Kapitel 6

Rotationsinvariante Potentiale

6.1 Schrödinger-Gleichung für rotationssymmetrische Potentiale

Drehimpulserhaltung

Für ein rotationssymmetrisches Potential $V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$ ist der Hamiltonian invariant unter Rotationen. Der Drehimpuls ist, klassisch wie quantenmechanisch, eine gute Quantenzahl. Wie man nachrechnen kann, gilt

$$\boxed{[\mathbf{L}_j, \mathbf{H}] \;=\; 0 \;, \qquad j = 1,2,3 \;, \qquad \text{also auch} \qquad [\vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{H}] \;=\; 0 \;.}$$

Wie wir später noch sehen werden, ist ein Operator genau dann eine Erhaltungsgrösse, wenn er mit dem Hamiltonoperator vertauscht. Aus Kap. 5.2.1 wissen wir: Vertauschen zwei Operatoren, kann man sie gleichzeitig auf Diagonalform bringen. Dies bedeutet: man kann die Eigenfunktionen zu $\mathbf{H}$ gleichzeitig als Eigenfunktionen zu $\vec{\mathbf{L}}^2$ und $\mathbf{L}_3$ wählen.

Entwicklung nach Kugelfunktionen

$u(\vec{x})$ sei eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger–Gleichung. wir entwickeln wir den Winkelanteil nach Kugelfunktionen Y_{lm}:

$$u(\vec{x}) \;=\; \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} R_{lm}(r)\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \;, \qquad r = ||\vec{x}|| \;.$$

Hamilton-Operator in Kugelkoordinaten

Der Laplace–Operator lautet in Polar–Koordinaten

$$\begin{aligned} \Delta \;&=\; \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \\ &=\; \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \vec{\mathbf{L}}^2 \quad ; \end{aligned}$$

(s.S. 5.2.4). also:

$$\boxed{H \;=\; -\frac{\hbar^2}{2 r m_0} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2 m_0 r^2} \vec{\mathbf{L}}^2 + V(r) \quad .}$$

Angewandt auf $u(\vec{x})$ erhält man

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l}\left[-\frac{\hbar^2}{2rm_0}\frac{\partial^2(rR_{lm})}{\partial r^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0r^2}R_{lm}(r)+V(r)R_{lm}(r)\right]Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$
$$= E\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l}R_{lm}(r)\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\quad .$$

Multipliziert man diese Gleichung mit $Y^*_{l'm'}$ und integriert über ϑ und φ, so folgt wegen $(Y_{l_1m_1},Y_{l_2m_2})=\delta_{l_1l_2}\delta_{m_1m_2}$ für $R_{lm}(r)$ die Gleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2rm_0}\frac{\partial^2(rR_{lm})}{\partial r^2}+\left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0r^2}+V(r)\right]R_{lm}(r)\;=\;E\,R_{lm}(r)\;.}$$

Zentrifugalpotential
Im folgenden wird angenommen, daß das Zentrifugalpotential

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

für $l\neq 0$ und $r\to 0$ gegenüber $V(r)$ dominiert, d.h.

$$\boxed{\lim_{r\to 0}\left(r^2V(r)\right)\;=\;0\;,}$$

wie es für das Coulomb-Potential der Fall ist. Anschaulich bedeutet dieses, daß auch quantenmechanisch das Teilchen nicht in den Ursprung "fallen" soll, die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(\vec{x})\;=\;u^*(\vec{x})u(\vec{x})$$

für $\vec{x}\to 0$ also endlich bleibt, d.h. $R_{lm}(r=0)$ soll endlich sein.

Verhalten für $r\to 0$
Für $r\to 0$ kann man E und $V(r)$ gegenüber r^{-2} vernachlässigen:

$$-\frac{d^2}{dr^2}\left(rR_{lm}(r)\right)\;-\;\frac{l(l+1)}{r^2}R_{lm}(r)\;\approx\;0,\qquad\text{für}\quad r\to 0\;.$$

Die Lösungen sind

$$R_{lm}(r)\approx C\,r^\nu,\qquad \nu(\nu+1)\;=\;l(l+1);\qquad \nu=l,\quad\text{oder}\quad \nu=-l-1\;.$$

Wenn $R_{lm}(r=0)<\infty$, kommt nur die *reguläre* Lösung $\nu=l$ in Frage

6.2 Die Bindungszustände des Wasserstoffatoms

Es sei nun

$$\boxed{V(r) = -\frac{Ze_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\ ,}$$

das Potential für ein Elektron mit Ladung $-e_0$ im Feld eines Kernes mit Ladung Ze_0. Für $R_{lm}(r) \equiv R(r)$ hat man nach S. 78 die Gleichung

$$\boxed{\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) R + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}\right] R(r) \ = \ 0\ .}$$

Gesucht werden quadratintegrierbare Lösungen mit $E < 0$ (gebundene Zustände).

Dimensionslose Variablen
Führt man die neuen Variablen

$$\boxed{\begin{aligned} \rho \ &= \ \left(\frac{8m_0|E|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} r\ , \qquad \lambda = Z\,\alpha\left(\frac{c^2\,m_0}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}}\ , \\ \alpha \ &= \ \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0\,\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad : \ \text{Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante,} \end{aligned}}$$

ein, so erhält man die radiale Schrödingergleichung

$$\boxed{\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) R \ = \ 0\ .}$$

Die Kontrolparameter sind der Drehimplus $l(l+1)$ und λ.

Verhalten für $r \to \infty$
Für große ρ ergibt sich für $R \sim R_\infty(\rho)$ näherungsweise

$$\frac{d^2R_\infty}{d\rho^2} - \frac{1}{4}R_\infty \ = \ 0, \qquad R_\infty \ \sim \ e^{\pm\frac{1}{2}\rho}\ .$$

Als normierbare Lösung kommt nur $e^{-\frac{1}{2}\rho}$ in Frage!

Allgemeine Lösung
Da wir nach Seite 78 wissen, daß $R(\rho) \sim \rho^l$ für $\rho \to 0$, betrachten wir nun den Ansatz

$$\boxed{R(\rho) \ = \ \rho^l\, e^{-\rho/2}\, g(\rho)\ .}$$

Hiermit finden wir für $g(\rho)$ die Gleichung

$$\boxed{\frac{d^2g(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right)\frac{dg}{d\rho} + \frac{\lambda - 1 - l}{\rho} g(\rho) \;=\; 0 \;.}$$

Taylor-Entwicklung
Wir entwickeln die Lösung in eine Taylorreihe in ρ,

$$\boxed{g(\rho) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \;,}$$

und setzen sie ein. Wir finden:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[n(n-1) a_n \rho^{n-2} + \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right) n a_n \rho^{n-1} + (\lambda - 1 - l) a_n \rho^{n-1} \right] \;=\; 0 \;,$$

oder

$$\sum_{n=0}^{\infty} \Big[(n+1)\Big(n a_{n+1} + (2l+2) a_{n+1} \Big) + (\lambda - 1 - l - n) a_n \Big] \rho^{n-1} \;=\; 0 \;.$$

Da diese Gleichung für alle ρ gelten soll, müssen die Koeffizienten einzeln verschwinden:

$$\boxed{a_{n+1} \;=\; \frac{n + l + 1 - \lambda}{(n+1)(n+2l+2)} \, a_n \;.}$$

Bricht die Reihe nicht ab, so hätte man für große n: $a_{n+1} \sim \frac{1}{(n+1)} a_n$, d.h. $g(\rho)$ verhielte sich für große ρ wie

$$g(\rho) \;\sim\; e^{\rho} \;.$$

Dies würde jedoch zu einem nicht normierbaren $R(\rho)$ führen. Die Reihe muß für normierbare R also abbrechen.

Hauptquantenzahl
Es muß also ein $n = n_r$ geben, für welches $a_{n_r+1} = 0$, d.h.

$$\boxed{\lambda \;=\; n_r + l + 1 \;, \qquad n_r \geq 0 \;,}$$

$$\boxed{\begin{array}{lll} n \;=\; n_r + l + 1 & : & \text{“Hauptquantenzahl”} \\ n \;:\; & & \text{natürliche Zahl mit} \quad n \geq l + 1 \;. \end{array}}$$

Als muss $\lambda = Z\,\alpha\sqrt{\frac{c^2 m_0}{2|E|}}$ eine ganze Zahl sein, $\lambda = n$. Hieraus folgt für die möglichen Energiewerte $E = E_n$ der gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms:

$$\boxed{E_n \;=\; -\frac{1}{2} m_0 c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \qquad \text{(Bohr'sche Formel).}}$$

Entartungsgrad

Die Abbruchbedingung

$$a_{n_r+1} \;=\; 0, \qquad\qquad n-1 \;=\; n_r + l$$

hat für feste Hauptquantenzahl n noch einen Freiheitsgrad,

$$l = 0, 1, \ldots n-1$$

sind die erlaubten Werte des Drehimpules.

Da zu l schon $2l+1$ Zustände mit verschiedenen l_3–Komponenten gehören, so ist der gesamte *Entartungsgrad* durch

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \;=\; n^2$$

gegeben. Zu vorgegebenem E_n gehören also n^2 verschiedene Bahndrehimpuls-Zustände. Berücksichtigt man außerdem, daß zu jedem Bahndrehimpuls-Zustand (l, m) noch je 2 Spin–Zustände des Elektrons gehören, so bekommt man schließlich als Entartungsgrad von E_n den Wert $2n^2 = d_n =$ Dimension des zu E_n gehörigen Unterraumes.

$$d_1 = 2 \;\;,\;\; d_2 = 8 \;\;,\;\; d_3 = 18 \quad \text{etc. .}$$

Dieses Ergebnis ist für die Atomphysik wichtig.

Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms

Die Funktionen $g(\rho)$ sind Polynome vom Grade $n_r = n - l - 1$, $n_r = 0, 1, \ldots$ Für gegebene n und l hat man die Rekursionsformel für die Koeffizienten a_ν, $\nu = 0, \ldots$, $n_r = n - l - 1$:

$$\boxed{a_{\nu+1} \;=\; \frac{\nu + l + 1 - n}{(\nu+1)(\nu+2l+2)}\, a_\nu \;, \qquad \nu = 0, \ldots}$$

Bei geeigneter Wahl von a_0 sind die Polynome identisch mit denn sogenannten *zugeordneten Laguerre'schen Polynomen*:

$$\boxed{\begin{aligned} L^{\alpha}_{n_r}(\rho) \;&=\; \sum_{\nu=0}^{n_r} (-1)^\nu \begin{pmatrix} n_r + \alpha \\ n_r - \nu \end{pmatrix} \frac{\rho^\nu}{\nu!} \\ &=\; \frac{1}{n_r!}\, e^{\rho} \rho^{-\alpha} \frac{d^{n_r}}{d\rho^{n_r}} \left(e^{-\rho} \rho^{n_r+\alpha} \right) \;. \end{aligned}}$$

Für $\alpha = 0$ erhält man die Laguerre'schen Polynome. Für das Wasserstoffatom gilt $\alpha = 2\,l + 1$.

Beispiele

Die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms mit Energie E_n, $R_{nlm}(\rho) \equiv R_{nl}(\rho)$, sind

$$\boxed{\begin{aligned} R_{nl}(\rho) \;&=\; C_{nl}\, e^{-\frac{1}{2}\rho}\, \rho^l\, L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho) \\ & \quad\; C_{nl} \;:\; \text{Normierungsfaktor.} \end{aligned}}$$

Setzt man

$$a \equiv \frac{\hbar^2\, 4\pi\varepsilon_0}{m_e e^2} \quad : \qquad \text{Bohr'scher Atomradius,}$$

so hat man z.B. (normiert)

$$\begin{aligned}
R_{10}(r) &= 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a} \quad , \\
R_{20}(r) &= 2\left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \left(1-\frac{Zr}{2a}\right) e^{-Zr/(2a)} \quad , \\
R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a} e^{-Zr/(2a)} \quad .
\end{aligned}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einer Kugelschale mit Radius r und $r+\Delta r$ anzutreffen, ist durch

$$\begin{aligned}
w(\Delta r) &= \int_r^{r+\Delta r} dr\, w_{nl}(r) \quad , \quad \text{wobei} \\
w_{nl}(r) &= r^2 R_{nl}^2(r)
\end{aligned}$$

gegeben. Das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit liegt für $w_{10}(r) = C_{10}^2\, r^2\, e^{-2Zr/a}$ bei $r = a/Z$. Im allgemeinen hat $w_{nl}(r)$ genau $n-l$ Maxima.

Die Mittelwerte $< r^k >= \int_0^\infty dr r^k w_{nl}(r)$ lassen sich für $k = \pm 1$ einfach berechnen:

$$\boxed{< r > = \frac{a}{2Z}\Big[3n^2 - l(l+1)\Big] \; , \qquad < r^{-1} > = \frac{Z}{an^2} \; .}$$

6.2.1 Korrekturen

Die Bohr'sche Formel für die Energieniveaus des Elektrons im Wasserstoffatom stellt nur eine Näherung dar, zu der eine ganze Reihe von *Korrekturen* kommen (Feinstruktur, Hyperfeinstruktur etc.):

Mitbewegung des Kernes

Wir haben bisher so getan, als ob der Kern des Wasserstoffatoms unendlich schwer sei (und deshalb ruht). Tatsächlich haben Kern und Elektron die Masse

$$c^2 m_p = 938\,\text{MeV}, \qquad c^2 m_e = 0,51\,\text{MeV}$$

und seine Mitbewegung macht sich bemerkbar.

Die Energie $\tilde{E}$ zweier Teilchen mit Koordinaten $\vec{x}_i = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, x_3^{(i)})$, $i = 1,2$, und wechselseitigem Potential $V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ ist klassisch gegeben durch

$$\tilde{E} = \frac{1}{2m_1}\vec{p}_1^{\,2} + \frac{1}{2m_2}\vec{p}_2^{\,2} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \quad .$$

Die Substitutionen

$$\vec{p}_1 \;\rightarrow\; \frac{\hbar}{i}\mathrm{grad}_1, \qquad \vec{p}_2 \;\rightarrow\; \frac{\hbar}{i}\mathrm{grad}_2, \qquad \mathrm{grad}_j \;=\; \left(\frac{\partial}{\partial x_1^{(j)}}, \frac{\partial}{\partial x_2^{(j)}}, \frac{\partial}{\partial x_3^{(j)}}\right) ,$$

führen zu der stationären Schrödinger–Gleichung für zwei Teilchen:

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)\right)\tilde{u}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \tilde{E}\,\tilde{u}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \ .}$$

Transformation auf Schwerpunktskoordinaten

Mittels der Relativ– und Schwerpunktkoordinaten

$$\begin{aligned}
\vec{x} &= \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \ , \\
\vec{R} &= \frac{(m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2)}{(m_1 + m_2)} \ , \\
\vec{x}_1 &= \vec{R} + \frac{\mu}{m_1}\vec{x} \ , \\
\vec{x}_2 &= \vec{R} - \frac{\mu}{m_2}\vec{x} \ , \\
\mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \ ,
\end{aligned}$$

wird hieraus

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x + V(\vec{x})\right)\tilde{u}(\vec{x}, \vec{R}) = \tilde{E}\,\tilde{u}(\vec{x}, \vec{R}) \ .}$$

Aus der klassischen Mechanik weiß man, daß der Schwerpunkt eines solchen Systems sich frei bewegt. Wir machen daher den Ansatz

$$\boxed{\tilde{u}(\vec{x}, \vec{R}) = u(\vec{x})\, e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{R}} \ .}$$

(Separation der Variablen $\vec{x}$ und $\vec{R}$!)

Damit erhalten wir für $u(\vec{x})$:

$$\boxed{\begin{aligned}
\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x + V(\vec{x})\right) u(\vec{x}) &= E u(\vec{x}) \\
E &= \tilde{E} - \frac{\hbar^2\vec{K}^2}{2(m_1 + m_2)} \ .
\end{aligned}}$$

Mittels $\mathrm{grad}_1 + \mathrm{grad}_2 = \mathrm{grad}_R$ finden wir für den Gesamtimpuls–Operator

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\mathbf{P}} = \vec{\mathbf{P}}_1 + \vec{\mathbf{P}}_2 &= \frac{\hbar}{i}\Big(\mathrm{grad}_1 + \mathrm{grad}_2\Big) = \frac{\hbar}{i}\mathrm{grad}_R \quad , \\ \vec{\mathbf{P}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} &= \hbar\vec{K} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} \, . \end{aligned}}$$

$$\begin{array}{ccl} \dfrac{\hbar^2\vec{K}^2}{2(m_1+m_2)} & : & \text{kinetische Energie des Schwerpunktes} \ , \\ E & : & \text{Energie der Relativbewegung} \ . \end{array}$$

Die Schrödinger–Gleichung für die Relativbewegung ist also die gleiche wie für die Bewegung in einem äußeren Potential $V(\vec{x})$. Man hat nur die Masse m durch die reduzierte Masse $\mu = m_1 m_2/(m_1+m_2)$ zu ersetzen.

Energieniveaus

Für die Energie–Niveaus des Wasserstoffatoms bedeutet finden wir somit

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{\alpha^2}{n^2}, \qquad \mu = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} \ .}$$

Geht man vom Proton zum Deuteron über, so hat man $m_p \to m_d \approx 2m_p$ und eine entsprechende Verschiebung der Energieniveaus des schwerer Wasserstoffs. Aufgrund dieses Effektes wurde das Deuteron entdeckt.

Andere Korrekturen

Sie kommen 1. vom magnetischen Moment des Elektrons; 2. von der relativistischen Geschwindigkeit des Elektrons; 3. vom magnetischen Moment des Kerns; 4. u.a. (s. später).

6.3 Radialsymmetrische Lösungen für $V(r) = 0$

Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung lassen sich in verschiedenen Systemen von Basisfunktionen darstellen. Schon kennengelernt haben wir die ebenen Wellen. Hier be- trachten wir Lösungen der Form $R_{lm}(r)\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, welche für die Streutheorie wichtig sind. Zunächst beschäftigen wir uns mit der Lösung für $R_{lm}(r)$.

6.3.1 Sphärische Bessel- und Neumann-Funktionen

Falls $V \equiv 0$, so bekommt man für $R_{lm}(r) \equiv R_l(r)$ die Gleichung:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2(rR_l)}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R_l(r) = E\, R_l(r) \, .}$$

Da sie ein freies Teilchen beschreibt, ist die Energie $E \geq 0$ beliebig. Setzt man

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = |\vec{k}|^2 \ , \qquad \text{und} \qquad \rho \equiv kr \ ,$$

so folgt

$$\boxed{\frac{d^2R_l}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR_l}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R_l + R_l \;=\; 0\;.}$$

Man beachte, daß die Energie $\hbar^2k^2/(2m)$ nur via der Reskalierung des radialen Abstandes, $\rho = kr$, eingeht. Als Differentialgleichung 2. Ordnung hat diese Gleichung zwei unabhängige Lösungen, welche man auch ßphärischen Zylinderfunktionennennt.

Sphärische Bessel-Funktion

Als erstes betrachten wir die $\rho = 0$ reguläre Lösung, die *sphärische Bessel-Funktion* $j_\nu(\rho)$.

$$\boxed{\begin{aligned} R_l^{reg.}(\rho) = j_l(\rho) &= \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho), \\ J_\nu(\rho) &= \frac{\rho^\nu}{2^\nu}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\rho^{2k}}{2^{2k}k!\,\Gamma(\nu+k+1)}. \\ \frac{d^2J_\nu}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dJ_\nu}{d\rho} + \left(1-\frac{\nu^2}{\rho^2}\right)J_\nu(\rho) &= 0\;, \end{aligned}}$$

wobei die $J_\nu(\rho)$ Bessel-Funktionen sind. Man hat auch folgende Darstellungen

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= (-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right)\quad, \\ j_0(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho}\quad, \\ j_1(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}\;. \end{aligned}$$

Man kann dieses durch vollständige Induktion verifizieren, d.h. man beweist zunächst den Fall $l = 0$ und schliesst dann aus der Richtigkeit für l auf die Richtigkeit für $l+1$.

Sphärische Neumann-Funktionen

Wir betrachten nun die bei $\rho = 0$ singuläre Lösung,die *sphärische Neumann-Funktionen* $n_l(\rho)$.

$$\boxed{\begin{aligned} n_l(\rho) &= (-1)^{l+1}\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho) \\ &= -(-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right)\;. \end{aligned}}$$

$$n_0(\rho) \;=\; -\frac{\cos\rho}{\rho}\;,\qquad n_1(\rho) \;=\; -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}\;,\qquad \text{etc..}$$

Grenzwertverhalten
Für $\rho \to 0$ gilt

$$\boxed{\begin{aligned} j_l(\rho) &\approx \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}\ , \qquad (2l+1)!! \equiv 1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l+1)\ , \\ n_l(\rho) &\approx \frac{-(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}\ . \end{aligned}}$$

Für $\rho \to \infty$ gilt andererseits

$$\boxed{j_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho}\sin(\rho - \frac{l\pi}{2})\ , \qquad n_l(\rho) \sim -\frac{1}{\rho}\cos(\rho - \frac{l\pi}{2})}$$

6.3.2 Entwicklung von ebenen Wellen nach Legendre-Polynomen

Da auch die ebene Welle

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = e^{ikr\cos\vartheta} = e^{i\rho z}, \qquad \vartheta = \angle(\vec{k},\vec{x}), \qquad \rho = kr, \qquad z\cos\vartheta\ ,$$

eine reguläre Lösung von $(\Delta + k^2)u(\vec{x}) = 0$ ist, so muß sie nach Kugelfunktionen und sphärischen Bessel-Funktionen $j_l(\rho)$ entwickelbar sein.

Die ebene Welle hängt von der Energie $\hbar^2k^2/(2m)$ nur via der Reskalierung des radialen Abstandes $\rho = kr$ ab. Vom Winkel φ hängt die ebene Welle nicht ab (die Richtung $\vec{k}$ ist parallel zur x_3–Achse gewählt worden!) und daher kommen in der Entwicklung nur die Legendre–Polynome $P_l(z)$ vor:

$$\boxed{e^{i\rho z} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l\, j_l(\rho)\, P_l(z)\ .}$$

Der radiale Anteil ist durch die sphärische Besselfunktion $j_l(\rho)$ gegeben, da diese die für $\rho \to 0$ regulär sind. Es bleiben die Entwicklungskoeffizienten c_l mit Hilfe der Orthogonalitätsrealtionen für die Legendre-Polynome zu bestimmen:

$$\int_{-1}^{+1} dz P_{l_1}(z)P_{l_2}(z) = \frac{2\delta_{l_1l_2}}{(2l_1+1)}, \qquad c_l\, j_l(\rho) = \frac{2l+1}{2}\int_{-1}^{+1} dz\, P_l(z)e^{i\rho z}\ .$$

Da $P_l(z)$ orthogonal zu allen $P_n(z)$ mit $z < l$ ist gilt zudem

$$\int_{-1}^{+1} dz\ z^n\ P_l(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } n < l\ , \\ \dfrac{2\ l!}{(2l+1)!!} & \text{für } n = l\ . \end{cases}$$

Für $e^{i\rho z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(i\rho z)^n$ finden wir also

$$\int_{-1}^{+1} dz\, P_l(z)\, e^{i\rho z} \;=\; \frac{2}{(2l+1)!!}\,(i\rho)^l \;+\; O(\rho^{l+1}) \;.$$

Für $\rho \to 0$ hat man also

$$c_l\, j_l(\rho) \;\approx\; c_l\, \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \;\approx\; \frac{(2l+1)}{2}\, \frac{2\,(i\rho)^l}{(2l+1)!!} \;+\ldots \quad (\text{höhere Potenzen in } \rho)\;.$$

Ein Koeffizientenvergleich ergibt

$$c_l \;=\; (2l+1)\, i^l \;\;.$$

Damit bekommen wir die überaus wichtige Formel

$$\boxed{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \;=\; e^{ikr\cos\vartheta} \;=\; \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l\, j_l(kr)\, P_l(\cos\vartheta) \;\;.}$$

Physikalische Interpretation
Das asymptotischen Verhaltens von $j_l(\rho)$ ist für große ρ

$$j_l(\rho) \;\sim\; \frac{1}{\rho}\sin(\rho - \frac{l\pi}{2}) \;=\; -\frac{1}{2ikr}\left[e^{-i(kr-\frac{1}{2}l\pi)} - e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}\right]$$

$$\frac{1}{r}\,e^{-i(\omega t + kr)} \quad : \quad \textbf{ein}\text{laufende Kugelwelle}$$

$$\frac{1}{r}\,e^{-i(\omega t - kr)} \quad : \quad \textbf{aus}\text{laufende Kugelwelle}$$

wobei $\omega = \hbar k^2/(2m)$ (um ein- und auslaufende Wellen zu unterscheiden betrachtet man Ort konstanter Phase $\omega t + kr = 0$). Die sphärische Besselfunktion $j_l(\rho)$ ist also für große Abstände ($kr \gg 1$) eine Superposition von ein– und auslaufenden Kugelwellen. Der Drehimpuls l geht nur via der *Phasenverschiebung* $l\pi/2$ ein.

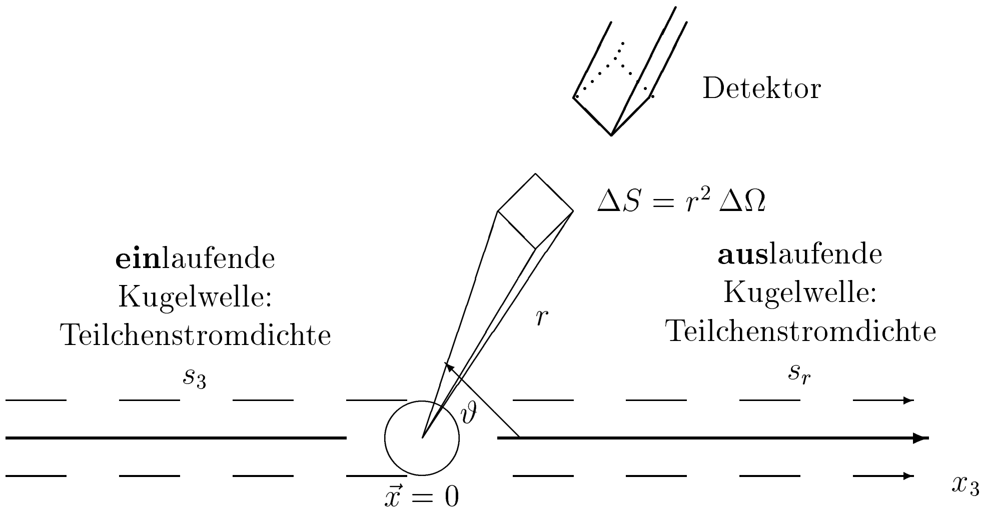
6.4 Elastische Potentialstreuung

6.4.1 Allgemeiner Teil

Voraussetzung
Für die Formulierung der Streutheorie brauchen wir die Annahme, dass die ungebundenen Lösungen der Schrödinger-Gleichung sich im Unendlichen wie ebene Wellen verhalten. Dazu muss das Potential $V(r)$ schnell genug für $r \to \infty$ abfallen, man kann zeigen, daß dies für

$$\lim_{r\to\infty} (rV(r)) \;=\; 0\,,$$

der Fall ist. Die Streuung am Coulomb–Potential braucht daher eine gesonderte Behandlung (siehe Anhang).



Experimenteller Aufbau

Längs der x_3–Achse fallen Teilchen der Stromdichte s_3 (s. Kap. 2.3.2) ein, die am Streuzentrum in $\vec{x} = 0$ (Relativkoordinate) in das Raumwinkelelement $\Delta\Omega$ mit radialer Teilchenstromdichte $s_r(r, \vartheta, \varphi)$ gestreut werden. Durch ein Flächenelement ΔS im Abstand r treten dann pro Zeiteinheit $s_r\,\Delta S$ Teilchen.

$$\begin{array}{rcl} \text{Raumwinkelelement} & : & \Delta\Omega \;=\; \sin\vartheta\,\Delta\vartheta\,\Delta\varphi \\ \text{Fäschenelement} & : & \Delta S \;=\; r^2\,\Delta\Omega \\ \text{Stromdichte einfallender Teilchen} & : & s_3 \\ \text{radiale Teilchenstromdichte} & : & s_r(r,\vartheta,\varphi) = \vec{s}\cdot\vec{e}_r \end{array}$$

Wirkungsquerschnitt

Der *differentielle Wirkungsquerschnitt* für die Streuung in das Raumwinkelelement $\Delta\Omega$ ist durch

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta\sigma(\vartheta,\varphi) &= \frac{s_r r^2 \Delta\Omega}{s_3}\,, \\ \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta,\varphi) &= \frac{s_r(r,\vartheta,\varphi) r^2}{s_3} \end{aligned}}$$

definiert Die Größe $d\sigma/d\Omega$ ist i.a. zusätzlich eine Funktion der Energie $E = \dfrac{1}{2\mu}\hbar^2 k^2$, μ: reduzierte Masse. Falls $V(\vec{x})$ rotationssymmetrisch, so hängt $d\sigma/d\Omega$ nicht mehr von φ ab.

Streuamplituden

Sei $u(\vec{x})$ die Lösung der stationären Schrödinger–Gleichung zum Potential $V(r)$. Diese Lösung soll für große $r = |\vec{x}|$ aus *einlaufender ebener Welle* und *auslaufender Kugelwelle* bestehen:

$$\boxed{u(\vec{x}) \;\sim\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + f(k,\vartheta)\,\frac{e^{ikr}}{r}\,, \qquad \vec{k} = (0,0,k)\,.}$$

Es ist $f(k,\vartheta) = 0$, falls $V(r) = 0$. Die Größe $f(k,\vartheta)$ heißt *Streuamplitude.* Aus der Kontinuitätsgleichung folgt

$$s_3 \;=\; \hbar k_3/\mu, \qquad s_r \;=\; \hbar\, k\, |f(k,\vartheta)|^2/(\mu r^2)\;,$$

und somit

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(k,\vartheta) \;=\; \frac{s_r\, r^2}{s_3} \;=\; |f(k,\vartheta)|^2\;,}$$

da $k_3 = k$.

Entwicklung nach Partialwellen

Für große r gilt für die PartialwellenEntwicklung der ebenen Welle (s. Kap. 6.3.2)

$$\begin{aligned} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \;&=\; \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l\, j_l(kr)\, P_l(\cos\vartheta) \\ &\sim\; -\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, i^l \left(\frac{e^{-i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}}{r} - \frac{e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}}{r}\right) P_l(\cos\vartheta)\,. \end{aligned}$$

Diese ebene Welle entspricht dem Fall $V(r) = 0$. Falls nun $V(r) \neq 0$, so wird (nur) die **aus**laufende Kugelwelle modifiziert. Wir machen den Ansatz:

$$\boxed{u(\vec{x}) \;\approx\; -\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, i^l \left(\frac{e^{-i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}}{r} - S_l(k)\frac{e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}}{r}\right) P_l(\cos\vartheta)\,.}$$

Streuphasen

Bei einer rein elastischen Streuung können keine Teilchen verlorengehen, es werden also nur die Phasen, aber nicht jedoch die Intensitäten der **aus**laufenden Kugelwelle geändert werden. Also gilt $|S_l(k)| = 1$ (bei inelastischer Streuung hat man $|S_l(k)| < 1!$), d.h.

$$\boxed{S_l(k) \;=\; e^{2i\delta_l(k)}\;,}$$

$$\delta_l(k) \quad : \quad \text{zur } l\text{–ten “Partialwelle” gehörige } \textit{Streuphase.}$$

Der Radialanteil $R_l(r)$ der Wellenfunktion verhält sich also für große r asymptotisch wie

$$\boxed{R_l(r) \;\sim\; -\left(\frac{e^{-i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}}{2ikr} - e^{2i\delta_l(k)}\frac{e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}}{2ikr}\right) \;=\; e^{i\delta_l(k)}\,\frac{\sin(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l(k))}{kr}.}$$

Partialwellenentwicklung für Streuamplituden

Da $S_l = (S_l - 1) + 1$, so läßt sich das obige $u(\vec{x})$ auch als

$$u(\vec{x}) \;\sim\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \left[\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, i^l\, \frac{S_l(k)-1}{2ik} P_l(\cos\vartheta)\, \frac{e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}}{r}\right]$$

schreiben. Mit

$$e^{-\frac{i}{2}l\pi} \;=\; i^{-l}, \qquad u(\vec{x}) \;\sim\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + f(k,\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

erhält man für große r die *Partialwellenentwicklung für die Streuamplituden* $f(k,\vartheta)$:

$$\boxed{f(k,\vartheta) \;=\; \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, \frac{e^{2i\delta_l(k)}-1}{2ik}\, P_l(\cos\vartheta)\;.}$$

Totaler Wirkungsquerschnitt

Integrieren wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt über die Einheitskugel, so erhalten wir den *totalen elastischen Wirkungsquerschnitt* $\sigma_{el}(k)$:

$$\sigma_{el}(k) \;=\; \int d\Omega\, |f(k,\vartheta)|^2\;.$$

Wegen der Orthogonalität der $P_l(\cos\vartheta)$ und da $(e^{2i\delta_l}-1)/2i = e^{i\delta_l}\sin\delta_l$ folgt

$$\boxed{\sigma_{el}(k) \;=\; \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l(k)\;.}$$

Optisches Theorem

Für den Imagninätteil $\Im m f(k,\vartheta)$ der Streuamplitude gilt

$$\Im m f(k,\vartheta=0) \;=\; \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\;\sin^2\delta_l(k)\,,$$

da $\Im m(e^{i\delta_l}\sin\delta_l) = \sin^2\delta_l(k)$ und $P_l(1)=1$, und somit

$$\boxed{\Im m f(k,\vartheta=0) \;=\; \frac{k}{4\pi}\sigma_{el}(k).}$$

Dieser Zusammenhang wird das *Optisches Theorem* genannt. Der Verlust an einfallender Intensität (σ_{el}) entsteht durch "kohärente" (elastische) Interferenz.

6.4.2 Streuphasen für den 3-dimensionalen Potentialtopf

Die Streuphasen $\delta_l(k)$ sind bei vorgegebenem Potential aus dem asymptotischen Verhalten der Partialwellen $R_l(kr)$ zu bestimmen. Wir betrachten als Beispiel hierfür den 3-dimensionalen Potentialtopf:

$$\boxed{\begin{array}{lcllll} V(r) & = & -V_0 & \text{für} & r < a \;, & V_0 > 0\,, \\ V(r) & = & 0 & \text{für} & r > a & \end{array}}$$

Analog zum endlich tiefen Potentialtopf in einer Dimension (s. Kap. 3.5) definieren wir

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0+E)} \;; \\ \kappa &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2\mu E}\,, \qquad \text{für } E<0; \\ k &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu E}\,, \qquad \text{für } E>0\,. \end{aligned}$$

Bindungszustände ($E < 0$)
Hier genügt $R_l(r)$ den Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d^2R_l}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l + q^2R_l &= 0\,, \qquad r<a\,, \\ \frac{d^2R_l}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l - \kappa^2R_l &= 0\,, \qquad r>a\,. \end{aligned}$$

Für $r < a$ kommt nur die reguläre Lösung in Frage:

$$R_l(r) = A\,j_l(qr) \;, \;\; r<a\,.$$

Für $r \gg a$ muß die Lösung exponentiell abfallen. Da die (sphärischen Hankel–) Funktionen

$$h_l^{(1)}(\rho) \equiv j_l(\rho) + i\,n_l(\rho)$$

sich asymptotisch wie

$$h_l^{(1)}(\rho) \sim \frac{\sin(\rho - l\pi/2)}{\rho} - \frac{i}{\rho}\cos(\rho - l\pi/2) = \frac{1}{i\rho}e^{i(\rho-\frac{1}{2}l\pi)}$$

verhalten, so kann man für $r > a$

$$R_l(r) = B\,h_l^{(1)}(i\kappa r), \qquad -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu} = E = \frac{\hbar^2q^2}{2\mu} - V_0$$

setzen.

Randbedingungen
Die zulässigen Energiewerte E ergeben sich aus den Randbedingungen

$$\begin{aligned} A\,j_l(aq) &= B\,h_l^{(1)}(ia\kappa) \quad \text{und} \\ A\,\frac{d}{dr}j_l(rq)_{|r=a} &= B\,\frac{d}{dr}h_l^{(1)}(ir\kappa)_{|r=a}\;, \end{aligned}$$

aus denen die transzendenten Bestimmungsgleichungen

$$\boxed{\left.\frac{\frac{d}{dr}j_l(rq)}{j_l(rq)}\right|_{r=a} = \left.\frac{\frac{d}{dr}h_l^{(1)}(ir\kappa)}{h_l^{(1)}(ir\kappa)}\right|_{r=a} \quad , \qquad l = 0, 1, \ldots}$$

folgen. Diese Gleichungen sind i.a. nur numerisch zu lösen.

Tiefer Potentialtopf

Für einen *sehr tiefen* Topf, d.h. $qa \gg l$, kann man auf der linken Seite die asymptotischen Formen für $j_l(rq)$ benutzen:

$$\begin{aligned} j_l(rq) &\sim \frac{1}{rq}\sin(rq - \frac{l\pi}{2}) \ , \\ \frac{dj_l}{dr}(rq) &\sim -\frac{1}{r^2 q}\sin(rq - \frac{l\pi}{2}) + \frac{1}{r}\cos(rq - \frac{l\pi}{2}) \ . \end{aligned}$$

Einsetzen ergibt

$$-\frac{1}{a} + q\cot(qa - \frac{1}{2}l\pi) = \frac{\frac{d}{dr}h_l^{(1)}(ir\kappa)|r = a}{h_l^{(1)}(ia\kappa)} \ .$$

Da die Hankel-Funktionen die Lösungen für $r > a$ (wo $V(x) = 0$) sind, hängt die rechte Seite nicht von V_0 ab. Die linke Seite hängt via q jedoch von V_0 ab, also muß für $|E| \ll V_0$ (hieraus folgt: großem q) der Kotangens auf der linken Seite sehr klein sein:

$$\cot(qa - \frac{1}{2}l\pi) \ \approx \ 0 \ , \quad \text{d. h.}$$

$$\boxed{a\,q \ \approx \ \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi + l\,\frac{\pi}{2} \ , \qquad n = 0, 1 \ldots}$$

Via $q = \sqrt{2\mu(V_0 + E)}/\hbar$ ergeben sich hieraus (für kleine $|E|$) die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände.

Streuzustände ($E > 0$)

Für $r > a$ hat man jetzt

$$\boxed{R_l(r) \ = \ B\,j_l(kr) + C\,n_l(kr)\,,}$$

für $r < a$ gilt wie vorher $R_l(r) = A\,j_l(qr)$ (wobei jetzt $E > 0$). Aus den Stetigkeitsbedingungen bei $r = a$ folgt

$$\boxed{\frac{\frac{d}{dr}j_l(qr)|r = a}{j_l(qa)} = \frac{\frac{d}{dr}(Bj_l(kr) + Cn_l(kr))|r = a}{Bj_l(ka) + Cn_l(ka)} \ .}$$

Damit ist C/B bestimmt!

Verhalten für $r \to \infty$

Das asymptotische Verhalten der sphärischen Bessel- und von Neumann-Funktionen für große r bedeutet für die den Radialteil der Lösung

$$R_l(r) \;\sim\; \frac{1}{kr}\left[B\,\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) \;-\; C\,\cos(kr - \frac{1}{2}l\pi)\right] \;.$$

Mit $\sin(\alpha+\beta) = \sin\alpha\cos\beta + \sin\beta\cos\alpha)$ gilt

$$R_l(r) \;\sim\; \frac{e^{i\delta_l}}{kr}\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l) \;=\; \frac{e^{i\delta_l}}{kr}\Big(\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)\cos(\delta_l) + \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi)\sin(\delta_l)\Big)$$

für den allgemeinen Ausdruck des Radialanteils durch die Streuphasen und somit

$$B \;=\; e^{i\delta_l}\cos(\delta_l), \qquad C \;=\; -e^{i\delta_l}\sin(\delta_l), \qquad \tan\delta_l(k) = -\frac{C}{B}\,.$$

Wir eliminieren C/B und erhalten schlussendlich die Streuphasen:

$$\boxed{\tan\delta_l(k) \;=\; \frac{\frac{d}{dr}j_l(kr)_{|a}\; j_l(qa) - \frac{d}{dr}j_l(qr)_{|a}\; j_l(ka)}{\frac{d}{dr}n_l(kr)_{|a}\; j_l(qa) - \frac{d}{dr}j_l(qr)_{|a}\; n_l(ka)}\;.}$$

6.4.3 Diskussion der Grenzfälle

Niederenergie-Streuung $ka \ll l$

Es sei V_0, d.h. q, beliebig. Da

$$j_l(\rho) \;\approx\; \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \qquad n_l(\rho) \approx -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}, \qquad \text{für} \quad \rho \to 0\;,$$

erhält man

$$\boxed{\tan\delta_l(k) \;\approx\; \frac{2l+1}{[(2l+1)!!]^2}(ka)^{2l+1}\,\frac{l j_l(qa) - a\frac{d}{dr}j_l(qr)_{|a}}{(l+1)j_l(qa) + a\frac{d}{dr}j_l(qr)_{|a}}\;.}$$

Schwellen-Verhalten

Das *Schwellen-Verhalten*

$$\boxed{\tan\delta_l(k) \;\approx\; c_l k^{2l+1} \qquad \text{für} \qquad k \to 0}$$

gilt nicht nur für den Potentialtopf, sondern für alle Potentiale, deren Streuverhalten für $k \to 0$ bzw. $r \to 0$ durch das Zentrifugalpotential dominiert wird.

Schreibt man für den totalen elastischen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{el}(k) \;=\; \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k), \qquad \boxed{\sigma_l(k) \;=\; \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \sin^2 \delta_l(k)\ ,}$$

so hat man für $k \to 0$, da $\sin\alpha \approx \tan\alpha$ für $\alpha \to 0$,

$$\boxed{\begin{aligned} \sigma_l(k) \;&=\; \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} |C_l|^2\, k^{4l+2}\ , \quad \text{d.h.} \\ \lim_{k\to 0} \sigma_l(k) \;&=\; \begin{cases} const. \neq 0 & \text{für} \quad l = 0\,, \\ 0 & \text{für} \quad l \neq 0\,. \end{cases} \end{aligned}}$$

Unitärer Limes

Für gewisse Energien $E_R = \dfrac{1}{2\mu}\hbar^2 k_R^2$ *verschwindet der Nenner* in der obigen Formel für $\tan\delta_l(k)$. Man hat dann

$$\boxed{\tan\delta_l(k_R) = \pm\infty \qquad \text{d.h.} \qquad \delta_l(k_R) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\ , \qquad n \text{ ganze Zahl.}}$$

Da $\sin^2[(n+\frac{1}{2})\pi] = 1$ werden die Größen $\sigma_l(k)$ für $k = k_R$ maximal:

$$\boxed{\sigma_l(k_R) \;=\; \frac{4\pi(2l+1)}{k_R^2} \;=\; \frac{4\pi\hbar^2(2l+1)}{2\mu E_R}}$$

(unitärer Limes).

Resonanzstreuung

Diese Phänomen läßt sich als eine Resonanzerscheinung interpretieren. Der Einfachheit halber sei

$$\frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0+E)} \;=\; qa \;\gg\; l \;\gg\; ka \;=\; \frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu + E}$$

(tiefer Topf und Niederenergiestreuung). Bei dieser Approximation kann man die Näherungsformel für $\tan\delta_l$ von S. 93 benutzen. Für $k = k_R$, $q = q_R$ hat man die Bedingung

$$(l+1) j_l(q_R a) \;+\; a\frac{d}{dr} j_l(q_R r)_{|a} \;=\; 0\ .$$

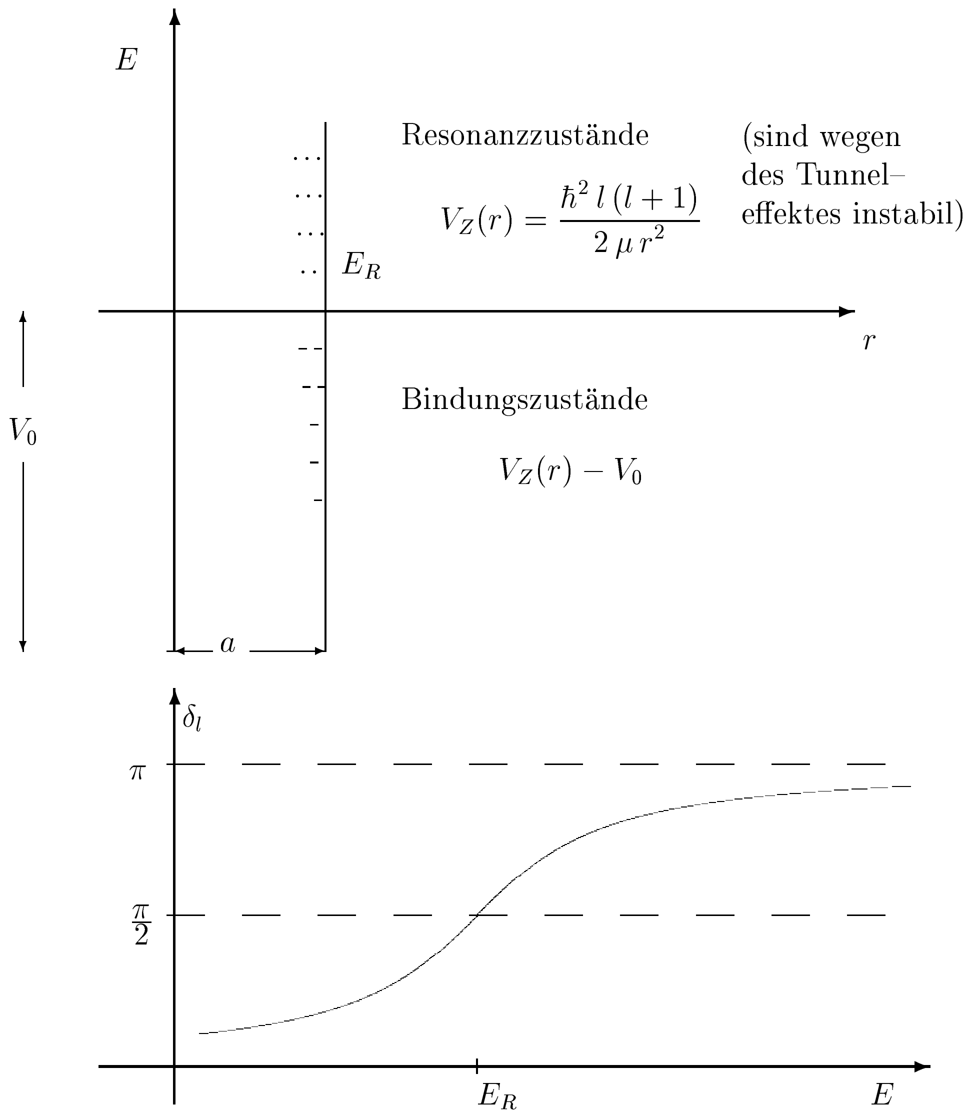
Wegen der Annahme $q_R a \gg l$ können wir für die sphärische Besselfunktion den genäherten Ausdruck für große Argumente benützen (S. 92),

$$0 \;=\; \frac{l}{aq_R}\sin(q_R a - \frac{l\pi}{2}) \;+\; \cos(q_R a - \frac{l\pi}{2}) \;\approx\; \cos(q_R a - \frac{l\pi}{2})\ .$$

Hieraus folgt

$$\boxed{a\, q_R \;=\; n\,\pi + \frac{1}{2}\,(l+1)\,\pi \;, \qquad n \text{ ganz} \;.}$$

Dies sind aber gerade die gleichen Bedingungen wie für die diskreten gebundenen Zustände von S. 92! Im Unterschied zu den gebundenen Zuständen ist hier jedoch $E_R > 0$. Es handelt sich um vom System ausgezeichnete (bevorzugte) diskrete Energieniveaus, die z.B. bei der Streuung angeregt werden, ähnlich wie bei erzwungenen Schwingungen in der Mechanik und Elektrodynamik: Bei ganz bestimmten Frequenzen $\omega_R = \frac{1}{\hbar} E_R$ der einfallenden Teilchen werden die Eigenschwingungen des streuenden Systems angeregt. Die Resonanz–Niveaus E_R lassen sich in gewisser Hinsicht als instabile Bindungszustände interpretieren:



Breit-Wigner Formel

In der Nähe der Resonanz kann man näherungsweise

$$\boxed{\tan\delta_l \;=\; \gamma_l \,\frac{(ka)^{2l+1}}{E-E_R}\,, \qquad \gamma_l = const.\,.}$$

setzen. Für den Wirkungsquerschnitt σ_l der Partialwelle l ergibt sich daraus

$$\boxed{\begin{aligned}\sigma_l(E) &= \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\sin^2\delta_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\frac{\tan^2\delta_l}{1+\tan^2\delta_l}\\ &= \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\frac{\left(\gamma_l(ka)^{2l+1}\right)^2}{(E-E_R)^2+(\gamma_l(ka)^{2l+1})^2}\,.\end{aligned}}$$

Dies ist die *Breit-Wigner-Formel* für den Wirkungsquerschnitt in der Umgebung der Resonanzenergie E_R.

Resonanzbreite
Für die Partialwelle

$$f_l(k) \;=\; \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l(k)}-1\right) \;=\; \frac{1}{2ik}\left(\frac{1+i\tan\delta_l}{1-i\tan\delta_l}-1\right)$$

erhält man

$$\boxed{f_l(k) \;=\; \frac{1}{k}\,\frac{\gamma_l(ka)^{2l+1}}{E-E_R-i\gamma_l(ka)^{2l+1}}}$$

Die Größe

$$\boxed{\Gamma_l = 2\gamma_l\,(ka)^{2l+1}}$$

bezeichnet man als die Breite der Resonanz (da $\sigma_l(E_R \pm \frac{1}{2}\Gamma_l) = \frac{1}{2}\sigma_l(E_R)$).

Die Resonanzstreuung spielt eine ganz große Rolle in der Atom-, Kern- und Elementarteilchenphysik! Die Formeln gelten für viele Potentiale. Vgl. auch Kap. 3.7 bei Schwabl, Quantenmechanik.

6.4.4 Literatur zur Streutheorie

Literatur über Kugel-, Zylinder- und andere spezielle Funktionen

Die folgende Literatur enthält weitere Einzelheiten der in der Quantenmechnik häufig auftretenden speziellen Funktionen:

- A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger and F.G. Tricomi, Higher Transzendental Functions, Vols. 1-3, Mc Graw Hill Book Co. Inc. New York etc. 1953-55.

- Schäfke, Einführung in die Theorie der speziellen Funktionen der mathematischen Physik, Springer-Verlag, Berlin etc. 1963.

- N.N. Lebedev, Special Functions and their Applications, Prentice Hall, Englewood Cliffs 1965.
- W. Magnus, F. Oberhettinger and R.P. Soni, Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics, 3rd Ed. , Springer-Verlag 1966.
- Y.L. Luke, The Special Functions and their Approximations, vols. I u. II, Academic Press, New York 1969.

Literatur zur Streutheorie

Es gibt viele Bücher über die quantenmechanische Streutheorie. Hier zwei Beispiele:

- R.G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin etc. 1982
- J.R. Taylor, Scattering Theory, J. Wiley, New York 1972