

Kapitel 4

Störungstheorie zeitabhängiger Prozesse

Die meisten physikalischen Übergänge sind nicht stationär, sondern laufen in einem endlichen Zeitintervall ab, d.h. man muß die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung bzw. zeitabhängige Operatoren zur Beschreibung des Systems benutzen. Wichtige Beispiele sind:

1. Emission und Absorption von Quanten (Licht etc.),
2. Zerfälle von Teilchen,
3. Streuprozesse.

Einschaltvorgang

In der Regel wird die für die betrachteten Vorgänge maßgebliche Wechselwirkung $V(t)$ erst zu einer Zeit $t > -T$, mit $T \gg 0$, wirksam und ist später für $t > T$ nicht mehr spürbar, d.h. wir haben:

$$V(t) = 0 \quad \text{für} \quad |t| > T \gg 0 .$$

Äquivalent hierzu kann man auch einen langsamen Einschaltvorgang

$$V(t) \equiv V_\varepsilon(t) = V_0 e^{-\varepsilon|t|} e^{-i\omega t} \quad \text{mit} \quad 0 < \varepsilon \ll 1 ,$$

wählen. Hierbei ist ω die Frequenz der Störung, z.B. die des Lichtfeldes.

4.1 Schrödinger-Bild

Zeitunabhängiger Hamilton-Operator

Die infinitesimale Zeitentwicklung eines Schrödinger-Zustandes $\psi_S(t)$ ist durch

$$i\hbar \partial_t \psi_S(t) = H \psi_S(t)$$

gegeben. Falls der Hamilton-Operator H nicht von der Zeit t abhängt, so ist die Zeitentwicklung von $\psi_S(t_0)$ zur Zeit t_0 nach $\psi_S(t)$ zur Zeit $t > t_0$ (siehe Kap. 3.1) durch die unitäre Trans-

formation

$$\begin{aligned} \Psi_S(t) &= U(t, t_0) \Psi_S(t_0) \\ U(t, t_0) &= e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \\ U(t_0, t_0) &= 1 \end{aligned} \quad H(t) \equiv H,$$

gegeben.

Zeitabhängiger Hamilton-Operator

Für den allgemeinen Fall $H = H(t)$ finden wir aus der Definition des Zeitenwicklungsoperators, $\Psi_S(t) = U(t, t_0) \Psi_S(t_0)$, und der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \partial_t \Psi_S(t) = i\hbar \partial_t U(t, t_0) \Psi_S(t_0) = H(t) \Psi_S(t) = H(t) U(t, t_0) \Psi_S(t_0),$$

für $U(t, t_0)$ die Differentialgleichung

$$i\hbar \partial_t U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0),$$

welche als Grundlage für weitere Darstellungen des Zeitentwicklungsoperators dienen wird.

Integralgleichung für $U(t, t_0)$

Die Differentialgleichung für $U(t, t_0)$ ist zusammen mit der Anfangsbedingung $U(t_0, t_0) = 1$ zu der folgenden Integralgleichung für $U(t, t_0)$ äquivalent,

$$U(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0),$$

wie man leicht durch Differentiation nachprüfen kann.

Neuman-Reihe

Die Lösung der Integralgleichung lässt sich iterativ in Form einer sogenannten *Neumann'schen Reihe* angeben: Man setzt

$$\begin{aligned} U^{(0)}(t, t_0) &= 1, \\ U^{(1)}(t, t_0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) U^{(0)}(t_1, t_0), \\ U^{(2)}(t, t_0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_2 H(t_2) U^{(1)}(t_2, t_0), \\ &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_2 H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_1), \end{aligned}$$

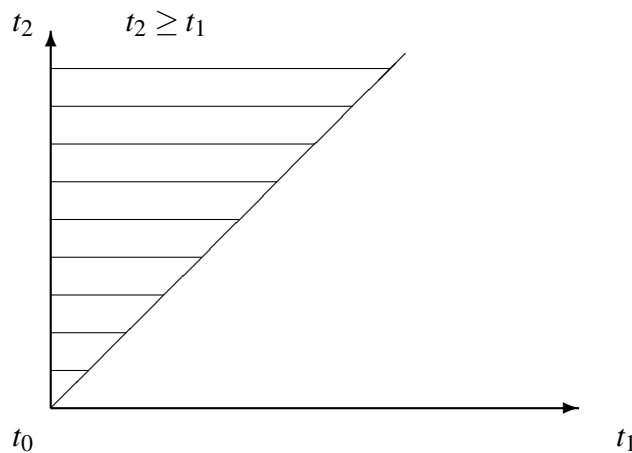
also allgemein für $U^{(n)}(t, t_0)$:

$$U^{(n)}(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_n H(t_n) U^{(n-1)}(t_n, t_0),$$

so daß

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t \geq t_n \geq \dots \geq t_1 \geq t_0} dt_n \cdots dt_1 H(t_n) \cdots H(t_1).$$

Unter dem Integral ist die Reihenfolge der $H(t_i)$ wichtig, da i.a. $H(t_2)H(t_1) \neq H(t_1)H(t_2)$. Der Teilraum, über den integriert wird, sieht für $n = 2$ so aus:



Zeitordnungs-Operator

Die Integration über t_1 und t_2 etc. in der Neumann'schen Reihe läßt sich durch die Einführung des sog. *Zeitordnungsoperators* T symmetrisieren. Er ist wie folgt definiert:

$$T\left(H(t_1)H(t_2)\right) \equiv \begin{cases} H(t_1)H(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ H(t_2)H(t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases}$$

Insbesondere gilt $T\left(H(t_1)H(t_2)\right) = T\left(H(t_2)H(t_1)\right)$ und somit

$$\int_{t_0}^t dt_2 H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_1) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t T\left(H(t_1)H(t_2)\right) dt_1 dt_2.$$

Mit der Stufenfunktion $\theta(t)$,

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t > 0, \\ 0 & \text{für } t < 0, \end{cases}$$

läßt sich der Zeitordnungsoperator auch als

$$T\left(H(t_1)H(t_2)\right) = \theta(t_1 - t_2)H(t_1)H(t_2) + \theta(t_2 - t_1)H(t_2)H(t_1),$$

schreiben. Allgemein gilt somit

$$T\left(H(t_1)\cdots H(t_n)\right) = \sum_{\text{Permut.}} \theta(t_{\alpha_1} - t_{\alpha_2}) \cdots \theta(t_{\alpha_{n-1}} - t_{\alpha_n}) H(t_{\alpha_1}) \cdots H(t_{\alpha_n}).$$

Der Zeitentwicklungsoperator spielt in allen störungstheoretischen Darstellungen eine fundamentale Rolle, insbesondere auch in der Theorie der *Green'schen Funktionen*, durch welche Meßprozesse in der Vielteilchentheorie dargestellt werden.

Formelle Darstellung der Neumann-Reihe

Mit Hilfe des Zeitordnungsoperators T lässt sich die Neumann-Reihe für den Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ formal wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t \cdots \int_{t_0}^t dt_1 \cdots dt_n T\left(H(t_1)\cdots H(t_n)\right) \\ &\equiv T\left(\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')\right\}\right). \end{aligned}$$

Diese Darstellung ist *formal*, da jede praktische Rechnung mit der ursprünglichen Definition durchgeführt werden muss. Für formale Umformungen und die Entwicklung diagrammatischer Methoden ist der Zeitordnungsoperator jedoch unerlässlich.

Unitarität

Für die zeitliche Entwicklung des Skalarprodukts zweier allgemeiner Lösungen $\psi(t)$ und $\phi(t)$ gilt

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\psi(t), \phi(t)) = (\psi(t), H(t)\phi(t)) - (H(t)\psi(t), \phi(t)) = 0,$$

da $H(t)$ selbstadjungiert ist. Damit ist also das Skalarprodukt eine Konstante der Bewegung und aus

$$(\psi(t), \phi(t)) = (U(t, t_0)\psi(t_0), U(t, t_0)\phi(t_0)) = (\psi(t_0), \phi(t_0))$$

folgt das $U(t, t_0)$ unitär ist, also die Norm erhält.

4.2 Dirac- oder Wechselwirkungsbild

Dieses, vor allem für die Störungstheorie wichtige Bild zur zeitlichen Entwicklung eines quantentheoretischen Systems, wurde von Dirac eingeführt (s. Kap. 3.1).

Zeitunabhängiges ungestörtes System

Im Normalfall gilt

$$H(t) = H_0 + V(t),$$

das ungestörte System H_0 ist also nicht explizit von der Zeit abhängig.

Zeitentwicklung durch H_0

Beim Wechselwirkungsbild separiert man die Zeitentwicklung von Wellenfunktion im Schrödinger-Bild, $\psi_S(t)$ in zwei Anteile. Die Zeitentwicklung durch H_0 ist durch

$$\begin{aligned}\psi_I(t) &= e^{iH_0t/\hbar} \psi_S(t) \\ A_I(t) &= e^{iH_0t/\hbar} A_S e^{-iH_0t/\hbar}\end{aligned}$$

gegeben. $\psi_I(t)$ ist die Wellenfunktion im Wechselwirkungsbild (I steht für *interaction*). Ohne Störung ($V = 0$) gilt $\psi_S(t) = \exp(-iH_0t/\hbar)\psi_S(0)$, und somit

$$\psi_I(t) = e^{iH_0t/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar} \psi_S(0) = \psi_S(0).$$

Im Wechselwirkungsbild entwickelt sich die Wellenfunktion also nur durch die Störung eingeschaltet. Ohne den Störterm fallen Wechselwirkungs- und Heisenberg-Bild zusammen.

Zeitentwicklung durch die Störung

Konkret ist die Zeitentwicklung im Wechselwirkungsbild durch

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_I = -H_0 e^{iH_0t/\hbar} \psi_S(t) + e^{iH_0t/\hbar} i\hbar \frac{d}{dt} \psi_S(t) \quad (4.1)$$

$$= e^{iH_0t/\hbar} (H(t) - H_0) \psi_S(t) \quad (4.2)$$

$$= \left[e^{iH_0t/\hbar} V(t) e^{-iH_0t/\hbar} \right] e^{iH_0t/\hbar} \psi_S(t) \quad (4.3)$$

$$\equiv V_I(t) \psi_I(t) \quad (4.4)$$

geben. Wir haben also

$$\begin{aligned}i\hbar \partial_t \psi_I &= V_I(t) \psi_I(t), \\ \frac{d}{dt} A_I &= \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I] + (\partial_t A)_I.\end{aligned}$$

Das Wechselwirkungsbild erlaubt es daher die unterschiedlichen physikalischen Bedeutungen von H_0 und der Störung $V(t)$ mathematisch präzise zu erfassen.

Zeitentwicklungsoperator $U_I(t, t_0)$ im Wechselwirkungsbild

Von Interesse ist nun der Zeitentwicklungsoperator $U_I(t, t_0)$ im Wechselwirkungsbild, welcher via

$$\psi_I(t) = U_I(t, t_0) \psi_I(t_0), \quad U_I(t_0, t_0) = 1$$

definiert ist. Falls $V(t)$ nicht explizit von der Zeit abhängt, so gilt (s. Kap. 3.1)

$$U_I(t, t_0) = e^{iH_0t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} e^{iHt_0/\hbar} e^{-iH_0t_0/\hbar},$$

wobei, von rechts nach links, $e^{-iH_0 t_0/\hbar} \psi_I(t_0) = \psi_S(t_0)$ mit $e^{iH_0 t_0/\hbar} \psi_S(t_0) = \psi_S(0)$ gilt. Wir bilden also $\psi_I(t_0)$ zuerst auf $\psi_S(0)$ ab und benutzen dann mit $e^{-iH_0 t/\hbar}$ den ursprünglichen Zeitenwicklungsoperator im Schrödinger-Bild. Der letzte Faktor, $e^{iH_0 t/\hbar}$ führt uns dann wieder vom Schrödinger- ins Wechselwirkungs-Bild zurück.

Im allgemeinen ist $V(t)$ zeitabhängig. Die zum Schrödinger-Bild äquivalente Differentialgleichung

$$i\hbar \partial_t U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0)$$

führt dann, zusammen mit der Anfangsbedingung $U_I(t_0, t_0) = 1$, zu der Integralgleichung

$$U_I(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') U_I(t', t_0).$$

Diese hat nun wiederum die formale Lösung

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots dt_n T(V_I(t_1) \cdots V_I(t_n)) \\ &= T \left(\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right\} \right). \end{aligned}$$

Diese Darstellung ist der maßgebliche Ausgangspunkt für viele störungstheoretische Rechnungen, bei welchen man i.d.R. sukzessive die Terme mit $n = 1, 2, 3$, etc., berücksichtigt.

4.3 Übergänge 1. Ordnung

Liegt zur Zeit $t = t_0$ der Zustand $|\psi_I(t_0)\rangle$ vor, so entwickelt sich daraus aufgrund der Störung $V_I(t)$ zur Zeit t der Zustand $|\psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle$.

Lineare Störungstheorie

Nimmt man aus der Reihe für $U(t, t_0)$ nur die Terme mit $n = 0$ und 1 mit, so folgt:

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\psi_I(t_0)\rangle.$$

Die Korrektur ist also linear in der Störung.

Eigenzuständen von H_0

Es seien

$$|\varphi_n\rangle, \quad H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle,$$

die stationären Eigenzustände von H_0 . Wir wählen einen Eigenzustand als Anfangszustand:

$$|\psi_I(-T)\rangle = |\varphi_n\rangle, \quad t_0 = -T, \quad T \gg 0.$$

Entwicklung nach Eigenfunktionen von H_0

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß sich das System zur Zeit $t = +T$ im Zustand $|\varphi_m\rangle$ befindet, ist durch

$$\langle \varphi_m | \Psi_I(T) \rangle = \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^{+T} dt' \langle \varphi_m | V_I(t') | \varphi_n \rangle$$

gegeben. Aus $V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$ folgt

$$\langle \varphi_m | V_I(t) | \varphi_n \rangle = e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \langle \varphi_m | V(t) | \varphi_n \rangle,$$

und daher

$$\langle \varphi_m | \Psi_I(T) \rangle = \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^{+T} dt' e^{i(E_m - E_n)t'/\hbar} \langle \varphi_m | V(t') | \varphi_n \rangle. \quad (4.5)$$

Übergangswahrscheinlichkeit

Allgemein sind wir an der Übergangswahrscheinlichkeit

$$w_{n \rightarrow m}(2T) = \left| \langle \varphi_m | \Psi_I(T) \rangle \right|^2$$

interessiert. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, das System im Zustand $|\varphi_m\rangle$ zu finden, wenn es sich anfangs in $|\varphi_n\rangle$ befand. Um die Übergangswahrscheinlichkeit konkret auszuwerten, sind zusätzliche Kenntnisse zur Form von $V(t)$ notwendig. Zwei wichtige Beispiele werden nun diskutiert.

4.3.1 Zeitunabhängiges Potential

Falls V nicht explizit von der Zeit abhängt, so läßt sich das Zeitintegral in (4.5) unmittelbar ausführen:

$$\int_{-T}^{+T} dt' e^{i\omega_{mn}t'} = \frac{2 \sin(\omega_{mn}T)}{\omega_{mn}}, \quad \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n).$$

Darstellung der δ -Funktion

Bei der Berechnung von $w_{n \rightarrow m}(2T)$ ist die Darstellung

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin^2(xT)}{\pi x^2 T} \right) = \delta(x),$$

für die *Distribution* $\delta(x)$ nützlich. Begründung: Es sei $f(x)$ eine Testfunktion. Dann gilt

$$\int_{-a}^{+a} dx \frac{\sin^2(xT)}{x^2 T} f(x) = \int_{-aT}^{+aT} dy \frac{\sin^2(y)}{y^2} f(y/T), \quad y = Tx.$$

Für große T folgt daraus

$$\dots \approx f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{\sin^2(y)}{y^2} = f(0) \pi.$$

Übergangswahrscheinlichkeit

Für $E_m \neq E_n$ und $T \rightarrow \infty$ erhalten wir somit

$$w_{n \rightarrow m}(2T) = 4\pi \frac{1}{\hbar^2} T \delta(\omega_{mn}) \left| \langle \varphi_m | V | \varphi_n \rangle \right|^2$$

für die Übergangswahrscheinlichkeit. Wegen $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ bekommen wir damit für die Übergangsrate

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = w_{n \rightarrow m}(2T)/(2T)$$

das wichtige Resultat

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) \left| \langle \varphi_m | V | \varphi_n \rangle \right|^2.$$

Fermi's goldene Regel

Im allgemeinen steht als Endzustand nicht nur ein einziger Zustand φ_m mit scharfer Energie experimentell zur Verfügung, sondern ein Energieintervall ΔE_m , in dem $\rho(E_m) \Delta(E_m)$ Zustände liegen. Dann beträgt die Gesamtrate

$$\bar{\Gamma}_n(E_n) = \int dE_m \rho(E_m) \Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_n) \left| \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \right|^2.$$

Diese Formel wird –nach Fermi– als *Goldene Regel* der 1. Ordnung für die zeitabhängige Störungstheorie bezeichnet.

- Es sei betont, daß die 1. Ordnung der Störungstheorie nur Sinn macht, falls die höheren Ordnungen entsprechend vernachlässigt werden können.
- Wenn die Matrixelemente $\langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle$ nur schwach von der Energie E_n abhängig sind, so läßt sich die Zustandsdichte $\rho(E_n)$ experimentell mittels der goldenen Regel bestimmen.

4.3.2 Zeitlich periodisches Potential

$V(t)$ habe die Gestalt

$$V(t) = A e^{-i\omega t} + A^+ e^{i\omega t},$$

wobei A ein beliebiger Operator ist. Damit ist $V(t)$ selbstadjungiert und periodisch in der Zeit t .

Übergangsamplitude

Für die Übergangsamplitude ergibt sich daraus

$$\langle \varphi_m | \varphi_I(T) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^{+T} dt \left[e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} \langle m|A|n \rangle + e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} \langle m|A^+|n \rangle \right].$$

Bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit ist zu beachten, daß die gemischten Terme beim Quadrieren wegfallen: Für sehr große T gilt nämlich für $m \neq n$

$$\int_{-T}^{+T} dt e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} \int_{-T}^{+T} dt' e^{i(\omega_{mn}+\omega)t'} \approx \delta(\omega_{mn}-\omega) \delta(\omega_{mn}+\omega) = 0.$$

Wir haben demnach für große T

$$w_{n \rightarrow m} = 4\pi T \frac{1}{\hbar^2} \left[\delta(\omega_{mn}-\omega) |\langle m|A|n \rangle|^2 + \delta(\omega_{mn}+\omega) |\langle m|A^+|n \rangle|^2 \right].$$

Emission und Absorption

Für die Rate $\Gamma_{n \rightarrow m} = w_{m \rightarrow n} / (2T)$ folgt daraus

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_m - E_n - \hbar\omega) |\langle m|A|n \rangle|^2 + \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) |\langle m|A^+|n \rangle|^2 \right].$$

Wegen $E_m = E_n + \hbar\omega$ beschreibt der Operator A einen Absorptionsprozeß, während A^+ wegen $E_m = E_n - \hbar\omega$ einen Emissionsprozeß für ein Quant der Energie $\hbar\omega$ beschreibt.

Photonen

Die gerade skizzierten Überlegungen sind insbesondere für die Absorption und Emission von Strahlung relevant. Dabei sind dann die A^+ und A die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Lichtquanten, den *Photonen*. Allerdings kommt dann zu $V(t)$ auch noch die Ortsabhängigkeit der ebenen Wellen, $\sim \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ hinzu.

4.4 Potentialstreuung: 1. Ordnung Störungstheorie

Es sei $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ und \tilde{V} ein Potential, an dem die im Anfangs- und Endzustand freien Teilchen gestreut werden, $H = H_0 + \tilde{V}$.

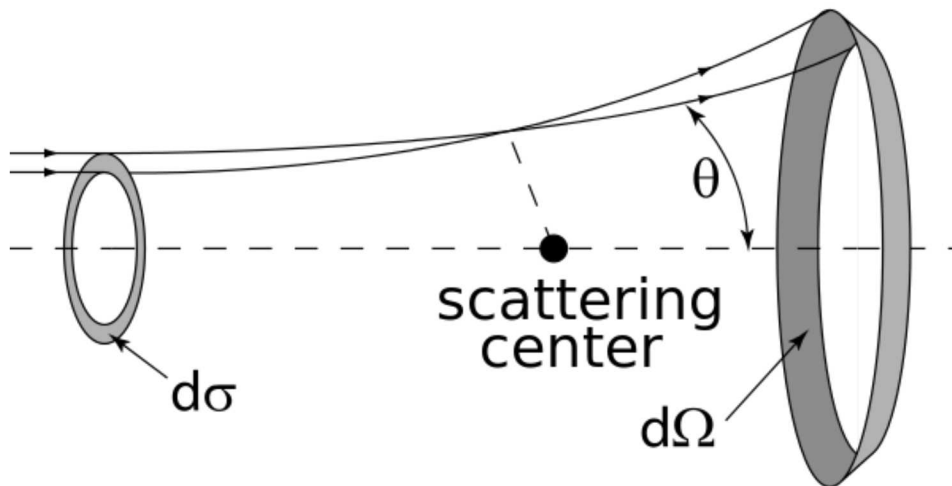
Periodische Randbedingungen

Das System sei in einem Volumen $V = L^3$ gegeben. Als Basis wählen wir die freien Wellenfunktionen

$$\varphi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}.$$

Da wir am Limes $V \rightarrow \infty$ interessiert sind können wir die Randbedingungen frei wählen. Günstig sind die periodischen Randbedingungen:

$$e^{ik_j L} = 1, \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{L} \vec{n}, \quad \vec{n} = (n_1, n_2, n_3), \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$



Anfangs- und Endzustand

Wir betrachten einen Streuprozess an einem räumlich begrenzten Potential \tilde{V} . Dann sind sowohl der Anfangs- wie auch der Endzustand ebene Wellen:

$$\text{Anfangszustand:} \quad \Phi_{\vec{k}_a} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_a \cdot \vec{x}}, \quad E_a = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m},$$

$$\text{Endzustand:} \quad \Phi_{\vec{k}_e} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{x}}, \quad E_e = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m}.$$

Goldene Regel

Für die Übergangsrates $\Gamma_{\vec{k}_a \rightarrow \vec{k}_e}$ erhält man nach der Goldenen Regel

$$\Gamma_{\vec{k}_a \rightarrow \vec{k}_e} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_e - E_a) \left| \langle \vec{k}_e | \tilde{V} | \vec{k}_a \rangle \right|^2,$$

mit

$$\left| \langle \vec{k}_e | \tilde{V} | \vec{k}_a \rangle \right|^2 = \frac{1}{V} \int d^3x e^{i(\vec{k}_a - \vec{k}_e) \cdot \vec{x}} \tilde{V}(\vec{x}).$$

Die Anzahl der Zustände im Endzustandsintervall $\Delta k_{1e} \Delta k_{2e} \Delta k_{3e} = \Delta^3 k_e$ ist durch

$$\Delta^3 n_e = \frac{V}{(2\pi)^3} \Delta^3 k_e$$

gegeben und die zugehörige Rate durch

$$\Gamma_{\vec{k}_a \rightarrow \vec{k}_e} \Delta^3 n_e = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar V} \delta(E_a - E_e) \Delta^3 k_e \left| \int d^3x e^{i(\vec{k}_a - \vec{k}_e) \cdot \vec{x}} \tilde{V}(\vec{x}) \right|^2.$$

Teilchenstromdichte

Die Teilchenstromdichte \vec{j}_a der einfallenden Teilchen ist

$$\vec{j}_a = \frac{1}{V} \frac{\hbar \vec{k}_a}{m},$$

und damit erhalten wir für den (3-fach) differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\Delta\sigma = \frac{\Gamma_{\vec{k}_a \rightarrow \vec{k}_e} \Delta^3 n_e}{|\vec{j}_a|} = \frac{m}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{|\vec{k}_a|} \delta(E_a - E_e) \Delta^3 k_e \left| \int d^3x e^{i(\vec{k}_a - \vec{k}_e) \cdot \vec{x}} \tilde{V}(\vec{x}) \right|^2.$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist allgemein via der Teilchenzahlerhalten $j_a \Delta\sigma = j_e \Delta\Omega_e$ definiert, womit zwei Raten gleichgesetzt werden. Dabei ist $\Delta\sigma$ ein (differentielles) Kressegment und $\Delta\Omega_e$ der differentielle Raumwinkel Ω_e der gestreuten Teilchen. Wegen

$$\Delta^3 k_e = k_e^2 dk_e d\Omega_e = \frac{m}{\hbar^2} k_e dE_e d\Omega_e$$

bekommen wir schließlich mit $k_e = k_a$ (Energie-Erhaltung)

$$\Delta\sigma = \frac{m^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \left| \int d^3x e^{i(\vec{k}_a - \vec{k}_e) \cdot \vec{x}} \tilde{V}(\vec{x}) \right|^2 \delta(E_a - E_e) dE_e d\Omega_e.$$

Differentielle Wirkungsquerschnitt

Die Integration über die Endzustandsenergie E_e ergibt die wichtige Formel

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega_e} = \frac{m^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \left| \int d^3x e^{i(\vec{k}_a - \vec{k}_e) \cdot \vec{x}} \tilde{V}(\vec{x}) \right|^2.$$

Der Index (1) soll hier andeuten, daß es sich um Störungsrechnung in 1. Näherung handelt. Man sieht, daß $d\sigma^{(1)}/d\Omega_e$ nur vom Impulsübertrag $\vec{q} = \vec{k}_a - \vec{k}_e$ abhängt.

Impulsübertrag

Für ein rotations-symmetrisches Potential, also für $\tilde{V}(\vec{x}) = \tilde{V}(r)$, mit $r = |\vec{x}|$, läßt sich das Integral weiter vereinfachen:

$$\begin{aligned} \int d^3x e^{irq \cos\theta} \tilde{V}(r) &= 2\pi \int_0^\infty dr r^2 \tilde{V}(r) \int_0^\pi d\theta e^{irq \cos\theta} \sin\theta \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr r^2 \tilde{V}(r) \int_{-1}^{+1} dz e^{irqz} \\ &= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr r \tilde{V}(r) \sin(qr), \end{aligned}$$

so daß

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega_e} = \left(\frac{4m^2}{q^2 \hbar^4} \right) \left| \int_0^\infty dr r \tilde{V}(r) \sin(qr) \right|^2.$$

Yukawa-Potential

Das abgeschirmte Coulomb-Potential

$$\tilde{V}(r) = g \frac{e^{-\mu r}}{r}$$

wird auch das *Yukawa-Potential* genannt, hierbei ist $1/\mu$ die Abschirmlänge. Mit $\int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin(rq) = q/(q^2 + \mu^2)$, folgt für das Yukawas-Potential

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega_e} = \left(\frac{2mg}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(q^2 + \mu^2)^2}.$$

Da

$$\vec{q}^2 = (\vec{k}_a - \vec{k}_e)^2 = 2k_a^2(1 - \cos[\angle(\vec{k}_a, \vec{k}_e)]),$$

$$\angle(\vec{k}_a, \vec{k}_e) = \vartheta : \quad \text{Streuwinkel},$$

und $(1 - \cos \vartheta) = 2 \sin^2(\vartheta/2)$, so folgt

$$q^2 = 4k_a^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = \frac{8mE_a}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2}.$$

Rutherford'sche Streuformel

Für den Coulomb-Limes, $\mu \rightarrow 0$, ergibt sich daher

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega} = \frac{g^2}{16E_a^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}.$$

Dies ist die klassische *Rutherford'sche Formel* für die Coulomb-Streuung. Sie ergibt sich also auch quantenmechanisch in 1. Ordnung Störungstheorie.