinlichkeit gefragt, daß ein Teilchen, das weit vom Streuzentrum entfernt in einem Zustand $|\Psi_{\text{in}}\rangle$ präpariert worden ist, weit entfernt vom Streuzentrum nach der Streuung in einem Zustand $|\Psi_{\text{out}}\rangle$ gefunden wird.

Zur Beantwortung dieser Frage führen wir die operatorwertigen **Greenschen Funktionen** der freien bzw. exakten Schrödingergleichung ein:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H}_0 \right) \mathbf{G}_0^\pm(t) = \mathbf{1}\delta(t); \quad \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H} \right) \mathbf{G}^\pm(t) = \mathbf{1}\delta(t). \quad (3)$$

Der Index 0 zeigt an, daß es sich bei der durch die erste Formel definierte Greensche Funktion um die zur Schrödingergleichung der freien Bewegung handelt. Die Indizes \pm zeigen an, daß es zwei wesentlich verschiedene Lösungen gibt. Das hängt damit zusammen, daß es bei Gleichungen, die eine bestimmte Kausalstruktur („Wellengleichungen“) definieren, wie es für die Schrödingergleichung schon aus physikalischen Gründen der Fall sein muß, stets **retardierte und avancierte Greensche Funktionen** gibt, die je nach Fragestellung benötigt werden. Wir definieren

$$\mathbf{G}^+(t) \propto \Theta(t); \quad \mathbf{G}^-(t) \propto \Theta(-t) \quad (4)$$

und entsprechend für die freien Greenschen Funktionen. Die erste Greensche Funktion ist demgemäß die retardierte, die zweite die avancierte.

Man erkennt sofort, daß die formalen Lösungen von (2) durch

$$\mathbf{G}_0^\pm(t) = \mp i \exp(-i\mathbf{H}_0 t) \Theta(\pm t); \quad \mathbf{G}^\pm(t) = \mp i \exp(-i\mathbf{H}t) \Theta(\pm t) \quad (5)$$

gegeben sind. Das folgt durch direktes Einsetzen in (2) und daraus, daß die Ableitung der Θ -Funktion die δ -Distribution ist.

Mit (2) und (3) folgt

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H} \right) \mathbf{G}_0^\pm(t) = \delta(t) - \mathbf{V} \mathbf{G}_0^\pm(t). \quad (6)$$

Daraus gewinnt man die Integralgleichung unter Anwendung der Greenfunktioneneigenschaften

$$\mathbf{G}_0^\pm(t) = \mathbf{G}^\pm(t) - \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathbf{G}^\pm(t-t') \mathbf{V} \mathbf{G}_0^\pm(t'). \quad (7)$$

Wegen der Θ -Funktion ist der Integrationsbereich tatsächlich nur endlich. Für die retardierte Greenfunktion gilt z.B.

$$\mathbf{G}^+(t) = \mathbf{G}_0^+(t) + \int_0^t dt' \mathbf{G}_0^+(t-t') \mathbf{V} \mathbf{G}^+(t'), \quad (8)$$

d.h. auf der rechten Seite sind nur Zeiten $t' \leq t$ relevant, so daß die retardierte Greenfunktion einer Vorwärtsentwicklung in der Zeit entspricht. Für $t < 0$ ist weiter die rechte Seite 0, was konsistent mit der Tatsache ist, daß es sich um eine Gleichung für die auf der linken Seite stehende retardierte Greenfunktion handelt.

Ein Zustand, der zur Zeit $t = t_0$ bestimmt ist, besitzt die Vorwärtszeitentwicklung:

$$|\Psi, t\rangle = i\mathbf{G}^+(t-t_0) |\Psi, t_0\rangle \quad \text{für } t > t_0, \quad (9)$$

denn für $t > t_0$ stimmt die retardierte Greenfunktion mit dem Zeitentwicklungsoperator überein. Wir definieren jetzt

$$|\Psi_0, t\rangle = i\mathbf{G}_0^+(t-t') |\Psi, t'\rangle. \quad (10)$$

Dies ist ein Zustand, der der freien Schrödingergleichung genügt und zur Zeit t' mit dem exakten Zustand übereinstimmt. Sei nun

$$|\Psi_{\text{in}}, t\rangle = \lim_{t' \rightarrow -\infty} i\mathbf{G}_0^+(t-t') |\Psi, t'\rangle. \quad (11)$$

Das ist die formale Definition des in-Zustandes. Er stimmt in der weit vom Streueignis zurückliegenden Vergangenheit mit dem exakten Zustand überein. Seine Zeitentwicklung wird aber vom freien Hamiltonoperator erzeugt.

Ebenso ist die formale Definition des out-Zustandes durch

$$|\Psi_{\text{out}}, t\rangle = \lim_{t' \rightarrow \infty} (-i)\mathbf{G}_0^-(t-t') |\Psi, t'\rangle \quad (12)$$

gegeben. Es ist ein Zustand, der in der weit vom Streueignis entfernten Zukunft mit dem exakten Zustand übereinstimmt, aber aus einem Zustand entstanden ist, der sich mit dem freien Hamiltonoperator zeitentwickelt. Die Zeitentwicklung des exakten Zustandes kann nach (9) und (10) durch

$$|\Psi^+, t\rangle = \lim_{t' \rightarrow -\infty} i\mathbf{G}^+(t-t') |\Psi_{\text{in}}, t'\rangle, \quad |\Psi^-, t\rangle = \lim_{t' \rightarrow \infty} -i\mathbf{G}^-(t-t') |\Psi_{\text{out}}, t'\rangle \quad (13)$$

beschrieben werden. Dabei ist der erste Zustand durch den asymptotisch freien Anfangszustand, der die Präparation der streuenden Teilchen beschreibt, definiert. Der zweite Zustand hingegen ist die Rückwärtsentwicklung aus einem asymptotische freien Endzustand. Mit (7) folgt

$$\begin{aligned} |\Psi^+, t\rangle &= |\Psi_{\text{in}}, t\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathbf{G}^+(t-t') \mathbf{V} |\Psi_{\text{in}}, t'\rangle, \\ |\Psi^-, t\rangle &= |\Psi_{\text{out}}, t\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathbf{G}^-(t-t') \mathbf{V} |\Psi_{\text{out}}, t'\rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

1.1 Møller-Operatoren

Wir definieren nun einen Operator, der den in-Zustand zu jedem Zeitpunkt in den exakten aus ihm durch die Zeitentwicklung nach dem vollen Hamiltonoperator erzeugten Streuzustand überführt:

$$|\Psi^+, t\rangle = \Omega^{(+)} |\Psi_{\text{in}}, t\rangle. \quad (15)$$

Mit (14) folgt

$$|\Psi^+, t\rangle = |\Psi_{\text{in}}, t\rangle + \int_{-\infty}^t dt' \mathbf{G}^+(t-t') \mathbf{V} |\Psi_{\text{in}}, t'\rangle. \quad (16)$$

Für $t > t'$ ist hingegen

$$|\Psi_{\text{in}}, t'\rangle = -i \mathbf{G}_0^-(t'-t) |\Psi_{\text{in}}, t\rangle \quad (17)$$

und somit

$$|\Psi^+, t\rangle = |\Psi_{\text{in}}, t\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' \mathbf{G}^+(t-t') \mathbf{V} \mathbf{G}_0^-(t'-t) |\Psi_{\text{in}}, t\rangle. \quad (18)$$

Daraus folgt, daß

$$\Omega^{(+)} = 1 - i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathbf{G}^+(t-t') \mathbf{V} \mathbf{G}_0^-(t'-t) = 1 - i \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \mathbf{G}^+(-t'') \mathbf{V} \mathbf{G}_0^-(t'') \quad (19)$$

ist. Dabei haben wir t in der oberen Integrationsgrenze durch ∞ ersetzt, was wegen der durch die Θ -Funktionen bestimmten Trägereigenschaften von G^+ erlaubt ist und $t'' = t' - t$ substituiert. Aus der letzten Form wird deutlich, daß der **Møller-Operator** $\Omega^{(+)}$ zeitunabhängig ist. Mit

$$\mathbf{K}^{(+)} := -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathbf{G}^+(-t') \mathbf{V} \mathbf{G}^-(t') \quad (20)$$

ist

$$\Omega^{(+)} = 1 + \mathbf{K}^{(+)}. \quad (21)$$

Aus (5) folgt, daß sich (20) durch

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^{(+)} &= -i \int_{-\infty}^0 dt \exp(i\mathbf{H}t) \mathbf{V} \exp(-i\mathbf{H}_0 t) = - \int_{-\infty}^0 dt \frac{d}{dt} [\exp(i\mathbf{H}t) \exp(-i\mathbf{H}_0 t)] \\ \Rightarrow \mathbf{K}^{(+)} &= -1 + \lim_{t \rightarrow -\infty} \mathbf{G}^+(-t) \mathbf{G}_0^-(t) \end{aligned} \quad (22)$$

ausdrücken läßt und folglich

$$\Omega^{(+)} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \mathbf{G}^+(-t) \mathbf{G}_0^-(t) \quad (23)$$

ist. Genauso definiert man

$$\mathbf{\Omega}^{(-)} = 1 + \mathbf{K}^{(-)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \exp(i\mathbf{H}t) \exp(-i\mathbf{H}_0t) \quad (24)$$

mit der Eigenschaft

$$|\Psi^-, t\rangle = \mathbf{\Omega}^{(-)} |\Psi_{\text{out}}, t\rangle. \quad (25)$$

Wir zeigen jetzt, daß sich die Mølleroperatoren mittels des Formalismus des „adiabatic switching“ berechnen lassen:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega}^{(+)} &= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \int_{-\infty}^0 dt \exp(+\epsilon t) \exp(i\mathbf{H}t) \exp(-i\mathbf{H}_0t), \\ \mathbf{\Omega}^{(-)} &= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \int_0^{\infty} dt \exp(-\epsilon t) \exp(i\mathbf{H}t) \exp(-i\mathbf{H}_0t). \end{aligned} \quad (26)$$

Es ist nämlich nur auf diese Art die Konvergenz des Verfahrens gesichert, weil es sich um Konvergenz im Sinne von operatorwertigen Distributionen, also um schwache Konvergenz auf einem dichten Teilraum des Hilbertraumes handelt! Zum Beweis bemerken wir

$$\forall T > 0 : \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \int_0^T dt \exp(-\epsilon t) \exp(i\mathbf{H}t) \exp(-i\mathbf{H}_0t) = 0. \quad (27)$$

Für $T \rightarrow \infty$ folgt aus (24)

$$\forall t > T : \exp(i\mathbf{H}t) \exp(-i\mathbf{H}_0t) \approx \mathbf{\Omega}^{(+)}, \quad (28)$$

und die Behauptung folgt aus

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \int_T^{\infty} \exp(-\epsilon t) dt = 1. \quad (29)$$

Durch hermitesche Adjungation von (19) folgt mit den Definitionen der Greenfunktionen (5)

$$\mathbf{\Omega}^{(+)\dagger} = 1 + i \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathbf{G}^-(t)^\dagger \mathbf{V} \mathbf{G}^+(-t)^\dagger = 1 + i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathbf{G}_0^+(t-t') \mathbf{V} \mathbf{G}^-(t'-t). \quad (30)$$

Anwendung auf den exakten Streuzustand ergibt unter Berücksichtigung, daß sich dieser mit dem exakten Hamiltonoperator zeitentwickelt:

$$\mathbf{\Omega}^{(+)\dagger} |\Psi^+, t\rangle = |\Psi, t\rangle - \int_{-\infty}^t dt' \mathbf{G}^+(t-t') \mathbf{V} |\Psi^+, t'\rangle. \quad (31)$$

Anwendung von (7) zeigt, daß

$$\mathbf{\Omega}^{(+)\dagger} |\Psi^+, t\rangle = |\Psi_{\text{in}}, t\rangle. \quad (32)$$

Durch analoge Rechnungen zeigt man, daß

$$\mathbf{\Omega}^{(-)\dagger} |\Psi^-, t\rangle = |\Psi_{\text{out}}, t\rangle \quad (33)$$

ist. Man hat also mit (15), (32) und (33):

$$\mathbf{\Omega}^{(+)\dagger} \mathbf{\Omega}^{(+)} |\Psi_{\text{in}}, t\rangle = |\Psi_{\text{in}}, t\rangle; \quad \mathbf{\Omega}^{(-)\dagger} \mathbf{\Omega}^{(-)} |\Psi_{\text{out}}, t\rangle = |\Psi_{\text{out}}, t\rangle. \quad (34)$$

Die in- und out-Zustände können aber beliebige Hilbertraumzustände sein, so daß man sich ein beliebiges Orthonormalsystem für diese Zustände eingesetzt denken darf. Damit folgt aber, daß

$$\mathbf{\Omega}^{(+)\dagger}\mathbf{\Omega}^{(+)} = \mathbf{\Omega}^{(-)\dagger}\mathbf{\Omega}^{(-)} = \mathbf{1}. \quad (35)$$

Man darf daraus jedoch nicht schließen, daß die Mølleroperatoren unitär sind. Für die exakten Streuzustände, die definitionsgemäß für $t \rightarrow -\infty$ mit in- bzw. für $t \rightarrow \infty$ mit out-Zuständen übereinstimmen, gilt zwar

$$|\Psi^+, t\rangle = \mathbf{\Omega}^{(+)}\mathbf{\Omega}^{(+)\dagger}|\Psi^+, t\rangle, \quad (36)$$

aber die Streuzustände sind i.a. nicht vollständig, d.h. sie beinhalten kein vollständiges Orthonormalsystem des Hilbertraums. Wir zeigen jetzt, daß die Streuzustände genau dann vollständig sind, wenn es keine gebundenen Zustände gibt, d.h. wenn es im Spektrum des exakten Hamiltonoperators keinen diskreten Teil gibt.

Wegen der Schrödingergleichung und der Zeitunabhängigkeit der Mølleroperatoren gilt nämlich

$$\mathbf{H}\mathbf{\Omega}^{(+)}|\Psi_{\text{in}}, t\rangle = \mathbf{H}|\Psi^+, t\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi^+, t\rangle = i\mathbf{\Omega}^{(+)}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\text{in}}, t\rangle = \mathbf{\Omega}^{(+)}\mathbf{H}_0|\Psi_{\text{in}}, t\rangle. \quad (37)$$

Aus der Vollständigkeit der in-Zustände folgt somit

$$\mathbf{H}\mathbf{\Omega}^{(+)} = \mathbf{\Omega}^{(+)}\mathbf{H}_0. \quad (38)$$

Wir präzisieren jetzt den etwas laxen Umgang der üblichen Quantentheorielehrbücher mit „Eigenzuständen“ zu kontinuierlichen Eigenwerten von Observablen. Besieht man sich nämlich den Umgang mit diesen eigentlich gar nicht existierenden Objekten genauer, erkennt man, daß man nur die Spektraldarstellung von Zuständen nach Eigenwerten hermitescher Operatoren als Zerlegung der 1 schreibt. Bezeichne also etwa $|\Psi_0, E, \alpha\rangle$ einen vollständigen Satz solcher Pseudoeigenzustände des freien Hamiltonoperators. Dann läßt sich die Identität formal durch

$$1 = \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} dE |\Psi_0, E, \alpha\rangle \langle\Psi_0, E, \alpha| \quad (39)$$

schreiben. Dabei haben wir benutzt, daß das Spektrum des freien Hamiltonoperators die positiven reellen Zahlen umfaßt. Es ist klar, daß diese formale Zerlegung der 1 auf Hilbertraumvektoren angewandt eine korrekte Formel liefert, nämlich die Spektralzerlegung des Zustandes nach dem Spektrum von H_0 . Wir wollen die „Eigenzustände“ zu kontinuierlichen Werten des Spektrums stets in dieser Weise verstehen und bezeichnen sie in diesem Sinne als Pseudoeigenzustände.

Es ist vielleicht nützlich, sich diese Betrachtungen in der Ortsdarstellung eines eindimensionalen skalaren Teilchens zu überlegen. Dann ist das Spektrum des Impulsoperators durch die reellen Zahlen gegeben, also durchweg kontinuierlich. Folglich existieren im Hilbertraum, der hier durch den Funktionenraum $L^2(\mathbb{R})$ dargestellt wird, keine Impulseigenvektoren.

Die Einführung der Impulspseudoeigenvektoren in dem obigen Sinne bedeutet nichts anderes als eine bequeme Schreibweise für die Tatsache, daß man von der Ortsdarstellung in die Impulsdarstellung mittels einer Fouriertransformation gelangt. Die Spektralzerlegung ist also in diesem Falle nichts anderes als der unitäre Automorphismus des $L^2(\mathbb{R})$, der den Übergang von der Orts- zur Impulsdarstellung realisiert. Dieses Beispiel zeigt auch, daß der übliche Umgang mit diesen Pseudoeigenvektoren genau diese Interpretation benutzt. Die „Normierung“ derselben auf die δ -Funktion bedeutet nämlich faktisch die Einbeziehung von Distributionen in die Theorie. Diese

sind aber nicht Objekte des Hilbertraums. Vielmehr sind sie im Falle des $L^2(R)$ als Elemente des Dualraums auf einer dichten Untermenge des L^2 , dem den Distributionen zugrundegelegten Testfunktionenraum, definiert. Es ist auch klar, daß die δ -Distribution kein stetiges Funktional auf dem vollen Hilbertraum sein kann, weil der Auswertemorphismus auf L^2 noch nicht einmal eine vernünftige Definition besitzt. Die Fouriertransformation ist zunächst auch als Automorphismus auf dem Testfunktionenraum definiert und läßt dann die unitäre Fortsetzung auf den vollen Hilbertraum zu.

Nach diesem Abstecher in die Funktionalanalysis wenden wir uns wieder der Streutheorie zu und verwenden den Begriff der „Pseudoeigenfunktionen“ mit der durch diesen Abschnitt erklärten Bedeutung. Dadurch ist es möglich, die effiziente Sprechweise der Lehrbuchliteratur ohne Verlust an Exaktheit zu übernehmen. In demselben Sinne übernehmen wir auch die Normierung der Pseudoeigenzustände auf δ -Funktionen, die aber dann die Einschränkung auf den dichten Testfunktionen-Teilraum des L^2 impliziert.

Für die Pseudoeigenzustände des freien Hamiltonoperators gilt wegen (38):

$$\mathbf{H}\Omega^{(+)}|\Psi_0, E, \alpha\rangle = \Omega^{(+)}\mathbf{H}_0|\Psi_0, E, \alpha\rangle = E\Omega^{(+)}|\Psi_0, E, \alpha\rangle. \quad (40)$$

Damit ist also

$$|\Psi^+, E, \alpha\rangle := \Omega^{(+)}|\Psi_0, E, \alpha\rangle \quad (41)$$

ein Pseudoeigenzustand des vollen Hamiltonoperators. Dieser besitzt also ebenfalls \mathbb{R} als kontinuierliches Spektrum. Aus (22) folgt mit dieser Definition die Spektraldarstellung des Mølleroperators:

$$\Omega^{(+)} = \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} dE |\Psi^+, E, \alpha\rangle \langle \Psi_0, E, \alpha|. \quad (42)$$

Wegen (35) ist die „Normierung auf die δ -Funktion“ gewährleistet:

$$\langle \Psi, E, \alpha | \Psi, E', \alpha' \rangle = \langle \Psi_0, E, \alpha | \Omega^{(+)\dagger} \Omega^{(+)} | \Psi_0, E', \alpha' \rangle = \delta(E - E') \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (43)$$

Dabei haben wir die Normierung von $|\Psi_0; E; \alpha\rangle$ auf die δ -Funktion benutzt.

Aus (42) folgt

$$\begin{aligned} \Omega^{(+)}\Omega^{(+)\dagger} &= \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} dE \Omega^{(+)}|\Psi_0, E, \alpha\rangle \langle \Psi_0, E, \alpha| \Omega^{(+)\dagger} = \\ &= \int_0^{\infty} dE \sum_{\alpha} |\Psi, E, \alpha\rangle \langle \Psi, E, \alpha| = 1 - \mathbf{\Lambda}. \end{aligned} \quad (44)$$

Dabei ist $\mathbf{\Lambda}$ der Projektor auf die gebundenen Zustände des Systems:

$$\mathbf{\Lambda} = \sum_n \left| \Psi_{\text{bd}}^{(n)} \right\rangle \left\langle \Psi_{\text{bd}}^{(n)} \right|. \quad (45)$$

Dabei numeriert der Index n die gebundenen Zustände, also alle echten Eigenvektoren des Hamiltonoperators, durch. Die dazugehörigen Energieeigenwerte sind diskret. Besitzt \mathbf{H} keine gebundenen Zustände (z.B. wenn V ein repulsives Potential ist), sind die Mølleroperatoren unitär. Es ist klar, daß die entsprechenden Betrachtungen auch für den Operator Ω^- gelten.

Wir zeigen jetzt, daß Ω^+ die gebundenen Zustände annulliert. Dazu adjungieren wir (38):

$$\mathbf{H}_0 \Omega^{(+)\dagger} = \Omega^{(+)\dagger} \mathbf{H}. \quad (46)$$

Daraus folgt

$$\mathbf{H}_0 \Omega^{(+)\dagger} |\Psi, E, \alpha\rangle = E \Omega^{(+)\dagger} |\Psi, E, \alpha\rangle. \quad (47)$$

Ist nun $E \in \text{Sp}(H)$ aber $E \notin \text{Sp}(H_0)$, d.h. $E < 0$, so muß

$$\Omega^{(+)\dagger} |\Psi, E, \alpha\rangle = 0 \Rightarrow \Omega^{(+)\dagger} \mathbf{A} = 0 \quad (48)$$

sein, weil sonst \mathbf{H}_0 Eigenwerte < 0 besitzen würde, und das ist wegen seiner Positivität unmöglich.

1.2 Die S-Matrix

Nach (10) und (18) gilt

$$|\Psi_{\text{out}}, t\rangle = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} |\Psi_{\text{in}}, t\rangle. \quad (49)$$

In der Streutheorie fragen wir nach Übergangsamplituden von einem asymptotisch freien in-Zustand in einen asymptotisch freien out-Zustand. D.h. wir fragen nach der Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen, das für $t \rightarrow -\infty$ im in-Zustand präpariert worden ist, weit entfernt vom Streuzentrum, also für $t \rightarrow \infty$, in einen gegebenen out-Zustand gestreut wird. Der exakte Streuzustand ist gemäß (15)

$$|\Psi^{(+)}, \alpha, t\rangle = \Omega^{(+)} |\Psi_{\text{in}}, \alpha, t\rangle. \quad (50)$$

Die Übergangsamplitude wird der obigen physikalischen Betrachtung gemäß durch

$$S_{\text{fi}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Psi_{\text{in}}, \beta, t | \Psi^+, \alpha, t \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Psi_{\text{in}}, \beta, t | \Psi_{\text{out}}, \alpha, t \rangle \quad (51)$$

definiert. S_{fi} heißt nach Heisenberg Streumatrix oder kurz S-Matrix. Sie enthält die vollständige physikalisch relevante Information über die Streuung. Aus ihr lassen sich z.B. Wirkungsquerschnitte berechnen (was wir erst im übernächsten Abschnitt zeigen).

Gemäß (49) berechnet sich für beliebig vorgegebene Anfangszustände $|\Psi_{\text{in}}, \beta, t\rangle$ bzw. Endzustände $|\Psi_{\text{out}}, \alpha, t\rangle$, die sich definitionsgemäß vermöge des ungestörten Hamiltonoperators zeitentwickeln, die S-Matrix aus

$$\mathbf{S} = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} \Rightarrow S_{\text{fi}} = \langle \Psi_{\text{out}}, \beta | \Psi_{\text{in}}, \alpha \rangle. \quad (52)$$

Der Operator \mathbf{S} heißt Streuoperator. Aus (38) und (47) folgt

$$\mathbf{S} \mathbf{H}_0 = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} \mathbf{H}_0 = \Omega^{(-)} \mathbf{H} \Omega^{(+)} = \mathbf{H}_0 \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} \Rightarrow [\mathbf{S}, \mathbf{H}_0] = 0. \quad (53)$$

Da sich die Zustände im Produkt (51) nach dem freien Hamiltonoperator bewegen, ergibt sich daraus, daß die Streumatrix zeitunabhängig ist.

Wir beweisen jetzt, daß S unitär ist. Dies ist erstaunlich, weil nach den obigen Betrachtungen beide Mølleroperatoren nicht unitär sind! Nach der Definition der S-Matrix schreibt sich (49):

$$|\Psi_{\text{out}}, t\rangle = \mathbf{S} |\Psi_{\text{in}}, t\rangle. \quad (54)$$

Andererseits gilt aber auch

$$|\Psi_{\text{in}}, t\rangle = \mathbf{\Omega}^{(+)\dagger} \mathbf{\Omega}^{(-)} |\Psi_{\text{out}}, t\rangle = \mathbf{S}^\dagger |\Psi_{\text{out}}, t\rangle. \quad (55)$$

Faßt man beide Gleichungen zusammen, folgt

$$|\Psi_{\text{out}}, t\rangle = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger |\Psi_{\text{out}}, t\rangle; \quad |\Psi_{\text{in}}, t\rangle = \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} |\Psi_{\text{in}}, t\rangle. \quad (56)$$

Da für die in- und out-Zustände beliebige Hilbertraumzustände eingesetzt werden dürfen, ist also \mathbf{S} unitär. Man führt auch den Reaktanzoperator \mathbf{K} ein:

$$\mathbf{K} = i(1 - \mathbf{S})(1 + \mathbf{S}^{-1}) \rightarrow \mathbf{S} = (1 + i\mathbf{K})(1 - i\mathbf{K})^{-1}. \quad (57)$$

Aus der Unitarität des Streuoperators folgt die Hermitezität des Reaktanzoperators. Man kann (49), wie man durch algebraische Umformung sofort bestätigt, in Form der **Heitler-Gleichung** schreiben:

$$\mathbf{S} - 1 = 2i\mathbf{K} + i\mathbf{K}(\mathbf{S} - 1). \quad (58)$$

2 Zeitunabhängige Streutheorie

Im folgenden wollen wir durch Fouriertransformation zu einer energieabhängigen Formulierung der im vorigen Abschnitt gezeigten zeitabhängigen Formulierung gelangen. Dazu transformieren wir zunächst die im vorigen Abschnitt eingeführten Greenfunktionen bzgl. der Zeit:

$$\mathbf{G}_0^\pm = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(iEt) \mathbf{G}_0^\pm(t), \quad \mathbf{G}^\pm = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(iEt) \mathbf{G}^\pm(t). \quad (59)$$

Dies in die definierenden Gleichungen der Greenfunktionen eingesetzt ergibt unter Berücksichtigung des Verfahrens des „adiabatic switching“ zur korrekten Darstellung der schwachen Konvergenz:

$$\mathbf{G}_0^\pm = \frac{1}{E \pm i0 - \mathbf{H}_0}, \quad \mathbf{G}^\pm = \frac{1}{E \pm i0 - \mathbf{H}}. \quad (60)$$

Für die weiteren Betrachtungen der Streuung sind die analytischen Eigenschaften dieser Fouriertransformationen entscheidend. Daher lassen wir jetzt $E \in \mathbb{C}$ zu und definieren eine verallgemeinerte Greenfunktion:

$$\mathbf{G}_0(E) = \frac{1}{E - \mathbf{H}_0}; \quad \mathbf{G}(E) = \frac{1}{E - \mathbf{H}}. \quad (61)$$

Dies sind für $E \notin \text{Sp}(H_0)$ bzw. $E \notin \text{Sp}(H)$ die Resolventen des freien bzw. exakten Hamiltonoperators. Zu den Fouriertransformationen der avancierten bzw. retardierten Greenfunktionen für $E > 0$ gelangt man wegen (2) durch den Grenzübergang

$$\lim_{E' \rightarrow E \pm i0} \mathbf{G}_0(E') = \mathbf{G}_0^\pm(E), \quad \lim_{E' \rightarrow E \pm i0} \mathbf{G}(E') = \mathbf{G}^\pm(E). \quad (62)$$

Wir haben im vorigen Abschnitt gesehen, daß \mathbb{R}_+ das kontinuierliche Spektrum sowohl von \mathbf{H}_0 als auch von \mathbf{H} bildet. Dementsprechend haben die Resolventenoperatoren (61) einen Schnitt entlang der positiven reellen Achse. \mathbf{G}_0 ist in der so aufgeschnittenen Zahlenebene holomorph

während \mathbf{G} einfache Pole bei den zu den gebundenen Zuständen gehörigen negativ reellen Energiewerten besitzt. Einen Spezialfall stellt der Punkt $E = 0$ dar, der bei den Anwendungen stets mit besonderer Vorsicht zu behandeln sein wird. Formal gehört er zum kontinuierlichen Spektrum der Hamiltonoperatoren und ist kein Energieeigenwert.

Im folgenden wird die Dispersionsformel

$$\frac{1}{x - x_0 \pm i0} = \frac{\mathcal{P}}{x - x_0} \mp i\pi\delta(x - x_0) \quad (63)$$

von entscheidender Bedeutung sein. Diese Gleichung ist als Gleichung zwischen Distributionen zu lesen. Dabei ordnet $\mathcal{P}/(x - x_0)$ einer Testfunktion den Cauchyschen Hauptwert des Integrals genommen über die ganze reelle Achse zu:

$$\left(\frac{\mathcal{P}}{x - x_0}; f \right) = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0} := \int_{-\infty}^{x_0 - i0} dx \frac{f(x)}{x - x_0} + \int_{x_0 + i0}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0}. \quad (64)$$

Dabei bezeichnet $(.; .)$ die Anwendung der im linken Argument stehenden Linearform (in unserem Falle Distribution) auf den rechts stehenden Vektor eines Vektorraums (in unserem Falle eine Testfunktion). Diese Gleichung ist auf Funktionen anwendbar, die die analytischen Eigenschaften der Greenfunktionen haben und im Unendlichen verschwinden. Dabei ist auf eine sorgfältige Behandlung der Funktionen auf dem positiven Teil der reellen Achse zu achten, weil dort der besagte Schnitt liegt.

Der Beweis der Formel mit dem unteren Vorzeichen folgt durch Anwendung des Residuensatzes auf die folgende Kontur in der komplexen Energieebene:

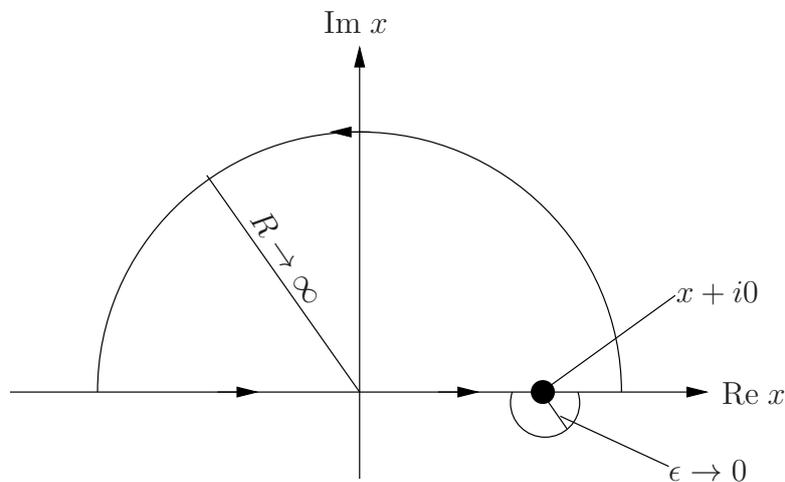


Abbildung 1: Zum Beweis von (63)

$$f(x_0 + i0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x + i0)}{x - x_0 - i0}. \quad (65)$$

Spart man hingegen den Pol auf der reellen Achse durch einen kleinen Kreis mit verschwindendem Radius von der Kontur aus, folgt

$$f(x_0 + i0) = \frac{1}{2\pi i} \left[P \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{f(x + i0)}{x - x_0} + i\pi f(x_0 + i0) \right] \quad (66)$$

Dabei rührt der Beitrag außerhalb des Hauptwertintegrals von dem kleinen Kreis her. Da dessen Radius beliebig klein zu nehmen ist, kann man nämlich die Funktion aus dem Integral herausziehen und die verbleibende Funktion $1/(x - x_0)$ integrieren. Das Integral dieser Funktion über den Halbkreis ist aber unabhängig vom Radius des Kreises $i\pi$. Damit ist die Dispersionsrelation bewiesen. Für die Greenfunktion heißt das

$$\mathbf{G}_0^\pm(E) = \frac{\mathcal{P}}{E - \mathbf{H}_0} \mp i\pi\delta(E - \mathbf{H}_0). \quad (67)$$

Entsprechend führen wir die fouriertransformierten Pseudozustände

$$|\Psi, E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(iEt) |\Psi, t\rangle; \quad |\Psi_{\text{in/out}}, E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(iEt) |\Psi_{\text{in/out}}, t\rangle \quad (68)$$

ein. Die zeitabhängige Gleichung (14) geht nach dem Faltungssatz in

$$|\Psi, E\rangle = |\Psi_{\text{in}}, E\rangle + \mathbf{G}^+(E)\mathbf{V}|\Psi_{\text{in}}, E\rangle = |\Psi_{\text{out}}, E\rangle + \mathbf{G}^-(E)\mathbf{V}|\Psi_{\text{out}}, E\rangle \quad (69)$$

über.

Genauso zeigt man die folgenden Gleichungen

$$|\Psi^+, E\rangle = |\Psi_0, E\rangle + \mathbf{G}_0^+(E)\mathbf{V}|\Psi^+, E\rangle; \quad |\Psi^-, E\rangle = |\Psi_0, E\rangle + \mathbf{G}_0^-(E)\mathbf{V}|\Psi^-, E\rangle. \quad (70)$$

Dazu muß man nur statt der Rechnung, die zu (7) geführt hat, von der aus (3) unmittelbar zu entnehmenden Gleichung

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H}_0\right) \mathbf{G}^\pm(t) = \delta(t) + \mathbf{V}\mathbf{G}^\pm(t) \quad (71)$$

ausgehen und nochmals (3) anwenden um eine (7) entsprechende Integralgleichung herzuleiten. Wendet man dann noch diese Gleichung auf die Zeitentwicklung der in- und out-Zustände gemäß den Gleichungen (11-13) an, folgert man (70) aus der entstehenden Gleichung genau wie (69) aus (14) zu schließen war.

Die Pseudozustände erfüllen die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\mathbf{H}_0 |\Psi_0, E\rangle = E |\Psi_0, E\rangle; \quad \mathbf{H} |\Psi, E\rangle = E |\Psi, E\rangle. \quad (72)$$

Die Vollständigkeit der freien Pseudozustände ergibt unmittelbar

$$\mathbf{G}_0(E) = \int_0^\infty dE' \frac{\sum_\alpha |\Psi_0, E', \alpha\rangle \langle \Psi_0, E', \alpha|}{E - E'}. \quad (73)$$

Dabei mußte durch den Index α die Energieentartung der freien Zustände berücksichtigt werden. Bei der exakten Greenfunktion müssen wir zusätzlich eventuell vorhandene gebundene Zustände berücksichtigen:

$$\mathbf{G}(E) = \sum_n \frac{|\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|}{E - E_n} + \int_0^\infty dE' \frac{\sum_\alpha |\Psi, E', \alpha\rangle \langle \Psi, E', \alpha|}{E - E'}. \quad (74)$$

Die Zeitunabhängigkeit der Mølleroperatoren ergibt durch Anwendung der Fouriertransformation auf die entsprechenden zeitabhängigen Gleichungen sofort

$$|\Psi^\pm, E, \alpha\rangle = \mathbf{\Omega}^{(\pm)} |\Psi_0, E, \alpha\rangle; \quad |\Psi_0, E, \alpha\rangle = \mathbf{\Omega}^{(\pm)\dagger} |\Psi^\pm, E, \alpha\rangle, \quad |\Psi_{\text{out}}, E\rangle = \mathbf{S} |\Psi_{\text{in}}, E\rangle. \quad (75)$$

Daraus folgt, daß die S-Matrix genauso gut aus der zeitunabhängigen Schrödingertheorie, also aus der Eigenwerttheorie des Hamiltonoperators hergeleitet werden kann wie aus der zeitabhängigen Theorie.

3 Streutheorie in der Ortsdarstellung

3.1 Die Lippmann-Schwinger-Gleichung

In den beiden ersten Paragraphen haben wir die formalen Aspekte der Streutheorie behandelt. Jetzt wenden wir uns der Ortsdarstellung des Problems zu. Dann geht der Operatorformalismus bekanntermaßen in eine Beschreibung im L^2 mittels dort dicht definierter Differentialoperatoren über. Die in den vorigen Abschnitten behandelten Operatorgleichungen gehen dabei in Differential- und Integralgleichungen über, so daß damit die Theorie der analytischen Funktionen nutzbar wird. Wir haben in Abschnitt 2 gesehen, daß wir für das Problem der Potentialstreuung mit zeitunabhängigen Potentialen, auf die wir uns auch weiterhin beschränken wollen, mit der dort entwickelten zeitunabhängigen Theorie auskommen, d.h. es genügt die Berechnung der für die Streeung relevanten Energiepseudoeigenvektoren um die S-Matrix zu gewinnen. Dazu gehen wir von (70) aus:

$$|\Psi^\pm\rangle = |\Psi_{0E}\rangle + \frac{1}{E + \mathbf{H}_0 \pm i0} \mathbf{V} |\Psi^\pm\rangle \quad (76)$$

Wir können weiter für die praktischen Fälle annehmen, daß \mathbf{V} ein in der Ortsdarstellung diagonalen Operator ist, so daß wir durch Skalarmultiplikation mit $|\vec{x}\rangle$, dem Ortspseudoeigenzustand, von links und „Einschub einer 1“ im zweiten Summanden (Spektraldarstellung) zur **Lippmann-SchwingerGleichung**

$$\Psi_E^\pm(\vec{x}) = \Psi_{0E}(\vec{x}) + \int d^3\vec{x}' \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E - \mathbf{H}_0 \pm i0} \right| \vec{x}' \right\rangle V(\mathbf{x}') \Psi_E^\pm(\vec{x}') \quad (77)$$

gelangen. Der in (77) auftretende Integralkern ist die Ortsdarstellung der retardierten bzw. avancierten Greenfunktion zur Schrödingergleichung eines freien Teilchens. Um sie zu berechnen, bemerken wir, daß wegen $H_0 = \vec{p}^2/(2m)$ in der Impulsdarstellung

$$G_0^\pm(\vec{p}; \vec{p}') = \frac{1}{2m} \left\langle \vec{p} \left| \frac{1}{E - \mathbf{H}_0 \pm i0} \right| \vec{p}' \right\rangle = \frac{1}{2m} \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) \pm i0} \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \quad (78)$$

ist. Der Faktor $1/(2m)$ ist Konvention. Wegen

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{\exp(i\vec{p}\vec{x})}{(2\pi)^{3/2}} \quad (79)$$

folgt

$$G_0^\pm(\vec{x}; \vec{x}') = \frac{1}{2m} \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \exp[i\vec{p}(\vec{x} - \vec{x}')] \frac{1}{E - \vec{p}^2/(2m) \pm i0}. \quad (80)$$

Setzen wir $\vec{X} = \vec{x} - \vec{x}'$ und rechnen in Kugelkoordinaten mit der Richtung von \vec{X} als Polarrichtung, folgt nach der elementaren Auswertung des Winkelintegrals

$$G_0^\pm(\vec{x}; \vec{x}') = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p \sin(pX)}{X(2mE - p^2 \pm i0)} dp \quad (81)$$

Dabei bezeichnen wir mit $X = \|\vec{X}\|$ die euklidische Norm des Vektors \vec{X} (und entsprechend für alle anderen Vektoren). Mit $E = k^2/(2m)$ läßt sich dies zu

$$G_0^\pm(\vec{x}; \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi^2 i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p \exp(i\vec{p}\vec{X})}{X(p^2 - k^2 \mp i0)} dp \quad (82)$$

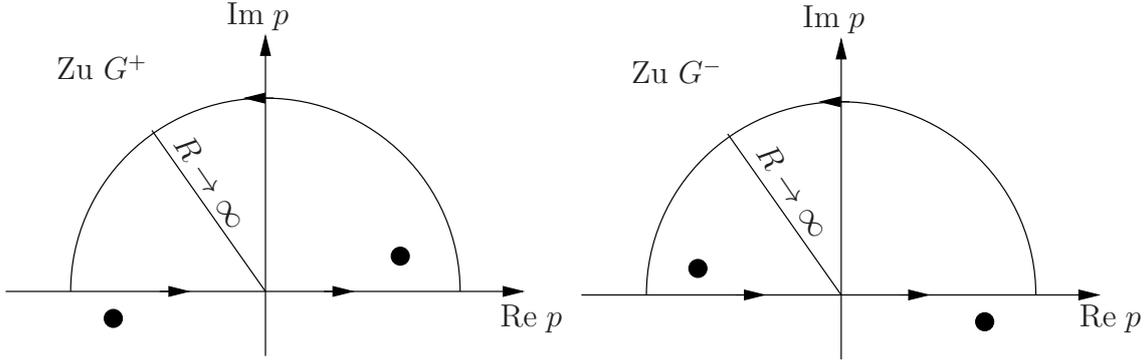


Abbildung 2: Zur Berechnung der freien Greenfunktionen

umformen. Dieses Integral läßt sich mittels des Residuenkalküls auswerten. Dazu stellen wir die Situation in der komplexen p -Ebene für die beiden Vorzeichen im Nenner getrennt dar:

Die eingezeichneten Punkte sind die einfachen Pole des Integranden. Es wird über den eingezeichneten Weg, der aus der reellen Achse und dem oberen Halbkreis besteht, integriert. Der Halbkreis trägt zum Integral im limes $R \rightarrow \infty$ nichts bei, so daß man tatsächlich nur über die reelle Achse integriert. Da $X > 0$ ist, darf man nicht den unteren Halbkreis wählen, weil der Imaginärteil von p stets positiv sein muß, damit der Integrand für $R \rightarrow \infty$ verschwindet. Somit tragen nur die Pole in der oberen Halbebene zum Residuensatz bei, und es ergibt sich für die Greenfunktionen schließlich

$$G_0^\pm(\vec{x}; \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ikX)}{X}. \quad (83)$$

Wir betrachten im folgenden nur die Konstruktion der Streuzustände mittels der retardierten Greenfunktion aus dem in-Zustand. Es ist klar, daß sich genau analog auch die Streuzustände aus den out-Zuständen mittels der avancierten Greenfunktion bestimmen lassen.

Wir können zunächst sehen, daß die zu Beginn von Abschnitt 1 skizzierte physikalische Situation tatsächlich durch die Lösung dargestellt wird. Dazu betrachten wir den Streuzustand Ψ_E^+ in großen Entfernungen vom Streuzentrum. Setzt man (83) in (77) ein und beachtet $X = \|\vec{x} - \vec{x}'\|$, schreibt sich die LippmannSchwinger-Gleichung in der Ortsdarstellung

$$\Psi_E^+(\vec{x}) = \Psi_0(\vec{x}) - 2m \int d^3\vec{x}' \frac{\exp(ik|\vec{x} - \vec{x}'|)}{4\pi\|\vec{x} - \vec{x}'\|} V(\mathbf{x}') \Psi_E^+(\vec{x}) \quad \text{mit } E = \frac{k^2}{2m} \quad (84)$$

Wir nehmen nun an, das Potential V besitze einen kompakten Träger oder falle für $\|\vec{x}'\| \rightarrow \infty$ schnell ab, so daß nur die Integration über den kompakten Träger bzw. eine hinreichend große Kugel um das Streuzentrum, das bei $\vec{x}' = 0$ liegen möge (Wahl des Koordinatenursprungs), relevant ist. Dann kann man für die Greenfunktion die Näherung für $\|\mathbf{x}'\| \ll \|\vec{x}\|$ benutzen, wenn man sich für die Wellenfunktion weit weg vom Streuzentrum interessiert, was ja der physikalischen Intuition, das „Streuergebnis“ weit weg vom Streuzentrum zu registrieren, entspricht. Zunächst gilt

$$\|\vec{x} - \vec{x}'\| \underset{\|\vec{x}\| \rightarrow \infty}{\cong} \|\vec{x}\| - \frac{\vec{x}}{\|\vec{x}\|} \cdot \vec{x}'. \quad (85)$$

Sei nun $\vec{k}' = k\vec{x}/\|\vec{x}\|$ der Wellenvektor in Beobachtungsrichtung. Nach (85) ist also

$$k\|\vec{x} - \vec{x}'\| \underset{\|\vec{x}\| \rightarrow \infty}{\cong} kx - \vec{k}' \cdot \vec{x}'. \quad (86)$$

Wählen wir für die in-Welle einen Impulspseudoeigenzustand zum Eigenimpuls \vec{k} , wird mit dieser Näherung gemäß (84)

$$\Psi_E^+(\vec{x}) = \frac{\exp(i\vec{k}\vec{x})}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{2m}{4\pi} \frac{\exp(ikx)}{x} \int d^3\vec{x}' \exp(-i\vec{k}'\vec{x}') V(\vec{x}') \Psi_E^+(\vec{x}') \quad (87)$$

Definiert man

$$f(\vec{k}; \vec{k}') = -\frac{2m}{4\pi} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | \mathbf{V} | \Psi^+ \rangle = \frac{2m}{4\pi} (2\pi)^3 \int \frac{d^3\vec{x}'}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-i\vec{k}'\vec{x}') V(\vec{x}') \Psi_E^+(\vec{x}'), \quad (88)$$

so schreibt sich dies in der Form

$$\Psi_E^+(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\exp(i\vec{k}\vec{x}) + \frac{\exp(ikx)}{x} f(\vec{k}'; \vec{k}) \right]. \quad (89)$$

Es ist klar, daß f die gesamte Information über die Streuung enthält. f heißt **Streuamplitude**. Gemäß der Bedeutung der Energiedarstellung als Fouriertransformation bzgl. der Zeit (vgl. Abschnitt 2) sehen wir, daß Ψ_E^+ die Superposition der einfallenden ebenen Welle mit gegebenem Impuls \vec{k} und der Streuwelle, die eine auslaufende Kugelwelle darstellt, ist. Dies entspricht tatsächlich genau unserer intuitiven Vorstellung von der Streuung, die wir zu Beginn von Abschnitt 1 skizziert hatten.

3.2 Energie-Drehimpuls-Eigenfunktionen des freien Teilchens

Im folgenden betrachten wir die Streuung von Teilchen mit Spin 0 an einem Zentralpotential, d.h. der Hamiltonoperator kommutiert mit dem Drehimpulsvektoroperator. Da das Teilchen Spin 0 hat, ist der Drehimpulsoperator mit dem Bahndrehimpulsoperator identisch.

Zur Bestimmung der in- und out-Zustände müssen wir zunächst die Energie-Drehimpuls-Eigenfunktionen des freien Teilchens betrachten. Dabei wird ein Zustand durch die Quantenzahlen E , l und m bestimmt. Sie sind als Eigenwerte des Hamiltonoperators, des Drehimpulsquadratoperators und der Drehimpulskomponente in z -Richtung definiert:

$$\mathbf{H} |Elm\rangle = E |Elm\rangle; \quad \mathbf{L}^2 |Elm\rangle = l(l+1) |Elm\rangle; \quad \mathbf{L}_z |Elm\rangle = m |Elm\rangle. \quad (90)$$

Da wir wie oben erwähnt für unser Spin-0-Teilchen der Drehimpuls mit dem Bahndrehimpuls übereinstimmt, ist $l \in \mathbb{N}$ und $m \in \{-l; -l+1; \dots; l\}$. Das Spektrum des Hamiltonoperators ist \mathbb{R}_0^+ . Weiter ist aus der Theorie der Drehimpulsalgebra, also der Liealgebra $so(3)$ zur Drehgruppe $SO(3)$ bekannt, daß mit den Leiteroperatoren

$$\mathbf{L}_\pm = \mathbf{L}_x \pm i\mathbf{L}_y; \quad \vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{p}} \quad (91)$$

die Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_+ |Elm\rangle &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |El(m+1)\rangle, \\ \mathbf{L}_- |Elm\rangle &= \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |El(m-1)\rangle \end{aligned} \quad (92)$$

gelten. Aus der Heisenbergalgebra berechnet man sofort den Drehimpulsquadratoperator:

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{L}_j \mathbf{L}_j = \epsilon_{jkl} \epsilon_{jmn} \mathbf{x}_k \mathbf{p}_l \mathbf{x}_m \mathbf{p}_n = \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i \mathbf{p}_j \mathbf{p}_j + i\mathbf{x}_i \mathbf{p}_i - (\mathbf{x}_i \mathbf{p}_i)^2. \quad (93)$$

Wir rechnen jetzt in der Ortsdarstellung, in der $\vec{\mathbf{p}} = -i\nabla$ gilt. Aus (93) folgt

$$\langle \vec{x} | \mathbf{L}^2 | Elm \rangle = -r^2 \Delta \Psi_{Elm} + 2r \frac{\partial \Psi_{Elm}}{\partial r} \Psi_{Elm} + r^2 \frac{\partial^2 \Psi_{Elm}}{\partial r^2}. \quad (94)$$

Dabei haben wir die Differentialoperatoren in Kugelkoordinaten umgerechnet, die für das kugelsymmetrische Problem und die Behandlung des Drehimpulsoperators bequemer sind als die kartesischen Koordinaten. Daraus folgt zunächst wegen (90)

$$E \Psi_{Elm} = -\frac{1}{2m} \Delta \Psi_{Elm} = \frac{1}{2m} \left[\frac{l(l+1)}{r^2} \Psi_{Elm} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi_{Elm}}{\partial r} \right) \right]. \quad (95)$$

Andererseits erzeugen die $\vec{\mathbf{L}}$ Drehungen, so daß wir die Wirkung auf ein skalares Feld (Spin-0-Teilchen) sofort ausrechnen können. Ein skalares Feld transformiert sich unter Drehungen gemäß

$$\Phi'(\vec{x}') = \Phi(\vec{x}) = \Phi(D^{-1}\vec{x}') \text{ mit } D \in \text{SO}(3). \quad (96)$$

Für eine infinitesimale Drehung in Drehrichtung \vec{n} ist

$$\begin{aligned} (D^{-1})_{ik} &= \delta_{ik} - \epsilon_{ikj} n_j \delta\phi, \\ \Phi'(\vec{x}') &= \Phi(x'_i - \epsilon_{ikj} n_j x'_k \delta\phi) = \Phi(\vec{x}') + in_j \mathbf{L}_j \Phi(\vec{x}') \delta\phi = in_j \epsilon_{jik} x_k \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \delta\phi. \end{aligned} \quad (97)$$

In Kugelkoordinaten ist

$$\vec{r} \times \nabla \Phi = \vec{e}_\varphi \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi}. \quad (98)$$

Damit folgt

$$\mathbf{L} \Phi = -i \left[\vec{e}_x \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \vec{e}_y \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \Phi. \quad (99)$$

Gl. (14a) ergibt

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_+ \Phi &= \exp(i\varphi) \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Phi; \quad \mathbf{L}_- \Phi = \exp(-i\varphi) \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Phi, \\ \mathbf{L}_z \Phi &= -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi. \end{aligned} \quad (100)$$

Führt man in (94) den Laplaceoperator in Kugelkoordinaten aus, erhält man

$$\mathbf{L}^2 \Phi = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}. \quad (101)$$

Betrachtet man (95), folgt, daß die Wellenfunktion dem Produktansatz

$$\Psi_{Elm}(r; \theta; \varphi) = R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (102)$$

genügt. Die Radialwellenfunktion R_{El} hängt nicht von der magnetischen Quantenzahl m ab. Dies entspricht der Entartung der Energiespektralwerte aufgrund der Rotationssymmetrie.

Der Winkelanteil läßt sich jetzt bequem mit Hilfe der Schiebeoperatoren bestimmen. Zunächst ist

$$\mathbf{L}_- Y_l^{-l} = 0; \quad \mathbf{L}_z Y_l^{-l} = -l Y_l^{-l}. \quad (103)$$

Es ist klar, daß sich diese Gleichungen durch einen Produktansatz

$$Y_l^{-l}(\theta; \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (104)$$

erfüllen lassen. Setzt man jetzt die Operatoren gemäß (100) in diese Gleichungen ein, folgt durch elementare Integration

$$Y_l^{-l}(\theta; \varphi) = N_{lm} \exp(-il\varphi) \sin^l \theta. \quad (105)$$

Es ist nun nützlich, diese Funktionen (es handelt sich um die Kugelflächenfunktionen) bzgl. des Raumes $L^2(S)$ zu normieren. Es ist dies der Hilbertraum der auf der Kugelfläche S definierten Funktionen. In unseren Koordinaten lautet das Skalarprodukt

$$\langle Y_1 | Y_2 \rangle = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta Y_1^*(\theta; \varphi) Y_2(\theta; \varphi), \quad (106)$$

d.h. wir verlangen, daß

$$|N|^2 2\pi \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta = 1 \quad (107)$$

ist. Die Ausführung des Integrals ergibt

$$N_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \Rightarrow Y_l^{-l}(\theta; \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \exp(-il\varphi) \sin^l \theta. \quad (108)$$

Dabei folgen wir der Phasenwahl von [Sak94]. Durch wiederholte Anwendung von (92) erhält man alle weiteren Kugelflächenfunktionen.

Die Rekursion läßt sich in eine geschlossene Form bringen:

$$Y_l^m(\theta; \varphi) = \frac{\exp(im\varphi)(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \sin^m \theta \left(\frac{d}{d(\cos \theta)} \right)^{l+m} \sin^{2l} \theta. \quad (109)$$

Ersetzt man hierin m durch $-m$ und vergleicht die entstehende Formel mit dem Ausdruck der entsteht, wenn man umgekehrt von Y_l^l ausgeht und mit dem Leiteroperator L_- die weiteren Kugelflächenfunktionen bestimmt, findet man die Symmetrierelation

$$Y_l^{-m} = (-1)^m Y_l^{m*}. \quad (110)$$

Für $m = 0$ ist

$$Y_l^0(\theta; \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \left(\frac{d}{d(\cos \theta)} \right)^l (\cos^2 \theta - 1)^l = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (111)$$

Dabei ist P_l das Legendrepolynom vom Grade l . Es besitzt die nützliche Eigenschaft $P_l(1) = 1$. Wir wenden uns jetzt der Radialgleichung (95) zu:

$$-\frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{El}}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{2mr^2} R_{El} = ER_{El}. \quad (112)$$

Wir können R_{El} als eindimensionales Eigenwertproblem im Hilbertraum der Radialwellenfunktionen auffassen. In diesem Hilbertraum hat das Skalarprodukt die Form

$$\langle R_1 | R_2 \rangle_{r^2} = \int_0^\infty r^2 R_1^*(r) R_2(r) dr. \quad (113)$$

Es liegt nahe, durch den Ansatz

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (114)$$

zum $L^2[(0, \infty)]$ überzugehen:

$$\langle R_1 | R_2 \rangle_{r^2} = \langle u_1; u_2 \rangle = \int_0^\infty u_1^*(r) u_2(r) dr \quad (115)$$

Dies in (112) substituiert ergibt

$$-\frac{1}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} u = Eu. \quad (116)$$

Das ist die eindimensionale Energie-Eigenwertgleichung im Raum $L^2[(0; \infty)]$. Nun muß aber u im Nullpunkt die Randbedingung $u(0) = 0$ erfüllen, damit $\mathbf{p}_r = -i\partial_r$ ein hermitescher Operator ist:

$$\langle u_1 | \mathbf{p}_r | u_2 \rangle = \int_0^\infty u_1^*(r) \left(-i \frac{d}{dr} \right) u_2(r) dr = i u_1^*(0) u_2(0) + \int_0^\infty \left(-i \frac{du_1(r)}{dr} \right)^* u_2(r) dr. \quad (117)$$

Da dies für alle Paare u_1, u_2 gelten muß, insbesondere auch für $u = u_1 = u_2$, ist also \mathbf{p}_r genau dann hermitesch, wenn $u(0) = 0$ ist. Wir setzen jetzt $2mE = k^2$. Dann gilt

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u = -k^2 u. \quad (118)$$

Substituiert man noch $x = kr$, folgt

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} u = -u. \quad (119)$$

Diese Gleichung ist von der Fuchsschen Klasse, und die Lösungen besitzen somit nur außerwesentliche Singularitäten. Daher ist sie mit dem Ansatz

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+\alpha} \quad (120)$$

lösbar. Das in (119) eingesetzt führt durch Koeffizientenvergleich zu der Rekursionsvorschrift

$$\begin{aligned} a_0[\alpha(\alpha-1) - l(l+1)] &= 0, \\ a_1[(\alpha+1)\alpha - l(l+1)] &= 0, \\ a_n &= -\frac{a_{n-2}}{(n+\alpha)(n+\alpha-1) - l(l+1)} \quad \text{für } n \geq 2 \end{aligned} \quad (121)$$

Setzt man $a_0 \neq 0$ voraus, muß man $a_1=0$ verlangen, damit die ersten beiden Forderungen gleichzeitig erfüllbar sind. Dann folgt, daß $\alpha(\alpha-1) = l(l+1)$ ist. Diese Gleichung besitzt zwei Lösungen, nämlich $\alpha = -l$ und $\alpha = l+1$. Dies sind bereits zwei linear unabhängige Lösungen. Die lineare Unabhängigkeit ist schon daraus ersichtlich, daß die eine Funktion eine gerade, und die andere eine ungerade Funktion in x ist. Wenden wir uns zunächst der bei $x = 0$ regulären Lösung zu, also $\alpha = l+1$. Führt man die Rekursion aus, erhält man

$$u_0(x) = a_0 \sin x. \quad (122)$$

Diese Funktionen können nur auf die δ -Distribution normiert werden, weil sie Pseudoeigenfunktionen des radialen Impulsoperators zum Eigenwert k sind. Man erhält

$$\int_0^\infty u_0(kr)^* u_0(k'r) dr = \frac{|a_0|^2}{2} \pi \delta(k - k') \Rightarrow a_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}},$$

$$R_0(r) = \frac{u_0(r)}{r} = \frac{2k}{\sqrt{2\pi}} j_0(kr) \text{ mit } j_0(x) = \frac{\sin x}{x}. \quad (123)$$

Allgemein ergibt (121) die **sphärischen Besselfunktionen**:

$$j_l(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(2l+1)!! x^{2k+l}}{(2k)!! (2l+2k+1)!!}. \quad (124)$$

Aus dieser Gleichung berechnet man durch gliedweise Differentiation die Rekursionsformel

$$j_{l+1}(x) = -\frac{N_l}{x^l} \frac{d}{dx} \left(\frac{j_l(x)}{x^l} \right) \quad (125)$$

Aus $j_0(x) = \sin x/x$ erhält man bei Wahl der Konstanten $N_l = 1$ durch wiederholte Anwendung dieser Formel

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l j_0(x). \quad (126)$$

Die zweite von den sphärischen Besselfunktionen linear unabhängige Lösung der Differentialgleichung (119) erhält man für $\alpha = -l$. Die Rekursionsformel (125) gilt auch in diesem Fall, wie man durch Einsetzen in die Differentialgleichung erkennt. Dann folgt mit denselben Methoden wie bei den Besselfunktionen

$$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}, \quad n_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l n_0(x). \quad (127)$$

Diese Funktionen heißen **sphärische Neumannfunktionen**.

Im folgenden ist das asymptotische Verhalten für große x wichtig. Dazu betrachtet man am einfachsten die Hankelfunktionen

$$h_l^{(1;2)}(x) = j_l(x) \pm i n_l(x). \quad (128)$$

Für $l = 0$ ist insbesondere

$$h_0^{(1;2)}(x) = \frac{\exp(\pm ix)}{\pm ix}. \quad (129)$$

Da auch diese beiden Funktionen Lösungen der Differentialgleichung (119) sind, gelten wieder die Gleichungen (126) bzw. (127). Für große x braucht man nur die Exponentialfunktion zu differenzieren, weil die Ableitung des $1/x$ -Terms zu Beiträgen höherer Ordnung in $1/x$ führt. Indem man die i -Faktoren im Exponenten berücksichtigt, erhält man

$$h_l^{(1;2)}(x) = \mp \frac{i}{x} \exp[\pm i(x - l\pi/2)]. \quad (130)$$

Für Real- und Imaginärteil folgt

$$j_l(x) = \operatorname{Re} h_l^{(1)}(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\cong} \frac{\sin(x - \frac{l\pi}{2})}{x},$$

$$n_l(x) = \operatorname{Im} h_l^{(1)}(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\cong} -\frac{\cos(x - \frac{l\pi}{2})}{x}. \quad (131)$$

Wir betrachten jetzt eine beliebige Lösung von (119). Sie läßt sich durch Linearkombination aus den sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen darstellen:

$$Z_l(x) = a_1 j_l(x) + a_2 n_l(x). \quad (132)$$

Für sie gilt wieder die Rekursionsformel

$$Z_{l+1}(x) = -x^l \frac{d}{dx} \left(\frac{Z_l(x)}{x^l} \right). \quad (133)$$

Differenziert man die rechte Seite aus, ergibt sich

$$Z_l'(x) = \frac{lZ_l}{x} - Z_{l+1}(x). \quad (134)$$

Eine andere Rekursionsformel, die sich aus den Reihen für die j_l bzw. n_l durch gliedweise Differentiation beweisen läßt, lautet

$$Z_{l-1}(x) = \frac{1}{x^{l+1}} \frac{d}{dx} \left[x^{l+1} Z_l(x) \right]. \quad (135)$$

Kombination von (134) und (135) ergibt die Rekursionsformel

$$\frac{2l+1}{x} Z_l(x) = Z_{l-1}(x) + Z_{l+1}(x). \quad (136)$$

Weiter benötigen wir die Integraldarstellung

$$j_l(x) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 \exp(iux) P_l(u) du \quad (137)$$

Zum Beweis durch vollständige Induktion zeigen wir, daß die Gleichung für $l = 0$ erfüllt wird und die Rekursionsformel (134) gilt. Es ist

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \exp(iux) du = \frac{\sin x}{x} = j_0(x). \quad (138)$$

Dabei haben wir verwendet, daß P_0 identisch 1 ist. Nehmen wir an, die Formel (137) gelte für alle $j_{l'}$ mit $l' \leq l$. Dann folgt unter Verwendung einer bekannten Rekursionsformel für die Legendre-Polynome

$$\begin{aligned} \tilde{j}_{l+1}(x) &= \frac{1}{2i^{l+1}} \int_{-1}^1 \exp(iux) P_{l+1}(u) du \\ &= \frac{1}{2i^{l+1}} \int_{-1}^1 \exp(iux) \frac{(2l+1)uP_l(u) - lP_{l-1}(u)}{l+1} du \\ &= -\frac{2l+1}{l+1} j_l'(x) + \frac{l}{l+1} j_{l-1}(x). \end{aligned} \quad (139)$$

Eliminiert man hierin $j_{l-1}(x)$ mit Hilfe der Rekursionsformel (135), ergibt sich die rechte Seite von (134), d.h. es gilt tatsächlich $\tilde{j}_{l+1}(x) = j_{l+1}(x)$, und damit ist (137) bewiesen.

3.3 Die Partialwellenmethode

Nach diesem längeren Ausflug in die Theorie der speziellen Funktionen betrachten wir die Streuung an einem sphärisch symmetrischen Potential. Dazu führen wir noch ein formales Hilfsmittel ein, nämlich die T -Matrix. Sie wird definiert durch

$$\mathbf{V} |\Psi^+\rangle = \mathbf{T} |\Psi_{\text{in}}\rangle. \quad (140)$$

Bringt man das in (76) ein, folgt

$$\mathbf{T} |\Psi_{\text{in}}\rangle = \mathbf{V} |\Psi_{\text{in}}\rangle + \mathbf{V} \frac{1}{E - \mathbf{H}_0 + i0} \mathbf{T} |\Psi_{\text{in}}\rangle. \quad (141)$$

Da die in-Zustände vollständig sind, folgt für \mathbf{T} die Operatorgleichung

$$\mathbf{T} = \mathbf{V} + \mathbf{V} \frac{1}{E - \mathbf{H}_0 + i0} \mathbf{T} \quad (142)$$

Da \mathbf{T} für unser Spin-0-Problem ein skalarer Operator ist, gilt für die Matrixelemente bzgl. der Energie-Drehimpuls-Pseudoeigenbasis:

$$\langle E'; l'; m' | \mathbf{T} | Elm \rangle = T_l(E) \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (143)$$

d.h. die T -Matrix ist in l und m diagonal, wie es nach dem Wigner-Eckard-Theorem zu erwarten ist.

Der Zusammenhang mit der Streuamplitude ist durch Einschieben zweier spektraler Zerlegungen der 1 in (88) gegeben:

$$\begin{aligned} f(\vec{k}'; \vec{k}) &= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 2m \langle \mathbf{k}' | \mathbf{V} | \Psi^+ \rangle = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 2m \langle \vec{k}' | \mathbf{T} | \vec{k} \rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 2m \sum_{l,m} \sum_{l',m'} \int dE \int dE' \langle \vec{k}' | E'; l'; m' \rangle \\ &\quad \langle E'; l'; m' | \mathbf{T} | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \vec{k} \rangle. \end{aligned} \quad (144)$$

Da \vec{k} sich unter Drehungen wie ein Vektor verhält, muß

$$\langle \vec{k} | Elm \rangle = g_{lE}(k) Y_l^m(\theta; \varphi) \quad (145)$$

sein. Weiter ist

$$(\mathbf{H}_0 - E) | Elm \rangle = 0 \Rightarrow \left(\frac{\vec{k}^2}{2m} - E \right) \langle \vec{k} | Elm \rangle = 0. \quad (146)$$

Folglich gilt

$$\langle \vec{k} | Elm \rangle = N \delta \left(\frac{k^2}{2m} - E \right) Y_l^m(\theta; \varphi). \quad (147)$$

Zur Bestimmung von N rechnen wir

$$\begin{aligned} \langle E' l' m' | Elm \rangle &= \int d^3 \vec{k} \langle E' l' m' | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | Elm \rangle = \\ &= \int d^3 \mathbf{k} |N|^2 \delta \left(\frac{\vec{k}^2}{2m} - E' \right) Y_{l'}^{m'*}(\hat{\vec{k}}) \delta \left(\frac{\vec{k}^2}{2m} - E \right) = \\ &= \int_0^\infty k^2 dk \int_S d\Omega_{\hat{\vec{k}}} \delta \left(\frac{k^2}{2m} - E' \right) \delta \left(\frac{k^2}{2m} - E \right) Y_{l'}^{m'*}(\hat{\vec{k}}) Y_l^m(\hat{\vec{k}}). \end{aligned} \quad (148)$$

mit $\hat{k} = \vec{k}/\|\vec{x}\|$.

Wir substituieren darin $E'' = k^2/(2m)$:

$$\begin{aligned}\langle E'l'm' | Elm \rangle &= \int_0^\infty dE'' \frac{2mE''}{dE''/dk} |N|^2 \delta(E'' - E') \delta(E'' - E) \delta_{l'l'} \delta_{m'm'} \\ &= mk |N|^2 \delta(E - E') \delta_{l'l'} \delta_{m'm'} \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{mk}}.\end{aligned}\quad (149)$$

Dies in (147) eingebracht ergibt schließlich

$$\langle \vec{k} | Elm \rangle = \frac{1}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{k^2}{2m} - E\right) Y_l^m(\hat{k}). \quad (150)$$

Damit stellt sich die ebene Welle wie folgt als Reihe in den Kugelflächenfunktionen dar:

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle &= \frac{\exp(i\vec{k}\vec{x})}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_{l;m} \int_0^\infty \langle \vec{x} | Elm \rangle \langle Elm | \vec{k} \rangle \\ &= \sum_{l;m} \int_0^\infty dE \langle \vec{x} | Elm \rangle \frac{1}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{k^2}{2m} - E\right) Y_l^{m*}(\hat{k}) = \sum_{l;m} \langle \vec{x} | Elm \rangle_{E=\frac{k^2}{2m}} Y_l^{m*}(\hat{k}).\end{aligned}\quad (151)$$

Da $\langle \vec{x} | Elm \rangle$ Lösung der freien stationären Schrödingergleichung ist, muß gelten:

$$\langle \vec{x} | Elm \rangle = C_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{r}), \quad (152)$$

wobei n_l deshalb nicht vorkommen kann, weil die Wellenfunktion im Ursprung regulär sein muß. Dies in (151) eingesetzt und die Additionsformel für Kugelflächenfunktionen angewandt (vgl. Anhang), ergibt

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_l \frac{1}{\sqrt{mk}} \frac{2l+1}{4\pi} C_l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad \text{mit } \cos \theta = \hat{x}\hat{p}. \quad (153)$$

Aus der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen (die sofort aus der Hermitezität der Drehimpulsoperatoren folgt) erhält man

$$\frac{\sqrt{2l+1}}{4\pi mk} C_l j_l(kr) = 2\pi \int_{-1}^1 \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{(2\pi)^{3/2}} Y_l^{0*}(\theta) d(\cos \theta) \quad (154)$$

Mit (111) und der Darstellung der sphärischen Besselfunktionen (137) folgt schließlich

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{mk}} C_l &= \int_{-1}^1 \frac{\exp(ikru)}{\sqrt{2\pi}} P_l(u) du = \frac{2i^l}{\sqrt{2\pi}} \Rightarrow C_l = i^l \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} \Rightarrow \\ \langle \vec{x} | Elm \rangle &= i^l \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_l(kr) Y_l^m(\hat{x}),\end{aligned}\quad (155)$$

und wir haben endlich für die ebene Welle die Entwicklung in Wellen mit definierten Drehimpulsquantenzahlen gefunden:

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \sum_l \frac{2l+1}{(2\pi)^{3/2}} i^l P_k(\hat{k}\hat{x}) j_l(kr). \quad (156)$$

Wir betrachten jetzt wieder die T -Matrix. Für die Streuamplitzude gilt gemäß (144):

$$\begin{aligned} f(\vec{k}'; \vec{k}) &= -\frac{1}{4\pi} 2m(2\pi)^3 \langle \vec{k}' | \mathbf{T} | \vec{k} \rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} 2m(2\pi)^3 \sum_{l;m;l'm'} \int_0^\infty \int_0^\infty dE' \langle \vec{k}' | E'l'm' \rangle T_l(E) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ &\quad \delta(E - E') \langle Elm | \vec{k} \rangle. \end{aligned} \quad (157)$$

Dabei haben wir (143) benutzt. Mit (150) ergibt sich daraus

$$f(\vec{k}'; \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi k} (2\pi)^3 \sum_{l;m} T_l \left(\frac{k^2}{2m} \right) Y_l^m(\hat{k}') Y_l^{m*}(\hat{k}) = -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{l;m} T_l \left(\frac{k^2}{2m} \right) Y_l^m(\hat{k}') Y_l^{m*}(\hat{k}). \quad (158)$$

Legen wir jetzt das Koordinatensystem so, daß sich die einfallende Welle in z -Richtung bewegt, folgt

$$Y_l^m(\hat{k}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0}, \quad (159)$$

denn wenn \vec{k} in z -Richtung liegt, kann Y nicht von ϕ abhängen, d.h. m muß 0 sein. Der Wert für $m = 0$ folgt aus der Beziehung (111) und $P_l(1) = 1$. Setzt man dies in (158) ein, folgt

$$f(\vec{k}; \vec{k}') =: f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \quad \text{mit} \quad f_l(k) = -\frac{\pi T_l(E)}{k}, \quad \cos \theta = \hat{\mathbf{k}}' \hat{\mathbf{k}}. \quad (160)$$

Der Winkel θ ist dabei der Winkel zwischen der Richtung des einfallenden Teilchenstrahls und der Beobachtungsrichtung, also der **Streuwinkel**. f_l heißt **Partialwellenamplitude**. Die Bedeutung dieser Größe wird sofort deutlich, wenn wir unsere Ergebnisse in (89) einsetzen:

$$\langle \vec{x} | \Psi^+ \rangle \cong_{r \rightarrow \infty} \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos \theta)}{2ik} \left\{ [1 + 2ik f_l(k)] \frac{\exp(ikr)}{r} - \frac{\exp[-i(kr - l\pi)]}{r} \right\}, \quad (161)$$

d.h. f_l gibt die Änderung der l -ten Partialwelle aufgrund des Streupotentials an. Es wird auch deutlich, daß sich nur die auslaufenden Anteile ändern, wie es aufgrund der Verwendung der retardierten Greenfunktion auch sein muß. Aus dieser Gleichung läßt sich auch unmittelbar die Streumatrix ablesen. Dies ist die Amplitude, die vor der auslaufenden Kugelwelle steht, denn die S -Matrix verbindet in- und out-Zustände gemäß (75). Es folgt also

$$S_l(k) = 1 + 2ik f_l(k) = \exp(2i\delta_l) \quad \text{mit} \quad \delta_l \in \mathbb{R}. \quad (162)$$

Letzteres gilt wegen der in Abschnitt 1 nachgewiesenen Unitarität der S -Matrix. δ_l heißt **Streu-phase** der l -ten Partialwelle. Der Zusammenhang zwischen Streuphase und Streuamplitude läßt sich in mehreren Varianten aufschreiben und folgt durch Auflösen von (162) nach f_l :

$$f_l = \frac{S_l - 1}{2ik} = \frac{\exp(2i\delta_l) - 1}{2ik} = \frac{\exp(i\delta_l) \sin \delta_l}{k} = \frac{1}{k \cot \delta_l - ik}. \quad (163)$$

Dabei handelt es sich um einfache Umformungen der Winkelfunktionen bzw. Exponentialfunktionen. Die Streuamplitude schreibt sich damit auch in der Form

$$f(\theta) = \sum_l \frac{2l+1}{k} \exp(i\delta_l) \sin \delta_l P_l(\cos \theta). \quad (164)$$

3.4 Der Streuquerschnitt

Die wichtigste physikalisch relevante Größe ist der differentielle Streuquerschnitt, der ein Maß für die Streuwahrscheinlichkeit für ein Teilchen in ein bestimmtes Raumwinkelement ist. Die Definition des Streuquerschnittes läßt sich am einfachsten verbal formulieren:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Zahl der in } d\Omega \text{ pro Zeiteinheit gestreuten Teilchen}}{\text{Fluß der einlaufenden Teilchen}}. \quad (165)$$

Der Fluß ist dabei die Zahl der pro Zeiteinheit durch eine Flächeneinheit hindurchströmenden Teilchen. Die verbal gegebene Formulierung läßt sich im Wellenbild sofort durch die vermöge der Wellenfelder definierten Ströme (es sind dies Noetherströme zur Phaseninvarianz) definieren:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 \|\vec{j}_{\text{Streu}}\| d\Omega}{\|\vec{j}_{\text{ein}}\|}. \quad (166)$$

Dabei wird der Teilchenstrom als Noetherstrom bzgl. der Phaseninvarianz definiert. Die Phaseninvarianz hat bekanntlich die Erhaltung der Normierung der Wellenfunktion während der quantenmechanischen Zeitentwicklung (Unitarität des Zeitentwicklungsoperators) zur Folge. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion ist aber physikalisch als normierte Teilchendichte zu interpretieren. Dies wird sofort klar, wenn man die Wahrscheinlichkeitsdeutung der Wellenfunktion benutzt und sich viele stochastisch unabhängige Teilchen vorstellt. Dann ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion multipliziert mit der Anzahl der Teilchen im Limes sehr großer Zahlen die Teilchendichte. Somit ist der Strom der normierten Wellenfunktion also ein normierter Teilchenstrom. Die Normierung fällt aber bei (166) heraus. Damit haben wir

$$\vec{j} = \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\nabla}{im} \Psi \right) \Rightarrow \vec{j}_{\text{ein}} = \frac{\vec{k}}{(2\pi)^3 m}; \quad \mathbf{j}_{\text{streu}} \underset{r \rightarrow \infty}{\cong} \frac{1}{r^2} \frac{k \hat{r}}{(2\pi)^3 m} |f(\theta)|^2. \quad (167)$$

Setzt man die Ströme in (166) ein, findet man

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2. \quad (168)$$

Es ist weiter klar, daß es bei kugelsymmetrischen Potentialen sinnvoll ist, Streuquerschnitte für die einzelnen Partialwellen anzugeben. Dabei wird ein Teilchenstrahl in einem definierten Drehimpulszustand zur Streuung gebracht.

4 Analytizitätseigenschaften der Radialwellenfunktionen

4.1 Der $l=0$ -Kanal

Wir wollen in diesem Abschnitt ausführlich die Streuung von Partialwellen zum Drehimpulsquadratenwert $l = 0$ betrachten. Die benutzten analytischen Betrachtungen lassen sich dann unten schnell auf Werte $l > 0$ übertragen. Diese Betrachtung setzt die Behandlung des Streuproblems in der Ortsdarstellung voraus. Dadurch gewinnt man nämlich gegenüber der abstrakten Hilbertraumdarstellung das Werkzeug der analytischen Funktionen. Weiter ist klar, daß wir uns jetzt auf das Studium der Radialwellengleichung (116) beschränken können, weil wir den Streukanal zum Drehimpulsquadratenwert $l=0$ fest gewählt haben und somit der Winkelanteil

vollständig abseparieren können, vgl. (102). Damit haben wir das Problem der Streuung auf das Studium der gewöhnlichen Differentialgleichung (116) reduziert. Wir sehen weiter das Problem nicht in Abhängigkeit von der Energie E , sondern von der Wellenzahl k , wobei $E = k^2/(2m)$ gilt. Auch dies hat analytische Vorteile.

Wir betrachten also die Radialgleichung

$$-u'' + \frac{l(l+1)}{r^2}u + Vu = k^2u. \quad (169)$$

Dabei steht hier und im folgenden ' für die Ableitung nach r . Für $l = 0$ reduziert sich dies auf die Gleichung

$$u'' + (k^2 - V)u = 0. \quad (170)$$

Es wird stets vorausgesetzt, daß das Potential den folgenden Bedingungen genügt:

$$\int_0^\infty r|V(r)|dr < \infty, \quad (171)$$

$$\int_0^\infty r^2|V(r)|dr < \infty. \quad (172)$$

Es sei betont, daß damit das Coulombpotential aus der Betrachtung ausscheidet. Es gehört aber ohnehin zu den seltenen Fällen, die am übersichtlichsten mit Hilfe des abstrakten Hilbertraumformalismus unter Ausnutzung der dynamischen $O(4)$ -Symmetrie behandelt werden können.

Eine Lösung g von (170) heißt regulär, wenn $g(0) = 0$ ist. Wir betrachten die reguläre Lösung von (170) mit den Randbedingungen

$$\Phi(k; 0) = 0; \quad \Phi'(k; 0) = 1. \quad (173)$$

Die zweite Gleichung kann in der Form

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} \Phi(k; r) = 1 \quad (174)$$

geschrieben werden. Für $k \in R$ ist Φ reell, weil (170) eine reelle Differentialgleichung ist und durch (173) reelle Randbedingungen gestellt sind. Da weiterhin (170) nur von k^2 abhängt, ist

$$\Phi(-k; r) = \Phi(k; r). \quad (175)$$

Da die Randbedingungen unabhängig von k sind, ist Φ für festgehaltenes r eine analytische Funktion des Parameters k . Aus dem Schwarzschen Spiegelungsprinzip folgt

$$\Phi(k^*; r) = \Phi^*(k; r). \quad (176)$$

Wir suchen weiter zwei irreguläre Funktionen mit

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \exp(\pm ikr) f_\pm(\pm k; r) = 1. \quad (177)$$

Daß sowohl reguläre als auch irreguläre Lösungen mit den Randbedingungen (173) bzw. (177) existieren, sieht man daraus, daß für $r \rightarrow 0$ bzw. $r \rightarrow \infty$ das Potential schneller verschwindet als die übrigen Terme in (170) (das gilt auch allgemein für (169)). Damit folgt, daß asymptotisch die

freien Gleichungen gelten und die reguläre Lösung der sphärischen Besselfunktion, die irregulären Lösungen den Hankelfunktionen (jeweils mit r multipliziert) entsprechen.

Wir zeigen jetzt, daß die irregulären Lösungen, die (177) erfüllen, in folgenden Bereichen der k -Ebene analytisch sind: f_+ für $\text{Im } k < 0$, f_- für $\text{Im } k > 0$.

Zum Beweis sei

$$g(k; r) = \exp(ikr)f_+(k; r) \quad (178)$$

Da f_+ der Differentialgleichung (170) genügt, folgt für g die Differentialgleichung

$$g'' - 2ikg' = Vg; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} g(k; r) = 1. \quad (179)$$

Die Randbedingung ergibt sich dabei unmittelbar aus (177). Wir wollen jetzt g mit Hilfe einer Integralgleichung bestimmen, die diesem Randwertproblem äquivalent ist:

$$g(k; r) = \int_r^\infty D_k(r' - r)U(r')g(k; r')dr' + 1. \quad (180)$$

Diese Integralgleichung ist äquivalent zur Differentialgleichung (10) mit der dort angegebenen Randbedingung an g , vorausgesetzt wir finden die Funktion D_l . Um uns von der unteren Grenze des Integrals zu befreien, setzen wir

$$G_k(r' - r) = D_k(r' - r)\Theta(r' - r) \quad (181)$$

an. Ersetzen wir also D_k durch G_k , können wir im Integral die feste untere Grenze 0 wählen. Setzt man (181) in (180) ein und wendet (179) an, folgt für G die Greenfunktioneneigenschaft

$$G_k''(r' - r) + 2ikG_k'(r' - r) = \delta(r' - r). \quad (182)$$

Diese Gleichung läßt sich geschlossen lösen. Dazu setzen wir $\xi = r' - r$:

$$G_k''(\xi) + 2ikG_k'(\xi) = \delta(\xi). \quad (183)$$

Für $\xi > 0$ findet man sofort die Lösung

$$G_k(\xi) = \frac{B - A \exp(-2ik\xi)}{2ik}. \quad (184)$$

Für $\xi \rightarrow 0$ muß G_k regulär sein, damit die Integralgleichung überall wohldefiniert ist. Folglich ist $A=B$. Integriert man (183) um 0, ergibt sich weiter die Sprungbedingung

$$G_k'(\xi)|_{-0}^{+0} = 1. \quad (185)$$

Wegen (181) ist $G_k'(-0) = 0$, so daß man für G endgültig die Funktion

$$G_k(\xi) = \frac{1 - \exp(-2ik\xi)}{2ik}\Theta(\xi) \quad (186)$$

findet. Damit ergibt sich wegen (181):

$$D_k(\xi) = \frac{1 - \exp(-2ik\xi)}{2ik}. \quad (187)$$

Die Volterrasche Integralgleichung (180) soll jetzt mittels einer Piccard-Iteration gelöst werden. Folglich setzen wir an:

$$g_0(k; x) = 1; \quad g_n(k; x) = \int_r^\infty D_k(r' - r)g_{n-1}(k; r')dr'. \quad (188)$$

Dann ist

$$g(k; r) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(k; r) \quad (189)$$

eine Lösung von (180), also auch des Randwertproblems (179), für solche Werte von k , für die (189) gleichmäßig bzgl. r konvergiert. Konvergiert die Reihe sogar in einem bestimmten Gebiet $(k; R) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$ gleichmäßig, ist die Funktion analytisch in k , weil die Partialsummen von (189) vermöge der Iteration analytisch in k sind.

Wir beweisen jetzt, daß dies mindestens für $\text{Im} k < 0$ der Fall ist. Denn es gilt für $k = k_1 - ik_2$, wobei $k_2 > 0$ und $k_1 \in \mathbb{R}$ ist für $\xi > 0$

$$|D_k(\xi)| = \frac{1 - \exp(-2k_2\xi)}{|2k|} \quad (190)$$

Nun ist die rechts stehende Funktion von ξ konkav, monoton wachsend und besitzt in $\xi = 0$ die Steigung 1. Also ist

$$|D_k(\xi)| \leq \xi \text{ für } \xi > 0; \quad \text{Im } k < 0. \quad (191)$$

Also folgt

$$|g_n(k; r)| \leq \int_r^\infty |D_k(r' - r)V(r')g_{n-1}(k; r')|dr' \leq \int_r^\infty (r' - r)|V(r')g_{n-1}(k; r')|dr'. \quad (192)$$

Wegen (171) existiert die Funktion

$$X(r) = \int_r^\infty r'|V(r')|dr' < \infty \text{ für } r > 0. \quad (193)$$

Dann gilt

$$|g_n(k; r)| \leq \frac{X^n(r)}{n!} \leq \frac{X^n(0)}{n!} \quad (194)$$

Das zeigt man durch vollständige Induktion: Wegen $g_0(k; r) \equiv 1$ gilt aufgrund von (192)

$$|g_1(k; r)| \leq \int_r^\infty (r' - r)|V(r')|dr' \leq \int_r^\infty r'|V(r')|dr' = X(r) \leq X(0). \quad (195)$$

Das ist die Behauptung für $n = 1$. Weiter gilt, falls die Behauptung für n wahr ist:

$$|g_{n+1}(k; r)| \leq \int_r^\infty r' \left| V(r') \frac{X^n(r')}{n!} \right| dr', \quad (196)$$

wobei die Behauptung für n in (192) angewandt wurde. Substituiert man in dem Integral $u = X(r')$ ist wegen $X'(r') = -r'|V(r')|$:

$$|g_{n+1}(k; r)| \leq - \int_{X(r)}^0 \frac{u^n}{n!} du = \frac{1}{(n+1)!} X^{n+1}(r). \quad (197)$$

Das ist die Behauptung (194) für $n + 1$. Damit ist (194) aufgrund vollständiger Induktion bewiesen. Damit haben wir aber auch schon die gleichmäßige Konvergenz der Reihe (189) in dem erwähnten Gebiet bewiesen, denn die Reihe (189) wird aufgrund von (194) durch die Reihe zu $\exp(X(0))$ majorisiert. Damit ist $g(k; r)$ analytisch für $\text{Im } k < 0$, und wegen (178) trifft dies auch auf f_+ zu. Für f_- läßt sich dieser Beweis genau analog für $\text{Im } k > 0$ führen.

Falls das Potential sogar schneller als eine Exponentialfunktion abfällt, d.h.

$$\exists \mu > 0 : \quad I(\mu) = \int_0^\infty \exp(\mu r) |V(r)| dr < \infty, \quad (198)$$

dann ist f_+ auch analytisch für $\text{Im } k < \mu/2$ bzw. f_- für $\text{Im } k > -\mu/2$.

Sei $0 < \mu_1 < \mu$ und $\text{Im } k \leq \mu_1/2$. Dann beweist man wie eben, daß

$$\exists C > 0 : \quad |D_k(\xi)| \leq \xi \exp(\mu_1 \xi) y \leq C \exp(\mu \xi) \text{ für } \xi > 0. \quad (199)$$

Mit

$$Y(r) = \int_r^\infty \exp(\mu r') |V(r')| dr' \quad (200)$$

findet man wie oben durch vollständige Induktion

$$|g_n(k; r)| \leq \frac{[CY(r)]^n}{n!} \leq \frac{[CI(\mu)]^n}{n!}, \quad (201)$$

und der Rest des Beweises folgt ebenfalls wie oben.

Machen wir jetzt die noch schärfere Annahme, daß $\text{supp}(V)$ kompakt ist. Dabei ist der Träger $\text{supp}(V)$ durch

$$\text{supp}(V) = \overline{\{r > 0 | V(r) \neq 0\}} \quad (202)$$

definiert. Dabei bedeutet der Strich über der Menge den topologischen Abschluß derselben. Dann ist (195) sicher für alle $\mu > 0$ erfüllt, und damit sind die Funktionen f_\pm ganze Funktionen von k .

Wir lassen nun wieder alle Zusatzannahmen über das Potential fallen (natürlich behalten wir (171) und (172) bei). In einem Bereich der komplexen k -Ebene, der im Analytizitätsbereich von f_\pm liegt und ein Stück der reellen k -Achse enthält, gilt aufgrund von (176):

$$f_-^*(-k^*; r) = f_+(k; r). \quad (203)$$

Außer für $k = 0$ sind nun die f_\pm linear unabhängige Funktionen. Daher muß es Koeffizienten $a(k)$ und $b(k)$ geben, so daß

$$\Phi(k; r) = a(k) f_-(-k; r) + b(k) f_+(k; r) \quad (204)$$

ist. Φ ist durch die Angabe von Φ und Φ' an einer festen Stelle r_0 eindeutig festgelegt, denn dann gilt

$$\Phi(k; r_0) = a(k) f_-(-k; r_0) + b(k) f_+(k; r_0); \quad \Phi'(k; r_0) = a(k) f'_-(-k; r_0) + b(k) f'_+(k; r_0), \quad (205)$$

und daraus folgt

$$\begin{aligned} a(k) W[f_-(-k; r_0); f_+(k; r_0)] &= W[\Phi(k; r_0); f_+(k; r)], \\ b(k) W[f_-(-k; r_0); f_+(k; r_0)] &= W[f_-(-k; r_0); \Phi(k; r_0)]. \end{aligned} \quad (206)$$

Dabei bezeichnet $W[f(r); g(r)]$ die Wronskideterminante der Funktionen f und g genommen an der Stelle r :

$$W[f(r); g(r)] = \det \begin{pmatrix} f(r) & g(r) \\ f'(r) & g'(r) \end{pmatrix}. \quad (207)$$

Da f_- und f_+ für $k \neq 0$ linear unabhängig und Lösungen einer linearen Differentialgleichung sind, ist $W[f_-; f_+]$ von 0 verschieden, und $a(k)$ und $b(k)$ aufgrund von (206) eindeutig bestimmt. Wir definieren jetzt die **Jost-Funktionen**:

$$\Delta_{\pm}(\pm k) = W[f_{\pm}(\pm k; r); \Phi(k; r)]. \quad (208)$$

Wir zeigen jetzt, daß diese Funktionen unabhängig von r sind. Dazu verwenden wir einen allgemeinen Satz über die Wronskideterminante. Gegeben sei eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

$$f'' + p_1 f' + p_2 f = 0. \quad (209)$$

Für die Wronskideterminante zweier Lösungen dieser Gleichung gilt dann

$$W'[f(r); g(r)] = \det \begin{pmatrix} f(r) & g(r) \\ f''(r) & g''(r) \end{pmatrix} = -p_1(r)W[f(r); g(r)]. \quad (210)$$

Dabei haben wir uns der Ableitungsregel für Determinanten bedient und die Differentialgleichung (209) benutzt. Ist jetzt p_1 integrierbar, so ist folglich

$$W[f(r); g(r)] = W[f(r_0); g(r_0)] \exp \left[- \int_{r_0}^r p_1(r') dr' \right]. \quad (211)$$

Im Falle unserer Differentialgleichung (170) ist $p_1 \equiv 0$, also W für zwei Lösungen von (170) stets unabhängig von r :

$$W[f(r); g(r)] = W[f(r_0); g(r_0)] = \text{const.} \quad (212)$$

Somit sind also die Jostfunktionen (208) unabhängig von r .

Diese Unabhängigkeit der Wronskideterminante zweier Lösungen der DGL (170) von r gestattet es auch, die Determinante auf der linken Seite von (206) auszurechnen. Wegen (177) ist nämlich

$$\lim_{r \rightarrow \infty} W[f_+(k; r); f_-(-k; r)] = 2ik, \quad (213)$$

und wegen der Unabhängigkeit von r folgt dann schließlich

$$\Phi(k; r) = \frac{1}{2ik} [\Delta_+(k) f_-(-k; r) - \Delta_-(k) f(k; r)]. \quad (214)$$

Aus den Randbedingungen (173) der regulären Funktion Φ folgt

$$\Delta_{\pm}(\pm k) = f_{\pm}(\pm k; 0). \quad (215)$$

Die Jostfunktionen erfüllen also auch die Beziehungen

$$\Delta_-^*(-k^*) = \Delta_+(k). \quad (216)$$

Aus (214) leitet man mit (178) und (180) sofort

$$\Delta_+(k) = 1 + \int_0^{\infty} D_k(r) V(r) \exp(ikr) f(k; r) dr \quad (217)$$

her. Falls $\text{Im } k < 0$, ist

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty; \text{Im } k < 0} \Delta_+(k) = 1. \quad (218)$$

Es gilt nämlich nach den obigen Betrachtungen

$$\int_0^\infty D_k(r)V(r) \exp(ikr)f(k;r)dr = \int_0^\infty D_k(r)V(r)g(r)dr \xrightarrow{k \rightarrow \infty; \text{Im } k < 0} 0. \quad (219)$$

Wir untersuchen jetzt die Bedeutung der Nullstellen von Δ_+ in der unteren k -Halbebene:

Die Energien der gebundenen Zustände sind durch die Nullstellen der Jostfunktionen auf der negativen imaginären Achse der k -Ebene gegeben.

Sei also $\Delta_+(k_0) = 0$, d.h. nach der Definition (208)

$$\Delta_+(k_0) = W[f(k_0;r); \Phi(k_0;r)] = 0. \quad (220)$$

Da f_+ und Φ beides Lösungen der Differentialgleichung (170) sind, sind die Funktionen somit linear abhängig, d.h. es gibt eine Konstante C , so daß

$$f_+(k_0;r) = C\Phi(k_0;r). \quad (221)$$

Da $\Phi(k_0;0) = 0$ und für große r f_+ asymptotisch $\exp(-ik_0r)$ ist, ist Φ für $\text{Im } k_0 < 0$ eine quadratintegrale Funktion, also in $L^2(0;\infty)$. Da aber Φ die Eigenwertgleichung (170) des Hamiltonoperators befriedigt, ist $E_0 = k_0^2/(2m)$ Eigenwert von \mathbf{H} . Da \mathbf{H} hermitesch ist, ist also $k_0^2 \in \mathbb{R}$ und folglich k_0 rein imaginär. Damit ist aber $\Phi(k_0, \cdot)$ in diesem Falle eine Eigenfunktion von \mathbf{H} , also Repräsentant eines gebundenen Zustands.

4.2 Beispiel: $l=0$ -Kanal für sphärisch symmetrische Potentialmulde

Wir betrachten jetzt zur Illustration der obigen Betrachtungen ein sehr einfaches exakt lösbares Beispiel, nämlich einen anziehenden Hardcore:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } r_0 \leq r < a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases} \quad \text{mit } a > 0; \quad V_0 > 0. \quad (222)$$

Dann ist (170) im Inneren, also für $r < a$:

$$u'' + (k^2 + V_0)u = 0 \quad (223)$$

mit den Lösungen

$$\forall 0 < r < a : f_\pm(\pm k;r) = \exp[\mp ir\kappa(k)] \quad \text{mit } \kappa(k) = \sqrt{k^2 + V_0}. \quad (224)$$

Für $r > a$ haben wir hingegen die freien Lösungen

$$\forall r > a : f_\pm(\pm k;r) = \exp(\mp ikr). \quad (225)$$

Wir müssen jetzt die Anschlußbedingungen erfüllen, d.h. f und f' müssen bei $r = a$ stetig sein. Weiter sind die Randbedingungen (177) zu erfüllen. Diese Forderungen ergeben den Ansatz

$$f_+(k;r) = \begin{cases} A \exp(-i\kappa r) + B \exp(i\kappa r) & \text{für } 0 < r < a \\ \exp(-ikr) & \text{für } r > a \end{cases} \quad (226)$$

Dabei ist κ an der Stelle k zu nehmen. Die Stetigkeitsforderungen an die Funktion und die Ableitung an der Stelle $r = a$ ergeben:

$$A = \frac{k + \kappa}{2\kappa} \exp[i(\kappa - k)a]; \quad B = A^*. \quad (227)$$

Damit ergibt sich die Jostfunktion vermöge (214) zu

$$\Delta_+(k) = \exp(-ika) \left[\cos(\kappa a) + \frac{ik}{\kappa} \sin(\kappa k) \right]. \quad (228)$$

Jetzt bestimmen wir die Nullstellen auf der negativ imaginären Achse. D.h. wir setzen $k = -ik_n$ mit $k_n > 0$ und suchen die Nullstellen der Jostfunktion (228):

$$\cos(\kappa_n a) = -k_n \sin(\kappa_n a) \text{ mit } \kappa_n = \sqrt{V_0 - k_n^2}. \quad (229)$$

Das sind tatsächlich die Bedingungen an die gebundenen Energieeigenwerte des Potentialtopfs.

4.3 Der allgemeine Fall $l > 0$

Wir können uns jetzt relativ kurz fassen um den allgemeinen Fall $l > 0$ zu behandeln. Die Grundidee ist dieselbe. Es werden zwei irreguläre linear unabhängige Lösungen gesucht und mit einer regulären Lösung verglichen. Der einzig nichttriviale Beweisschritt lag in der Lösung der Randwertaufgabe der irregulären Lösungen. Dabei wurde vermittels einer Greenfunktion eine dem Randwertproblem äquivalente Volterrasche Integralgleichung aufgestellt und diese mittels Picarditeration gelöst. Die Durchführung dieses Programms erfordert aber wesentlich trickreichere Abschätzungen beim Beweis der gleichmäßigen Konvergenz der Picarditeration. Im Gegensatz zum Fall $l = 0$ wird dann auch die Bedingung (172) für das Potential erforderlich, damit die irregulären Lösungen analytisch sind.

Im einzelnen sind die Ergebnisse dieser Betrachtung die folgenden (zur Durchführung sei auf [[New60]] und die dort zitierten Arbeiten verwiesen): Statt (177) fordert man für die irregulären Funktionen die Randbedingungen

$$\exp(\pm ikr) f_{l\pm}(\pm k; r) \cong_{r \rightarrow \infty} i^l. \quad (230)$$

Dann folgt wegen der Realität der Differentialgleichung (169)

$$f_{l-}^*(-k; r) = (-1)^l f_{l+}(k; r). \quad (231)$$

Jetzt lautet die Greensche Funktion (statt 187):

$$\begin{aligned} D_l(k; r; r') &= \frac{1}{k} [u_l(kr')v_l(kr) - u_l(kr)v_l(kr')] \\ &= \frac{i(-1)^l}{2k} [w_l(kr)w_l(-kr) - w_l(-kr)w_l(kr')] \end{aligned} \quad (232)$$

$$\text{mit } u_l(z) = zj_l(z); \quad v_l(z) = zn_l(z); \quad w_l(z) = -izh_l^{(2)}(z).$$

Statt (180) haben wir die Integralgleichung

$$f_l(k; r) = w_l(kr) - \int_r^\infty D_l(k; r; r') V(r') f_l(k; r') dr'. \quad (233)$$

Über Abschätzungen, die um einiges subtiler sind als im Fall $l = 0$, findet man wie oben, daß $f_{l+}(k)$ in der unteren k -Halbebene analytisch in k ist, $f_{l-}(-k)$ in der oberen. Für die Analytizität benötigt man jetzt im Gegensatz zum Fall $l = 0$ auch die Bedingung (172) an das Potential. Auch die Jostfunktionen werden analog zum Fall $l = 0$ eingeführt:

$$\Delta_{l\pm}(k) = k^l W[f_{l\pm}(\pm k; r); \Phi_l(k; r)]. \quad (234)$$

Aus der Verallgemeinerung von (204) und (206) folgt für die reguläre Lösung

$$\Phi_l(k; r) \underset{r \rightarrow \infty}{\cong} \left(\frac{i}{k}\right)^{l+1} [\Delta_{l-}(-k) \exp(-ikr) - (-1)^l \Delta_{l+}(k) \exp(ikr)]. \quad (235)$$

Ein Vergleich mit (161-162) zeigt, daß

$$S_l(k) = \frac{\Delta_{l+}(k)}{\Delta_{l-}(-k)} \quad (236)$$

ist. Für reelle k folgt ebenso wie im Fall $l = 0$:

$$\Delta_{l-}^*(-k) = \Delta_{l+}(k). \quad (237)$$

Daraus folgt die Unitarität der S -Matrix:

$$S_l^*(k) = S_l(-k) = \frac{1}{S_l(k)} \Rightarrow |S_l(k)| = 1. \quad (238)$$

Damit ergibt sich die physikalische Wellenfunktion zu

$$\Psi_l(k; r) = \frac{k^{l+1}}{\Delta_{l-}(-k)} \Phi_l(k; r). \quad (239)$$

Aus (236) folgt, daß

$$\Delta_{l+}(k) = |\Delta_{l+}(k)| \exp[i\delta_l(k)], \quad (240)$$

wobei $\delta_l(k)$ die durch (162) definierte Streuphase ist. Damit sind alle physikalisch relevanten Größen mit Hilfe der Jostfunktionen berechenbar.

Wir betrachten weiter die Multiplizität der Nullstellen in der unteren k -Halbebene, die wie im Fall $l = 0$ gebundenen Zuständen entsprechen. Multipliziert man (169) zum Wert k mit $u(r) = \Phi_l(k; r)$ mit $\Phi_l(k'; r)$ mit derselben Gleichung bei Vertauschung dieser beiden Funktionen, folgt

$$\frac{d}{dr} W[\Phi_l(k; r); \Phi_l(k'; r)] = (k^2 - k'^2) \Phi_l(k; r) \cdot \Phi_l(k'; r). \quad (241)$$

Für eine negativ imaginäre Nullstelle der Jostfunktion folgt wieder, daß $f_{l+} = C\Phi_l$ ist und dies eine L^2 -Funktion ist, also ein gebundener Zustand vorliegt. Ferner gilt dann

$$\frac{d\Delta_{l+}(k_0)}{dk} = \frac{k_0^l}{C} W[\dot{f}_{l+}(k_0; r); f_{l+}(k_0; r)] + k_0^l c W[\Phi_l(k_0; r); \dot{\Phi}_l(k_0; r)], \quad (242)$$

wobei der Punkt die Ableitung nach k bedeutet. Die rechte Seite dieser Gleichung läßt sich mittels Differentiation von (241) nach k und Setzung $k = k' = k_0$ auswerten. Nach Integration von 0 bis ∞ und aus der Tatsache, daß die Jostfunktion unabhängig von r ist, folgt

$$\frac{d}{dk} \Delta_{l+}(k_0) = -2ck_0^{l+1} \int_0^\infty dr \Phi_l^2(k_0; r). \quad (243)$$

Da weiter wegen (231) für rein imaginäres k Φ_l reell ist, ist die rechte Seite dieser Gleichung von 0 verschieden, also die negativ imaginäre Nullstelle der Jostfunktion einfach.

Für $l = 0$ folgt aus (230), daß $\Phi_l(0; r)$ keine L^2 -Funktion ist, also $\Delta_0(0) = 0$ keinen gebundenen Zustand zur Energie $k^2/(2m) = 0$ bedeutet. Im Gegensatz dazu zeigt ein Blick auf (234), daß für $l \neq 0$ $\Delta_l(0) = 0$

$$h_l(0; k) = C\Phi_l(0; r) \text{ mit } h_l(0; r) := k^l f_{l+}(0; r) \quad (244)$$

zur Folge hat. Die oben ausgelassene genaue Analyse des asymptotischen Verhaltens der Wellenfunktionen für $l \neq 0$ zeigt, daß dies einen gebundenen Zustand bedeutet. Eine weitere Rechnung, die ebenfalls auf diesen Ergebnissen beruht, zeigt, daß

$$\Delta_{l+}(k) = \begin{cases} O(k) & \text{für } l = 0 \\ O(k^2) & \text{für } l \geq 1 \end{cases} ; \quad \frac{1}{\Delta_{l+}(k)} = \begin{cases} O\left(\frac{1}{k}\right) & \text{für } l = 0 \\ O(k^2) & \text{für } l \geq 1 \end{cases} \quad (245)$$

ist. Damit ist die evtl. vorhandene Nullstelle von Δ_{l+} bei $k = 0$ im Falle $l = 0$ einfach bzw. im Falle $l \neq 0$ zweifach. Da die Jostfunktion in der unteren k -Halbebene analytisch ist, besitzt die Menge ihrer Nullstellen dort keinen Häufungspunkt, und das ist auch nicht bei $k = 0$ oder $k = \infty$ der Fall. Folglich besitzt die Jostfunktion in der unteren k -Halbebene auch nur endlich viele Zustände, d.h. der Hamiltonoperator besitzt für jeden Wert von l nur endlich viele negative Eigenwerte. Im Falle $l \neq 0$ ist auch $k = 0$ ein Eigenwert, falls $\Delta_{l+}(0) = 0$ ist.

Wir wenden jetzt die bekannte Regel zum Zählen der Nullstellen einer analytischen Funktion an. Infolge des asymptotischen Verhaltens (245) können wir dazu die folgende Kontur verwenden:

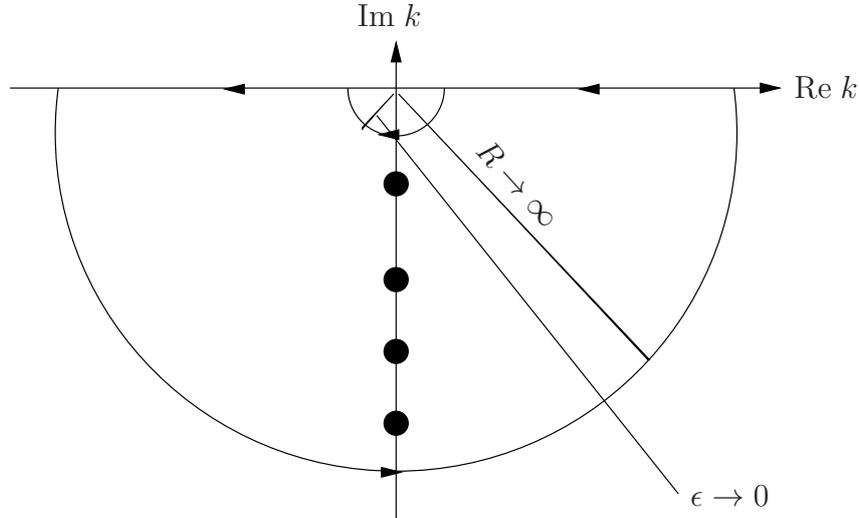


Abbildung 3: Zum Levinsontheorem

Dabei wird die eventuelle Nullstelle bei $k = 0$ durch den kleinen Halbkreis mit Radius $\epsilon > 0$ ausgeschlossen. Dann ergibt eine Anwendung des Residuensatzes zunächst

$$\oint_C \frac{d}{dk} \ln[\Delta_{l+}(k)] dk = 2\pi i n_l. \quad (246)$$

Dabei ist n_l die Zahl der negativen Energieeigenwerte. Der Beitrag des kleinen Halbkreises mit $\epsilon > 0$ ist

$$\int_{-K_\epsilon} \frac{d}{dk} \ln[\Delta_{\pm}(k)] dk = -i\pi q. \quad (247)$$

Mit (237) und (240) folgt, weil der Beitrag des großen Kreises für $R \rightarrow \infty$ verschwindet

$$\delta_l(0) - \delta_l(\infty) = \pi \left(n_l + \frac{q}{2} \right) = \begin{cases} \pi \left(\frac{n_l+1}{2} \right) & \text{für } l = 0 \text{ und } f_0(0) = 0 \\ \pi n_l & \text{sonst} \end{cases} . \quad (248)$$

Dabei ist n_l' die Anzahl der gebundenen Zustände einschließlich eines eventuellen Eigenzustandes $E = 0$. Das ist das **Levinson-Theorem**.

Wir bemerken noch, daß man diese Betrachtungen auch mit der Streumatrix als Funktion der Energie durchführen kann. Als Funktion der Energie zeigen die eben durchgeführten Betrachtungen, daß sie eine auf einer zweiblättrigen Riemannschen Fläche mit Verzweigungspunkt $E=0$ analytische Funktion ist. Sie ist meromorph auf dem physikalischen Blatt, das durch $\text{Im}k > 0$ definiert ist. Die Polstellen auf der negativ reellen Achse des physikalischen Blattes entsprechen dabei den gebundenen Energieeigenzuständen zu negativ reellen Eigenwerten. Auf der positiv reellen Achse verläuft der Schnitt der Riemannschen Fläche. Dies entspricht auch den oben besprochenen analytischen Eigenschaften der Greenfunktionen in der Energiedarstellung.

A Das Additionstheorem der Kugelfunktionen

Wir beweisen den folgenden Satz

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta'; \varphi') Y_l^m(\theta; \varphi) \quad (249)$$

$$\text{mit } \cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta' \sin \theta \cos(\varphi - \varphi'),$$

den man als **Additionstheorem der Kugelfunktionen bezeichnet**.

Zum Beweis gehen wir von der folgenden Skizze aus, aus der man unmittelbar die Beziehung für $\cos \gamma$ abliest. Wir denken uns nun \vec{n}' als fest und \vec{n} als variabel, sehen also \vec{n}' als neue Polarrichtung eines Koordinatensystems an. Dann gilt wegen der Vollständigkeit der Kugelfunktionen

$$P_l(\cos \gamma) = \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m=-l'}^{l'} A_{l'm}(\theta'; \varphi') Y_{l'}^m(\theta; \varphi). \quad (250)$$

Wegen der Drehinvarianz des Laplaceoperators genügt $P_l(\cos \gamma)$ der Differentialgleichung für die Legendrepolynome:

$$\Delta_S P_l(\cos \gamma) + l(l+1)P_l(\cos \gamma) = 0 \Rightarrow P_l(\cos \gamma) = \sum_{m=-l}^l A_m(\theta'; \varphi') Y_l^m(\theta; \varphi), \quad (251)$$

denn wegen der Orthogonalität der Kugelfunktionen können nur Glieder mit $l' = l$ auftreten. Aus den Orthogonalitätsrelationen folgt weiter

$$A_m(\theta'; \varphi') = \int_S Y_l^{m*}(\theta; \varphi) P_l(\cos \gamma) dS. \quad (252)$$

Um diese Koeffizienten zu berechnen betrachten wir die Entwicklung einer beliebigen Funktion $g \in L^2(S)$:

$$g(\theta; \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} Y_l^m(\theta; \varphi). \quad (253)$$

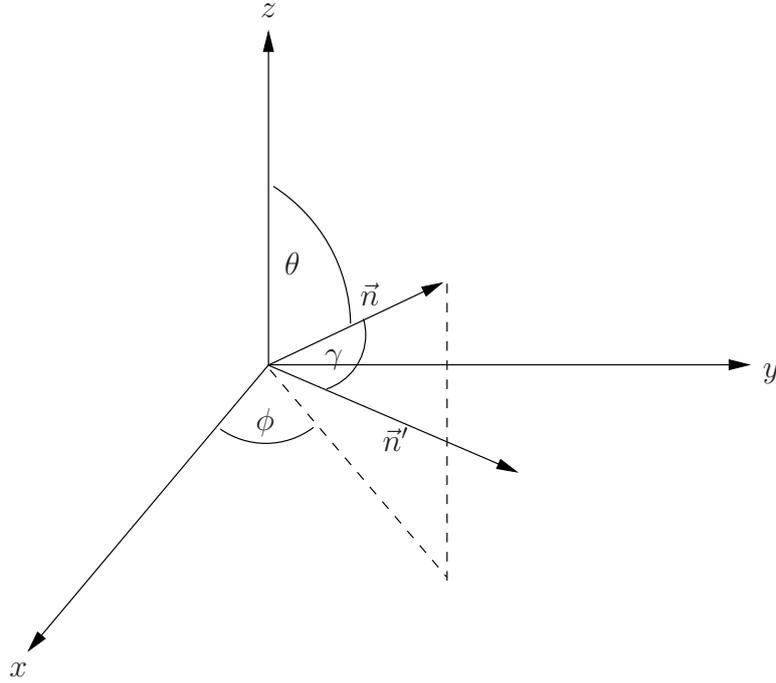


Abbildung 4: Zum Additionstheorem der Kugelflächenfunktion

Die Koeffizienten berechnen sich durch die verallgemeinerten Fourierintegrale:

$$A_{lm} = \int_S Y_l^{m*}(\theta; \varphi) g(\theta; \varphi) dS. \quad (254)$$

Für $\theta = 0$ hängt g nicht von φ ab, so daß alle Terme außer für $m = 0$ in der Entwicklung (253) verschwinden. Da ferner $P_l(1) = 1$ ist, folgt mit (111):

$$g(0; \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} A_{l0}; \quad A_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_S P_l(\cos \theta) g(\theta; \varphi) dS \quad (255)$$

Betrachten wir jetzt wieder (252), erkennen wir, daß wir diese Gleichung wie folgt umdeuten können: $A_m(\theta'; \varphi')$ ist der $m = 0$ -Koeffizient der Entwicklung von

$$g(\theta; \varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m*}(\theta; \varphi) \quad (256)$$

nach Kugelfunktionen für $\gamma = 0$. Wir haben also, weil in dieser Entwicklung nur l -Terme auftauchen können:

$$\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m*}(\theta; \varphi) = \sum_{m'=-l}^l B_{lm'} Y_l^{m'}(\gamma; \beta), \quad (257)$$

wobei β der zur Polarachse \vec{n}' gehörige Azimutwinkel sein soll. Aus (255) folgt dann, weil nur Glieder mit $l' = l$ beitragen:

$$B_{l0} = A_m(\theta'; \varphi') = \frac{4\pi}{2l+1} Y_l^{m*}(\theta; \varphi)|_{\gamma=0} = \frac{4\pi}{2l+1} Y_l^{m*}(\theta'; \varphi'). \quad (258)$$

Damit ist aber (249) bewiesen.

Literaturverzeichnis

- [New60] R. Newton. Analytic Properties of Radial Wave Functions. *J. Math. Phys* **1** (1960) 319
- [Sak94] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. 2nd edn. Addison-Wesley Publishing Company, (1994)