Partialwellenzerlegung

Bei der Partialwellenzerlegung nutzt man die Tatsache aus, dass der Gesamtdrehimpuls vor der Kollision der Teilchen miteinander und nach der Kollision erhalten bleibt. Es wird ein sphärisch symmetrisches Potential betrachtet. Die Einfallende Welle bewegt sich in die z-Richtung. Wie uns schon aus der Streutheorie bekannt ist besteht die Lösung (Zustandsfunktion) aus einer einlaufenden Ebenen-Welle und einer auslaufenden Kugel-Welle.

$$\psi(r) = e^{ikr\cos\theta} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{1}$$

Die allgemeine Lösung für ein zentralsymmetrisches Problem ist die Überlagerung aller Radialfunktionen mit der Kugelflächenfunktionen (siehe Wasserstoffatom)

$$\psi(r) = \sum_l \sum_m C_{lm} R_{kl}(r) \cdot Y_{lm}(\phi, \theta) \tag{2}$$

Man geht davon aus dass das Target eine Kugel ist. Dadurch ist das Problem Rotationsinvariant bezüglich dem Winkel ϕ. Das heist, egal von welcher Seite man die Kugel betrachtet, man sieht immer die gleiche Streufläche. Deswegen muss die Quantenzahl m gleich Null sein. Dadurch vereinfacht sich die Gleichung (2) zu

$$\psi(r) = \sum_l a_l R_{kl}(r) \cdot Y_{l0}(\theta) = \sum_l a_l R_{lk}(r) \cdot P_l(\cos\theta) \tag{3}$$

Wobei $P_l(\cos\theta)$ die Legendre-Polynome sind

$$P_l(\cos\theta) \equiv P_l^0(\cos\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{d^l}{d\cos\theta^l} sin^{2l}\theta \tag{4}$$

Es gilt die beiden Gleichungen (1) und (3) so anzupassen, dass man durch ein Vergleich die Streuamplitude $f(\theta)$ bestimmen kann und damit auch den Wirkungsquerschnitt. Dies gelingt wenn man beide Gleichungen in Form von sich überlagernden Kugelwellen darstellt.
In der Gleichung (1) müssen wir dazu den ersten Term, was eine ebene Welle darstellt, in Kugelwellen umformen. Jede ebene Welle lässt sich als Linearkombination der sphärischen Besselfunktionen $j_l(kr)$ und Legendre-Polynomen $P_l(\cos\theta)$ darstellen

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_l i^l(2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{5}$$

Da der Detektor in der Regel sehr weit weg vom Target sich befindet, wollen als nächstes eine Grenzwertberachtung für $r \to \infty$ machen. Die Sphärischen Besselfunktionen $j_l(kr)$ sind definiert als

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x} \tag{6}$$

Nach der ersten Ableitung des Ausdrucks $\frac{\sin x}{x}$ sieht die Gleichung folgendermaßen aus

$$j_l(x) = (-x)^l \frac{1}{x^l}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1}\left(\frac{\cos x}{x} - \frac{\sin x}{x^2}\right) \tag{7}$$

Wegen $x = kr$ geht der hintere Term $\frac{\sin x}{x^2}$ schneller gegen Null und wird somit vernachlässigt. Damit können wir näherungsweise schreiben

$$j_l(x) \approx (-x)^l \frac{1}{x^l}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1} \frac{\cos x}{x} \tag{8}$$

Da die Ableitung (Produktregel) von $\frac{1}{x}$ vernachlässigt wird kann man $\frac{1}{x}$ vor die Ableitung ziehen. Die Gleichung (6) reduziert sich auf

$$j_l(x) \approx (-x)^l \frac{1}{x^{l+1}} \left(\frac{d}{dx}\right)^l \sin x \tag{9}$$

Die l-fache Ableitung bewirkt nur dass sich das Vorzeichen ändert aus dem sin ein cos wird bwz. andersherum und deswegen kann man schreiben

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^l \sin x = (-1)^l \sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right) \tag{10}$$

Gleichung (10) in (9) eingesetzt ergibt

$$\begin{aligned} j_l(x) &\approx (-x)^l \frac{1}{x^{l+1}} (-1)^l \sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right) \\ &= \cancel{(-1)^l \frac{x^l}{x^l} (-1)^l} \frac{1}{x} \sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right) \end{aligned} \tag{11}$$

Damit lautet die sphärische Besselfunktion im Limes $r \to \infty$

$$j_l(x) = \frac{1}{x} \sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right) \tag{12}$$

Damit können wir die Zustandsfunktion Gleichung (1) mit Hilfe der Ebenen Welle Gleichung (5) und der Approximation für $r \to \infty$(12) schreiben

$$\begin{aligned} \psi(r) &= \sum_l i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \sum_l i^l (2l+1) \frac{1}{kr} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta) + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned} \tag{13}$$

Für den Ausdruck $\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)$ in Gleichung (13) gilt

$$\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2i}[e^{ikr} \underbrace{\left(e^{-i\frac{\pi}{2}}\right)^l}_{-i^l} - e^{-ikr} \underbrace{\left(e^{i\frac{\pi}{2}}\right)^l}_{i^l}] = \frac{1}{2i}[(-i)^l e^{ikr} - i^l e^{-ikr}] \tag{14}$$

Eingesetzt in Gleichung (13) und ausmultipliziert ergibt

$$\begin{aligned} \psi(r) &= \sum_l i^l (2l+1) \frac{1}{kr}\frac{1}{2i}[(-i)^l e^{ikr} - i^l e^{-ikr}] P_l(\cos\theta) + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \sum_l i^l (2l+1) \frac{1}{kr}\frac{1}{2i}(-i)^l e^{ikr} P_l(\cos\theta) - \sum_l i^l (2l+1)\frac{1}{kr}\frac{1}{2i} i^l e^{-ikr} P_l(\cos\theta) + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \frac{e^{ikr}}{r}\left[f(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_l i^l (-i)^l (2l+1) P_l(\cos\theta)\right] - \frac{e^{-ikr}}{2ikr}\sum_l i^{2l}(2l+1)P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{15}$$

Somit können wir die Gleichung (1) als einlaufende und auslaufende (gestreute) Kugelwelle darstellen

$$\boxed{\psi(r) = -\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{1}{2ik}\sum_l i^{2l}(2l+1)P_l(\cos\theta) + \frac{e^{ikr}}{r}\left[f(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_l i^l(-i)^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\right]} \tag{16}$$

Um die Streuamplitude $f(\theta)$ bestimmen zu können, brauchen noch eine weitere Bedingung für ψ, die wir aus der Gleichung (3) gewinnen können

$$\psi(r) = \sum_l a_l R_{kl}(r) \cdot P_l(\cos\theta) \tag{17}$$

Die Gleichung (17) ist die Lösung für die Schrödingergleichung in einem zentralsymmetrischen Potential. Dabei muss die Radialfunktion $R_{kl}(r)$ folgender DGL genügen

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right](rR_{kl}(r)) = \frac{2m}{\hbar^2}V(r)(rR_{kl}(r)) \tag{18}$$

Wir nehmen an dass das Potential $V(r)$ für $r \to \infty$ verschwindet. Ebenso wird der Term $\frac{1}{r^2}$ für große r stark unterdrückt. Damit reduziert sich die Gleichung (18) zu

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2\right](rR_{kl}(r)) = 0 \tag{19}$$

Die allgemeine Lösung für die Gleichung (19) ist eine Linearkombination aus den sphärischen Bessel- und Neumanfunktionen.

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \tag{20}$$

Für die Bessel- und Neumannfunktionen gilt

$$\text{Bessel: } j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l \frac{\sin x}{x} \tag{21}$$

$$\text{Neumann: } n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l \frac{\cos x}{x} \tag{22}$$

Wir betrachten wieder den Limes für $r \to \infty$. Wie in der Gleichung (12) gezeigt wurde lässt sich die Besselfunktion schreiben als $\sin(kr - \frac{l\pi}{2})/kr$. Analoge Rechnung kann man für die Neumannfunktion durchführen, so dass man erhält

$$j_l(x) = \frac{1}{x}\sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right) \qquad \text{für } r \to \infty \tag{23}$$

$$n_l(x) = -\frac{1}{x}\cos\left(x - l\frac{\pi}{2}\right) \qquad \text{für } r \to \infty \tag{24}$$

Mit diesen beiden Funktionen (23) und (24) sieht die Gleichung (20) wie folgt aus

$$R_{kl}(r) = A_l\frac{1}{kr}\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) - B_l\frac{1}{kr}\cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \tag{25}$$

Da die Radialfunktion für r gegen Null verschwinden muss, repräsentiert der Kosinus-Term keine physikalisch akzeptable Lösung. Daher müssen wir versuchen die Gleichung (25) nur durch ein Sinus-Term darzustellen. Dazu betrachten wir folgende Nebenrechnung

$$\begin{aligned} A\sin x - B\cos x &= \frac{A}{2i}(e^{ix} - e^{-ix}) - \frac{B}{2}(e^{ix} + e^{-ix}) \\ &= \frac{A}{2i}e^{ix} - \frac{A}{2i}e^{-ix} - \frac{B}{2}e^{ix} - \frac{B}{2}e^{-ix} \\ &= \left(\frac{A}{2i} - \frac{B}{2}\right)e^{ix} - \left(\frac{A}{2i} + \frac{B}{2}\right)e^{-ix} \\ &= \frac{1}{2i}\left[(A - iB)e^{ix} - (A + iB)e^{-ix}\right] \end{aligned} \tag{26}$$

$A + iB$ und $A - iB$ sind zwei komplexe Zahlen, die man in die eulerische Darstellung bringen kann. Es gilt

$$A + iB = \sqrt{A^2 + B^2}e^{i\phi} \qquad \text{mit } \phi = \arctan\frac{B}{A} \tag{27}$$

$$A - iB = \sqrt{A^2 + B^2}\underbrace{e^{i2\pi}}_{=1}e^{-i\phi} \tag{28}$$

$$\tag{29}$$

Das eingesetzt in die Gleichung (26) ergibt

$$\begin{aligned}
A\sin x - B\cos x &= \frac{1}{2i}\left[\sqrt{A^2+B^2}e^{-i\phi}e^{ix} - \sqrt{A^2+B^2}e^{i\phi}e^{-ix}\right] \\
&= \frac{\sqrt{A^2+B^2}}{2i}\left[e^{-i\phi}e^{ix} - e^{i\phi}e^{-ix}\right] \quad \text{mit } \delta = -\phi \\
&= \underbrace{A^2+B^2}_{C}\frac{1}{2i}\left[e^{ix+i\delta} - e^{-ix-i\delta}\right] \\
&= C\sin(x+\delta)
\end{aligned} \tag{30}$$

Damit können wir die Gleichung (25) als eine Sinus-Funktion ausdrücken

$$R_{kl}(r) = \frac{C_l}{kr}\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) \tag{31}$$

Dabei wird δ_l als die **Streuphase** bezeichnet. Für die gilt

$$\delta_l = -\phi = -\arctan\frac{B_l}{A_l} \tag{32}$$

Die Streuphase δ_l beschreibt einen reellen Winkel der zwischen $-\frac{\pi}{2}$ und $\frac{\pi}{2}$ liegt. Für ein Streupotential $V = 0$ verschwindet auch die Streuphase δ_l, d.h. $\delta_l = 0$.
Andererseits, wenn die Streuphase δ_l vom Streupotential V abhängt, muss die Streuamplitude $f(\theta)$ ebenfalls von der Streuphase abhängen. Dies wollen wir nun herleiten. Dazu setzten wir die Radialfunktion (31) in Gleichung (17)

$$\psi(r) = \sum_l \underbrace{a_l C_l}_{b_l}\frac{1}{kr}\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)\cdot P_l(\cos\theta) \tag{33}$$

In Gleichung (33) handelt es sich um eine 'gestörte' ebene Welle, die sich von der ungestörten ebenen Welle nur durch eine Phase δ_l unterscheidet. Das sieht man daran dass für $\delta_l = 0$ die Gleichung (31) sich auf eine Besselfunktion (23) reduziert. Somit beschreibt die Gleichung (33) nur die einlaufende ebene Welle (vergleiche mit Gleichung (13)).
Die Streuphase δ_l gibt außerdem Auskunft über das Potential. Ist diese positiv so wird der sin in der Gleichung (34) nach links verschoben und damit auch die Zustandsfunktion also quasi in das Potential hineingezogen. D.h es handelt sich um ein anziehendes Potential. Ist sie negativ so wird die Zustandsfunktion nach rechts verschoben, also handelt es ich um ein abstoßendes Potential.
Um die Konstante b_l zu bestimmen, schreiben die Sinus-Funktion als Exponentialfunktionen aus. Dazu nutzen wir die schon bekannte Relation (14) aus

$$\begin{aligned}
\psi(r) &= \sum_l b_l\frac{1}{kr}\frac{1}{2i}[(-i)^l e^{ikr+i\delta_l} - i^l e^{-ikr-i\delta_l}]\cdot P_l(\cos\theta) \\
&= \sum_l b_l\frac{1}{kr}\frac{1}{2i}(-i)^l e^{ikr}e^{i\delta_l}P_l(\cos\theta) - \sum_l b_l\frac{1}{kr}\frac{1}{2i}i^l e^{-ikr}e^{-i\delta_l}P_l(\cos\theta)
\end{aligned} \tag{34}$$

Damit haben wir diese Gleichung in eine vergleichbare Form gebracht wie Gleichung (16)

$$\boxed{\psi(r) = -\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{1}{2ik}\sum_l b_l i^l e^{-i\delta_l}P_l(\cos\theta) + \frac{e^{ikr}}{r}\frac{1}{2ik}\sum_l b_l(-i)^l e^{i\delta_l}P_l(\cos\theta)} \tag{35}$$

Der Koeffizientenvergleich der beiden Gleichungen (16) und (35) zu dem Koeffizienten der einlaufenden Welle $-\frac{e^{-ikr}}{r}$ liefert folgende Bedingung

$$\begin{aligned}
&b_l i^l e^{-i\delta_l} \overset{!}{=} i^{2l}(2l+1) \\
&\quad\Leftrightarrow b_l = i^l(2l+1)e^{i\delta_l}
\end{aligned} \tag{36}$$

Der Koeffizientenvergleich zu dem Koeffizienten der auslaufenden Welle $\frac{e^{ikr}}{r}$ liefert

$$\frac{1}{2ik}\sum_l b_l(-i)^l e^{i\delta_l}P_l(\cos\theta) = \left[f(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_l i^l(-i)^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\right] \tag{37}$$

Setzen wir b_l aus Gleichung (36) in (37) ein und stellen nach der Streuamplitude um

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2ik}\sum_l \cancel{i^l}(2l+1)e^{i\delta_l}\cancel{(-i)^l}e^{i\delta_l}P_l(\cos\theta) &= f(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_l \cancel{i^l(-i)^l}(2l+1)P_l(\cos\theta)\\
\Leftrightarrow f(\theta) &= \frac{1}{2ik}\sum_l(2l+1)e^{2i\delta_l}P_l(\cos\theta) - \frac{1}{2ik}\sum_l(2l+1)P_l(\cos\theta)\\
&= \frac{1}{2ik}\sum_l(2l+1)P_l(\cos\theta)(e^{2i\delta_l}-1)
\end{aligned} \tag{38}$$

Mit der Relation $(e^{2i\delta_l}-1)/2i = (e^{2i\delta_l}-e^{i\delta_l}e^{-i\delta_l})/2i = e^{i\delta_l}(e^{i\delta_l}-e^{-i\delta_l})/2i = e^{i\delta_l}\sin\delta_l$ erhalten wir für die Streuamplitude

$$\boxed{f(\theta) = \sum_l f_l(\theta) = \sum_l \frac{1}{k}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)} \tag{39}$$

Wie wir bereits aus der Streutheorie wissen, enthält die Streuamplitude das gesamte Wissen über den Streuprozess. So ist es möglich daraus den differentiellen Wirkungsquerschnitt zu bestimmen.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2}\sum_{l=0}\sum_{l'=0}(2l+1)(2l'+l)e^{i(\delta_l-\delta_{l'})}\sin\delta_l\sin\delta_{l'}P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \tag{40}$$

Wie man sieht kommt es beim Differentiellen Wirkungsquerschnitt zu Mischtermen mit verschiedenen l's was zu Interferenzmustern zwischen den unterschiedlichen Partial-Wellen führt. Deswegen kann der Ausdruck sehr lang und kompliziert werden. Der totale Wirkungsquerschnitt nimmt dagegen eine einfachere Form an.
Durch das Integrieren nach dem Raumwinkel $d\Omega$ kann man totalen Wirkungsquerschnitt gewinnen

$$\begin{aligned}
\sigma &= \int \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}d\Omega = \underbrace{\int_0^{2\pi}d\phi}_{=2\pi}\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta|f(\theta)|^2\\
&= 2\pi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\frac{1}{k^2}\sum_{l=0}\sum_{l'=0}(2l+1)(2l'+l)e^{i(\delta_l-\delta_{l'})}\sin\delta_l\sin\delta_{l'}P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\\
&= 2\pi\frac{1}{k^2}\sum_{l=0}\sum_{l'=0}(2l+1)(2l'+l)e^{i(\delta_l-\delta_{l'})}\sin\delta_l\sin\delta_{l'}\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)
\end{aligned} \tag{41}$$

Die Legendre-Polynome erfüllen folgende Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) = \delta_{ll'}\frac{2}{2l+1} \tag{42}$$

Diese in die Gleichung (41) eingesetzt ergibt für den totalen Wirkungsquerschnitt weiterhin

$$\sigma = 2\pi\frac{1}{k^2}\sum_{l=0}\sum_{l'=0}(2l+1)(2l'+l)e^{i(\delta_l-\delta_{l'})}\sin\delta_l\sin\delta_{l'}\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \tag{43}$$

Da nur die Lösung $l = l'$ ungleich Null ist (wegen Kroneker-Delta $\delta_{ll'}$) vereinfacht sich die Gleichung (43) auf

$$\boxed{\sigma = \sum_l \sigma_l = \sum_{l=0}\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l} \tag{44}$$

σ_l nennt man auch den partielle Wirkungsquerschnitt, der der Streuung von Teilchen in verschiedenen Drehimpulszuständen entspricht. Somit trägt jede Partialwelle zum totalen Wirkungsquerschnitt bei.

Streuung an einer harten Kugel

Wir betrachten Streuung an einer harten Kugel mit dem Radius r_0. Für das Potential gilt

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < r_0 \\ 0 & r \geq r_0 \end{cases} \tag{45}$$

Laut Gleichung (32) gilt für die Radialfunktion

$$R_{kl}(r) = \frac{C_l}{kr} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) \tag{46}$$

Mit der Beziehung $\sin(x + y) = \sin x \cos y + \cos x \sin y$ lässt sich die Gleichung (46) schreiben

$$R_{kl}(r) = C_l \left[\underbrace{\frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr}}_{j_l(kr) \text{ siehe } (23)} \cos(\delta_l) + \underbrace{\frac{\cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr}}_{-n_l(kr) \text{ siehe } (24)} \sin(\delta_l) \right] = C_l[j_l(kr)\cos(\delta_l) - n_l(kr)\sin(\delta_l)] \tag{47}$$

Desweiteren gilt für eine harte Kugel dass die Radialfunktion an der Stelle r_0 verschwinden muss, weil das Potential an der Stelle unendlich ist. D.h es muss folgende Beziehung gelten

$$\begin{aligned} & R_{kl}(r_0) = C_l[j_l(kr_0)\cos(\delta_l) - n_l(kr_0)\sin(\delta_l)] \stackrel{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow & j_l(kr_0)\cos(\delta_l) = n_l(kr_0)\sin(\delta_l) \\ \Leftrightarrow & \frac{j_l(kr_0)}{n_l(kr_0)} = \frac{\sin(\delta_l)}{\cos(\delta_l)} \end{aligned} \tag{48}$$

Damit erhalten wir folgende Relation für die Streuamplitude

$$\tan\delta_l = \frac{j_l(kr_0)}{n_l(kr_0)} \tag{49}$$

Für ein relativ langsames Teilchen nur die Drehimpulskomponenten für $l = 0$ tragen größtenteils zur Streuung bei. Also für $l = 0$ die Bessel- und Neuman-Funktionen in die Gleichung (49) eingesetzt ergibt

$$\tan\delta_0 = \frac{j_0(kr_0)}{n_0(kr_0)} = \frac{\sin(kr_0)}{-\cos(kr_0)} = -\tan(kr_0) \tag{50}$$

Wegen $-\tan(x) = \frac{-\sin(x)}{\cos(x)} = \frac{\sin(-x)}{\cos(-x)} = \tan(-x)$ kann man die Argumente der Tangenz-Ausdrücke gleichsetzen

$$\boxed{\rightarrow \delta_0 = -kr_0} \tag{51}$$

Wir erhalten also eine negative Streuamplitude. D.h. also dass das Potential abstoßend sein muss. Was zu einer harten Kugel passend ist.