Kapitel 11

Störungstheorie zeitabhängiger Prozesse

Die meisten physikalischen Übergänge sind tatsächlich 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 $t > -T$, $T \gg 0$, wirksam und ist später für $t > T$ nicht mehr spürbar, d.h. wir haben:

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

Äquivalent hierzu kann man auch einen langsamen "Einschaltvorgang"

$$V(t) \;\equiv\; V_\varepsilon(t) \;=\; V_0\, e^{-\varepsilon|t|}\, e^{-i\omega t} \qquad \text{mit} \qquad \varepsilon > 0 \;,$$

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

11.1 Schrödinger–Bild

Zeitunabhängiger Hamilton-Operator
Es sei $H = H_0 + V(t)$. Die ïnfinitesimaleSZeitentwicklung eines Schrödinger–Zustandes $\psi_S(t)$ ist dann durch

$$\boxed{i\hbar\, \partial_t\, \psi_S(t) \;=\; H\psi_S(t)}$$

gegeben. Falls 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 $t > t_0$ nach Kap. 10.1 durch die unitäre Transformation

$$\boxed{\begin{array}{rcl} \psi_S(t) & = & U(t,t_0)\,\psi_S(t_0) \\ U(t,t_0) & = & e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \\ U(t_0,t_0) & = & 1 \end{array}} \qquad H(t) \equiv H \ ,$$

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

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t U(t,t_0) \;=\; H(t)\,U(t,t_0) \ .}$$

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:

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

Neuman-Reihe

Die Lösung der Integralgleichung läßt sich in Form einer sogenannten “Neumann’schen Reihe” angeben: Man setzt

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

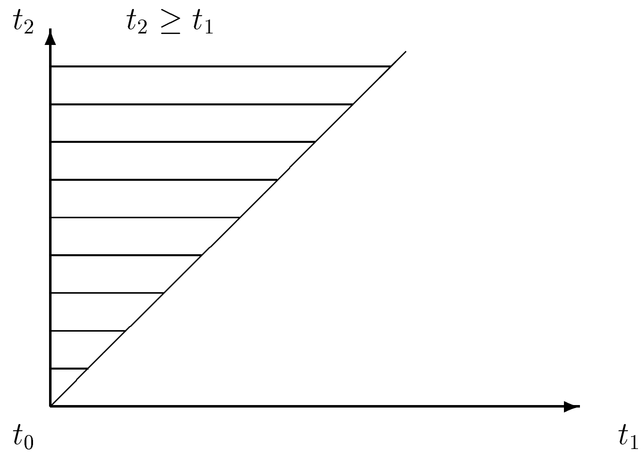
also allgemein für $U^{(n)}(t,t_0)$:

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

so daß

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

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:

$$\boxed{T\Big(H(t_1)H(t_2)\Big) \;\equiv\; \begin{cases} H(t_1)H(t_2) & \text{für} \quad t_1 > t_2 \\ H(t_2)H(t_1) & \text{für} \quad t_2 > t_1 \end{cases}}$$

Isbesondere gilt $T\Big(H(t_1)H(t_2)\Big) = T\Big(H(t_2)H(t_1)\Big)$ und somit

$$\boxed{\int_{t_0}^{t} dt_2\, H(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, H(t_1) \;=\; \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t} T\Big(H(t_1)H(t_2)\Big) dt_1 dt_2\,.}$$

Mit der Stufenfunktion $\theta(t)$,

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

läßt sich der Zeitordnungsoperator auch als

$$T\Big(H(t_1)H(t_2)\Big) \;=\; \theta(t_1 - t_2)\, H(t_1)H(t_2) \;+\; \theta(t_2 - t_1)\, H(t_2)H(t_1)\,,$$

schreiben. Allgemein gilt somit

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

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

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

Diese Darstellung ist “formal”, da jede praktische Rechnung mit der ursprünglichen Definition durchgeführt werden muss. Für formale Umformungen und die Entwicklung diagramatischer Methoden ist der Zeitordnungsoperator jedoch unerläßlich.

Unitarität
Für zwei allgemeine Lösungen $\psi(t)$ und $\phi(t)$ gilt

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

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

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

folgt das $U(t,t_0)$ unitär ist.

11.2 Dirac– oder Wechselwirkungsbild

Dieses, vor allem für die Störungstheorie wichtige “Bild” zur zeitlichen Entwicklung eines quantentheoretischen Systems, wurde von Dirac eingeführt (s. Kap. 10.1).

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

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

gegeben. $\psi_I(t)$ ist die Wellenfunktion im Wechselwirkungsbild (I steht für "interaction"). Ohne Störung ($V=0$) gilt

$$\psi_I(t) \;=\; \psi_S(t)\,.$$

Für eine Störung $V(t)$, welche für $|t| > T$ verschwindet, sind also die Anfangs- und Endzustände $\psi_S(\mp T)$ durch

$$\psi_S(\mp T) \;=\; \psi_I(\mp T)$$

gegeben.

Zeitentwicklung durch die Störung
Die Zeitentwicklung ist im Wechselwirkungsbild durch

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{d}{dt}\psi_I &= -H_0\,e^{iH_0t/\hbar}\,\psi_S(t) \,+\, e^{iH_0t/\hbar}\,i\hbar\,\frac{d}{dt}\psi_S(t) && (11.1)\\ &= e^{iH_0t/\hbar}\left(H(t)-H_0\right)\psi_S(t) && (11.2)\\ &= e^{iH_0t/\hbar}\,V(t)\,e^{-iH_0t/\hbar}\,e^{iH_0t/\hbar}\,\psi_S(t) && (11.3)\\ &= V_I(t)\,\psi_I(t) && (11.4) \end{aligned}$$

geben, also

$$\boxed{\begin{array}{rcl} i\hbar\,\partial_t\psi_I & = & V_I(t)\,\psi_I(t) \quad \text{und} \\ \dfrac{d}{dt}A_I & = & \dfrac{i}{\hbar}\,[H_0,A_I] + (\partial_t A)_I\,. \end{array}}$$

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

$$\boxed{\psi_I(t) \;=\; U_I(t,t_0)\,\psi_I(t_0)\,, \qquad U_I(t_0,t_0)=1}$$

definiert ist. Falls $V(t)$ nicht explizit von der Zeit abhängt, so gilt (s. Kap. 10.1)

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

Ist $V(t)$ dagegen zeitabhängig, so bemerkt man wieder (wie im Schrödinger–Bild), daß die Differentialgleichung

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t U_I(t,t_0) \;=\; V_I(t)\,U_I(t,t_0)}$$

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

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

äquivalent ist. Diese hat nun wiederrum die formale Lösung

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

Diese Darstellung ist der maßgebliche Ausgangspunkt für sehr viele störungstheoretische Rechnungen, indem man sukzessive die Terme mit $n = 1, 2, 3$ etc. berücksichtigt.

11.3 Übergänge 1. Ordnung

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

Lineare Störungstheorie

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

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

Eigenzuständen von H_0

Es seien

$$|\varphi_n >, \qquad H_0\,|\varphi_n > = \;E_n\,|\varphi_n > \;,$$

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

$$|\psi_I(-T) > = \;|\varphi_n >, \qquad t_0 = -T, \qquad T \gg 0\;.$$

Entwicklung nach Eigenfunktionen von H_0
Die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß sich das System zur Zeit $t = +T$ im Zustand $|\varphi_m>$ befindet, ist durch

$$\boxed{<\varphi_m|\psi_I(T)> = \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar}\int_{-T}^{+T} dt' <\varphi_m|V_I(t')|\varphi_n>}$$

gegeben. Aus $V_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}\,V(t)\,e^{-iH_0t/\hbar}$, folgt

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

und daher

$$\boxed{<\varphi_m|\psi_I(T)> = \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar}\int_{-T}^{+T} dt'\, e^{i(E_m - E_n)t'/\hbar} <\varphi_m|V(t')|\varphi_n> \quad .}$$

Übergangswahrscheinlichkeit
Dies ist die grundlegende Formel für die Berechnung der *Übergangswahrscheinlichkeit*

$$w_{n\to m}(2T) = \Big| <\varphi_m|\psi_I(T)> \Big|^2$$

für die Störungstheorie in ersten Ordnung in $V(t)$. Um die Formel weiter auszuwerten, sind zusätzliche Kenntnisse zur Form von $V(t)$ notwendig. Zwei wichtige Beispiele werden nun diskutiert.

11.3.1 Zeitunabhängiges Potential

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

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

Darstellung der δ-Funktione
Bei der Berechnung von $w_{n\to m}(2T)$ ist die Darstellung

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

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

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

Für große T folgt daraus

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

Übergangswahrscheinlichkeit

Wir erhalten somit für $E_m \neq E_n$ für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$w_{n\to m}(2T) \;=\; 4\pi\frac{1}{\hbar^2}\,T\,\delta(\omega_{mn})\left|<\varphi_m|\,V\,|\varphi_n>\right|^2\,.$$

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

$$\Gamma_{n\to m} \;=\; w_{n\to m}(2T)/(2T)\;:$$

$$\boxed{\Gamma_{n\to m} \;=\; \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_n - E_m)\left|<\varphi_m|\,V\,|\varphi_n>\right|^2.}$$

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

$$\boxed{\bar{\Gamma}_n(E_n) \;=\; \int dE_m\,\rho(E_m)\,\Gamma_{n\to m} \;=\; \frac{2\pi}{\hbar}\,\rho(E_n)\left|<\varphi_n|\,V\,|\varphi_n>\right|^2.}$$

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.

11.3.2 Zeitlich periodisches Potential

$V(t)$ habe die Gestalt

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

wobei A eine 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

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

<u>**Emission und Absorption**</u>
Für die Rate $\Gamma_{n \to m} = w_{m \to n}/(2T)$ folgt daraus

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

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.

<u>**Photonen**</u>
Die gerade skizzierten Überlegungen sind sehr wichtig für die Absorption und Emission von Strahlung. Wie wir in der Quantenmechanik II sehen werden, sind dann A^+ und A die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Lichtquanten (*Photonen*). Allerdings kommt dann zu $V(t)$ auch noch die Ortsabhängigkeit der ebenen Wellen, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ hinzu.

11.4 Potentialstreuung: 1. Ordnung Störungstheorie

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

<u>**Periodische Randbedingungen**</u>
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 $V \to \infty$ interesiert sind können wir die Randbedingungen frei wählen. Günstig sind die periodischen Randbedingungen:

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

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:

$$\text{Anfangszustand:} \qquad \varphi_{\vec{k}_a} = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{i\vec{k}_a \cdot \vec{x}}, \qquad E_a = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m},$$
$$\text{Endzustand:} \qquad \varphi_{\vec{k}_e} = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{x}}, \qquad E_e = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m}.$$

Goldene Regel

Für die Übergangsrate $\Gamma_{\vec{k}_a \to \vec{k}_e}$ erhält man nach der Goldene Regel

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

mit

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

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

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

Teilchenstromdichte

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

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

und damit erhalten wir für den 3-fach differentiellen Wirkungsquerschnitt $\Delta\sigma = j_e \Delta\Omega_e / j_a$

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

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 $k_e = k_a$

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

Differentielle Wirkungsquerschnitt

Die Integration über die Endzustandsenergie E_e ergibt die wichtige Formel

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

(Der Index (1) soll andeuten, daß es sich lediglich um die 1. Näherung handelt!)

Impulsübertrag

Man sieht, daß $d\sigma^{(1)}/d\Omega_e$ nur vom Impulsübertrag $\vec{q} = \vec{k}_a - \vec{k}_e$ abhängt.
Falls $\tilde{V}(\vec{x}) = \tilde{V}(r)$, so läßt sich das Integral noch 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

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

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.

Da $\int_0^\infty dr\, e^{-\mu r}\sin(rq) = \frac{q}{q^2+\mu^2}$, so folgt

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

Da

$$\begin{aligned}
\vec{q}^{\,2} &= (\vec{k}_a - \vec{k}_e)^2 = 2k_a^2(1-\cos[\angle(\vec{k}_a,\vec{k}_e)])\, , \\
\angle(\vec{k}_a,\vec{k}_e) &= \vartheta : \qquad \text{Streuwinkel}\, ,
\end{aligned}$$

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

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

<u>Rutherford'sche Streuformel</u>

Für $\mu = 0$ 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 *Rutherford'sche Formel* für die Coulomb–Streuung. Sie ergibt sich also quantenmechanisch in 1. Ordnung Störungstheorie.