

DICHTE DER ENZUSTÄNDE

In der Vorlesung wurden im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie der Photo-Effekt behandelt. Dies ist ein Beispiel, bei dem man sehr genau die Dichte der auslaufenden Zustände in $\chi(E)$ bestimmen muß, zumal man im allgemeinen weitere Einschränkungen an die Endzustände hat. In dem gegebenen Beispiel ist dies die Richtung $\hat{\mathbf{p}}$ des auslaufenden Impulses \mathbf{p} , die durch den Ort des Detektors festgelegt wird. Der Betrag p des Impulses legt die Energie fest. Wir wollen also die Dichte der Zustände in $\chi(E, \hat{\mathbf{p}})$ bestimmen.

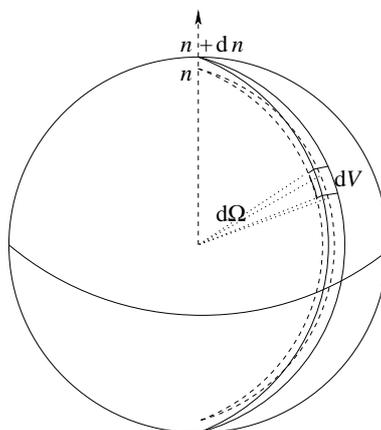
Ebene Wellen im Kasten. Die Dichte $\mu(E)dE$, bzw. genauer $\mu(E, \hat{\mathbf{p}})dEd\Omega$, ebener Wellen mit Energie im Intervall $(E, E + dE)$ und Ausbreitungsrichtung im Raumwinkel $d\Omega$ ist nicht so einfach zu bestimmen, da die Variablen $E, \hat{\mathbf{p}}$ kontinuierlich sind. Das Problem läßt sich vereinfachen, wenn man zunächst das Problem im endlichen würfelförmigen Kasten der Kantenlänge L betrachtet, und am Schluß den Limes $L \rightarrow \infty$ nimmt, um den kontinuierlichen Fall zurückzuerhalten. Im endlichen Kasten müssen die ebenen Wellen periodischen Randbedingungen genügen. Mit $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ nehmen die Wellenfunktionen daher die Form

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{L^{3/2}}$$

an. Die erlaubten Werte für die Komponenten (k_x, k_y, k_z) sind offensichtlich

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad i \in \{x, y, z\}.$$

Im Limes $L \rightarrow \infty$ gehen die k_i in kontinuierliche Variablen über, wie wir es haben wollen. Das Problem, die Dichte $\mu(E, \hat{\mathbf{p}})$ zu bestimmen, reduziert sich damit auf das Abzählen der Zustände, die durch Punkte $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ eines drei-dimensionalen Gitters gegeben sind. Dazu definieren wir noch die Länge eines solchen Gittervektors ganz normal als $n^2 = \mathbf{n}^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. Diese Länge n (nicht die einzelnen n_i Komponenten!!) kann für $L \rightarrow \infty$ in guter Näherung ebenfalls als kontinuierliche Variable angesehen werden. Wir betrachten nun ein kleines Volumenelement im Gitterraum, charakterisiert dadurch, dass die Länge des Gittervektors im Intervall $(n, n + dn)$ liegen soll und seine Richtung $\hat{\mathbf{n}} \in d\Omega$ in einem kleinen Raumwinkel liegen soll.



Dieses Volumenelement hat das Volumen $dV = n^2 dn d\Omega$. Die Energie eines Endzustandes ist durch p , also durch k und damit durch n gegeben, nämlich für Elektronen mit Masse m_e als

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{(2\pi)^2 n^2}{L^2}.$$

Desweiteren ist die Richtung des radialen Vektors im Gitterraum per constructionem mit der Richtung des Impulses des Endzustandes identisch, d.h. $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{n}}$. Wenn wir noch beachten, dass $\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m_e}$ ist, so können wir das Volumenelement dV leicht in den Variablen E und k ausdrücken:

$$dV = n^2 d\Omega \frac{dn}{dE} dE = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 k^2 \frac{dk}{dE} dE d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} k dE d\Omega.$$

Dieses Volumenelement ist nichts anderes als das gesuchte $\mu(E)dE$, wobei wir genau einen Zustand pro Einheitsvolumen $(2\pi\hbar)^{-3}d^3x d^3p$ im Phasenraum nehmen. Wir erinnern uns noch an die Formel für den Wirkungsquerschnitt für die Absorption eines Photons der Energie $\hbar\omega$, Polarisation $\hat{\epsilon}$ und Ausbreitungsrichtung $\hat{\nu} \perp \hat{\epsilon}$,

$$\sigma_{\text{abs}} = \int_{E \simeq E_i + \hbar\omega} \frac{4\pi^2 \hbar \alpha}{m_e^2 \omega} \left| \langle \mathbf{k} | e^{i\frac{\omega}{c}(\hat{\nu} \cdot \mathbf{x})} \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \right|^2 \mu(E) dE,$$

wobei wir $\alpha = e^2/(\hbar c) \simeq 1/137$ gesetzt haben. Damit ergibt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt einfach als

$$\frac{d\sigma_{\text{abs}}}{d\Omega} = \frac{4\pi^2 \hbar \alpha}{m_e^2 \omega} \left| \langle \mathbf{k} | e^{i\frac{\omega}{c}(\hat{\nu} \cdot \mathbf{x})} \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \right|^2 \frac{m_e k L^3}{\hbar^2 (2\pi)^3}.$$

Ausrechnen für K -Schalen Elektron. Wir wollen das für den Ausstoß eines K -Schalen Elektrons genauer ausrechnen. Für das K -Schalen Elektron ist $|i\rangle$ im wesentlichen durch die Grundzustandswellenfunktion eines wasserstoffartigen Atoms gegeben, wobei der Bohr'sche Radius einfach durch $a_0 \mapsto a_0/Z$ ersetzt wird, wenn das Atom Kernladungszahl Z besitzt. Das Matrixelement ergibt sich damit zu

$$\langle \mathbf{k} | e^{i\frac{\omega}{c}(\hat{\nu} \cdot \mathbf{x})} \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | i \rangle = \hat{\epsilon} \cdot \int d^3x \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{L^{3/2}} e^{i\frac{\omega}{c}(\hat{\nu} \cdot \mathbf{x})} (-i\hbar \nabla) \left(e^{-Zr/a_0} \frac{Z^{3/2}}{a_0^{3/2}} \right),$$

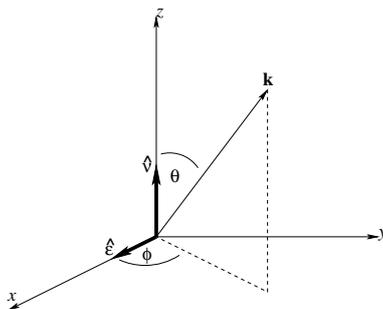
wobei wir $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ eingesetzt haben. Partielle Integration bringt den ∇ -Operator auf die linke Seite des Integranden. Da $\hat{\epsilon}$ auf $\hat{\nu}$ senkrecht steht, ist

$$\hat{\epsilon} \cdot (\nabla e^{i\frac{\omega}{c}(\hat{\nu} \cdot \mathbf{x})}) = 0.$$

Im verbleibenden Term ergibt ∇ , wirkend auf $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$, einfach einen Faktor $-i\mathbf{k}$, der aus dem Integral herausgezogen werden kann. Alles, was dann noch da steht, ist einfach die Fourier-Transformierte bezüglich der Variablen $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \frac{\omega}{c}\hat{\nu}$. Man kann das weiter ausrechnen und erhält schließlich

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32e^2 k \frac{(\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 Z^5}{m_e c \omega a_0^5} \frac{1}{\left[\frac{Z^2}{a_0^2} + q^2 \right]^4}.$$

Den Impulsübertrag \mathbf{q} mißt man im allgemeinen nicht direkt, sondern man mißt die Streuwinkel ϕ, θ , die das betrachtete Raumwinkelement $d\Omega$ charakterisieren. Wählt man das Koordinatensystem so, wie in der untenstehenden Figur, so ergibt sich $(\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 = k^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi$ und $q^2 = k^2 - 2k\frac{\omega}{c} \cos \theta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2$, womit sich der differentielle Streuquerschnitt durch θ und ϕ ausdrücken läßt.



DER WIRKUNGSQUERSCHNITT

Die Definition des Wirkungsquerschnittes ist in der Vorlesung etwas zu kurz gekommen. Anschaulich ist diese Größe einfach wie folgt definiert: Geht man wieder von der Situation aus, dass der Anfangszustand durch eine ebene Welle gegeben ist, der Endzustand dann in einem kleinen Bereich gesucht wird, der durch den Raumwinkel $d\Omega$ charakterisiert wird, so stellt sich folgende physikalische Frage: Wird das Experiment sehr oft wiederholt, z.B. weil der Anfangszustand ein steter Strom von einlaufenden Teilchen ist, allerdings so dünn, dass diese Teilchen nicht untereinander wechselwirken, so interessiert man sich dafür, in welchem Verhältnis der entsprechende Strom durch die Detektorfläche $d\sigma$, zum einlaufenden Strom steht.

Definition des Streuquerschnittes. Es bezeichne \mathbf{J} den Strom der einlaufenden Teilchen, also $J = |\mathbf{J}|$ die Zahl der einlaufenden Teilchen pro Zeit und pro Flächeneinheit senkrecht zur Einfallsrichtung. Dies nennt man eine Teilchenstromdichte. Man mißt nun mit geeigneten Detektoren die Zahl N_S der pro Zeiteinheit in den Raumwinkel

$d\Omega$, charakterisiert durch die Richtung $\Omega = (\theta, \phi)$, gestreuten Teilchen. Natürlich ist diese Zahl N_S proportional zu J ,

$$N_S = J \Sigma(\Omega) d\Omega.$$

Der Proportionalitätsfaktor kann vom betrachteten Raumwinkelement abhängen, was wir in der Notation kenntlich gemacht haben. In der Praxis der Nieder- und Mittelenergie Streuexperimente wird der Strahl einlaufender Teilchen meist auf ein fixes Target gelenkt, das aus einer großen Zahl N einzelner Atome besteht. Es ist daher nicht immer klar, dass die N verschiedenen Streuzentren sich nicht gegenseitig beeinflussen und ferner es nicht zu Mehrfachstreuungen kommt. In Experimenten der Hochenergiephysik werden allerdings meist zwei Strahlen im Schwerpunktsystem aufeinander gelenkt, und hier ist die Annahme, dass die N Streuzentren unabhängig voneinander sind, im allgemeinen sehr gut erfüllt (Mehrfachstreuung tritt so gut wie nicht auf). Wir wollen vereinfachend davon ausgehen, dass keine Kohärenz der an den N Streuzentren gestreuten Wellen auftritt (was z.B. bei der Beugung von Elektronen, thermischen Neutronen und Röntgenstrahlen an Kristallen eine *falsche* Annahme ist!!). Jedes Streuzentrum kann dann unabhängig von den anderen betrachtet werden. Dann ist N_S offensichtlich auch proportional zu N ,

$$N_S = J N \sigma(\Omega) d\Omega.$$

Der Faktor $\sigma(\Omega)$ hat per constructionem die Dimension einer Fläche, und ist der sogenannte *differentielle Wirkungsquerschnitt* (*differential cross section*) des Streuprozesses. Der *totale Wirkungsquerschnitt* (*total cross section*) des Prozesses ergibt sich dann durch Integration über den gesamten Raumwinkel,

$$\sigma = \int_{S^2} \sigma(\Omega) d\Omega.$$

Man schreibt häufig auch $\sigma(\Omega) = \frac{d\sigma}{d\Omega}$.

Beziehung zur Streuamplitude. In der Vorlesung haben wir mittels der Lippmann-Schwinger-Gleichung die Wellenfunktion des auslaufenden gestreuten Zustandes bestimmt. Für den Fall, dass der einlaufende Zustand eine ebene Welle ist, ergab sich für lokale Potentiale V , $\langle \mathbf{x} | V | \mathbf{x}' \rangle = V(\mathbf{x}) \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \Psi^{(+)} \rangle &= \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{+ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \Psi^{(+)} \rangle \\ \stackrel{r \gg 1}{\rightarrow} &\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{-ik' \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \Psi^{(+)} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{ik \cdot \mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right], \end{aligned}$$

wobei wir $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{x}}$ gesetzt haben. In konventioneller Notation heißt dies, dass die Streuwelle für große Abstände vom Streuzentrum einfach gegeben ist als

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \simeq e^{ik \cdot \mathbf{x}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Wir erinnern uns aus Quantenmechanik I, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Amplitude Ψ einfach $|\Psi|^2$ ist, und die (Wahrscheinlichkeits-) Stromdichte einer Amplitude Ψ gegeben ist durch den Ausdruck

$$\mathbf{J} = -i \frac{\hbar}{2m} (\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi).$$

Die ebene Welle, der erste Term in der Gleichung für $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$, hat demnach die Wahrscheinlichkeitsdichte 1 und die Stromdichte $\mathbf{J}_{\text{einlaufend}} = \hbar \mathbf{k} / m$. Die Stromdichte für den zweiten Term ergibt sich in führender Ordnung zu

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{auslaufend}} = \mathbf{J} \left(f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \right) &= -i \frac{\hbar}{2m} \left[\frac{\mathbf{x}}{r^3} \frac{1}{r^2} - \frac{\mathbf{x}}{r^3} \frac{1}{r^2} + (ik) \frac{\mathbf{x}}{r} \frac{1}{r^2} - (-ik) \frac{\mathbf{x}}{r} \frac{1}{r^2} \right] |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \\ &= -i \frac{\hbar}{2m} 2ik \hat{\mathbf{x}} \frac{1}{r^2} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \\ &= \frac{\hbar}{mr^2} \mathbf{k}' |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \end{aligned}$$

Hierbei wurde wieder die Beziehung $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{x}}$ verwendet. Wir müssen nun noch beachten, dass das Flächenelement für den Raumwinkel $d\Omega$ im Abstand r , wo der Detektor sitzt, natürlich die Fläche $r^2 d\Omega$ besitzt. Damit finden wir

den differentiellen Wirkungsquerschnitt als

$$\begin{aligned}\sigma(\Omega)d\Omega &= \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{|\mathbf{J}_{\text{ausl.}}|}{|\mathbf{J}_{\text{einl.}}|}r^2d\Omega, \\ \implies \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{|\frac{\hbar}{mr^2}\mathbf{k}'|f(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2}{|\hbar\mathbf{k}/m|}r^2 = |f(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2,\end{aligned}$$

wobei beim letzten Schritt ausgenutzt wurde, dass $k = |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ ist. Damit ist das Ergebnis der Vorlesung nochmals, und nun hoffentlich ausreichend ausführlich, abgeleitet worden.

Zusammenhang mit zeitabhängiger Störungstheorie. Unser zeitunabhängiger Zugang zur Streutheorie ist nicht der einzige mögliche. In einer zeitabhängigen Formulierung muss man die zeitabhängige Schrödingergleichung lösen. Dabei muss, um überhaupt den einlaufenden Zustand für $t \rightarrow -\infty$ als ein freies Teilchen annehmen zu können, das Potential $V(t)$ für $t \rightarrow -\infty$ verschwinden. Dies wird genau durch das adiabatische Einschalten des Potentials $V \mapsto \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{\eta t}$ erreicht, das wir aus der zeitabhängigen Störungstheorie kennen. Man kann nun zeigen, dass dieser Zugang zu exakt der selben Lippmann-Schwinger-Gleichung führt, wie der zeitunabhängige Zugang.

Mehr noch, man kann insbesondere Fermi's Goldene Regel anwenden, und erhält genau die Born'sche Näherung. Nimmt man für $t \rightarrow -\infty$ den Anfangszustand als ebene Welle $|\mathbf{k}\rangle$ an, so werden offensichtlich unter langsamen Einschalten der Wechselwirkung auch andere Zustände, d.h. andere ebene Wellen $|\mathbf{k}'\rangle$, besetzt. Die Übergangsamplitude ist in erster Näherung

$$\langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \mathbf{k}' | H_I(t') | \mathbf{k} \rangle,$$

wobei $H_I(t') = \exp(\frac{i}{\hbar}H_0t')V \exp(-\frac{i}{\hbar}H_0t') \exp(\eta t)$ ist. Setzen wir wieder $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ so finden wir für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$P(|\mathbf{k}\rangle \rightarrow |\mathbf{k}'\rangle) = \left| \langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{|\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{(E_k - E_{k'})^2 / \hbar^2 + \eta^2},$$

was im Limes $\eta \rightarrow 0$ für endliche Zeiten t zu genau der Übergangsrate führt, die wir von der Goldenen Regel her kennen:

$$\Gamma_{|\mathbf{k}\rangle \rightarrow |\mathbf{k}'\rangle} = \frac{d}{dt} \left| \langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_k - E_{k'}).$$

Um daraus den differentiellen Wirkungsquerschnitt berechnen zu können, ist es wieder hilfreich, die ebenen Wellen in einem endlichen, würfelförmigen Kasten der Kantenlänge L zu betrachten (und später den Limes $L \rightarrow \infty$ zu nehmen). Dies umgeht die schwierige Normierung der freien ebenen Wellen, $\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, da wir nun ein diskretes Spektrum erhalten, $k_i = 2\pi n_i / L$ mit $n_i \in \mathbb{Z}$ für $i \in \{x, y, z\}$, und die Normierung $\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$ verwenden können. Die Vollständigkeitsrelation geht dabei von der freien Form $\mathbb{1} = \int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|$ in die Summe $\mathbb{1} = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|$ über. Wie schon im Abschnitt zur Dichte der Endzustände beschrieben, ändert sich auch die Ortsraumdarstellung der ebenen Wellen von $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ zu $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$. Im Limes $L \rightarrow \infty$ können wir die k_i als kontinuierliche Variablen ansehen, so dass $\mathbb{1} = (\frac{L}{2\pi})^3 \int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|$ sein muss. Das stimmt mit der Relation für freie Wellen bis auf den Faktor $(L/2\pi)^3$ überein. Man muss sich also für den Übergang von der freien zur Kasten-Normierung nur die Konvention

$$(2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle_{\text{freie Norm.}} = L^3 \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle_{\text{Kasten-Norm.}}$$

merken. Damit erhalten wir nämlich für die Dichte der in den Raumwinkel $d\Omega$ gestreuten Zustände wieder das geübte Resultat $n^2 dnd\Omega = (\frac{L}{2\pi})^3 \frac{km}{\hbar^2} dE d\Omega$. Die Übergangsrate für elastische Streuung ($k' = k$) in ein Ensemble von Zuständen $|\mathbf{k}'\rangle$ mit Energie $E_{k'} \simeq E_k$ und Richtung $\hat{\mathbf{k}}'$ im Raumwinkel $d\Omega$ ergibt sich gemäß der Goldenen Regel zu

$$\Gamma_{|\mathbf{k}\rangle \rightarrow \chi(E_k, d\Omega)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{km}{\hbar^2} d\Omega.$$

Diese Rate muss genau dem Verhältnis von $\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$ zum einlaufenden Fluss entsprechen. Der einlaufende Fluss ist natürlich $J = |\mathbf{J}| = \frac{\hbar}{m} |\text{Im}(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} L^{-3/2} \nabla e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} L^{-3/2})| = \frac{\hbar k}{mL^3}$. Das ergibt, alles zusammengeschrubt,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mL^3}{\hbar k} \right) \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \left(\frac{km}{\hbar^2} \right) \left| \frac{1}{L^3} \int d^3x V(\mathbf{x}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} \right|^2 = \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x V(\mathbf{x}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} \right|^2,$$

was exakt die erste Born'sche Näherung ist. Natürlich könnte man höhere Ordnungen der Born-Entwicklung analog durch höhere Ordnungen der zeitabhängigen Störungstheorie erhalten. Man beachte, dass die Goldene Regel die Fourier-Transformation der Zeitabhängigkeit des Potentials involviert, die Born'sche Näherung nun auch die Fourier-Transformation der räumlichen Abhängigkeit des Potentials.