



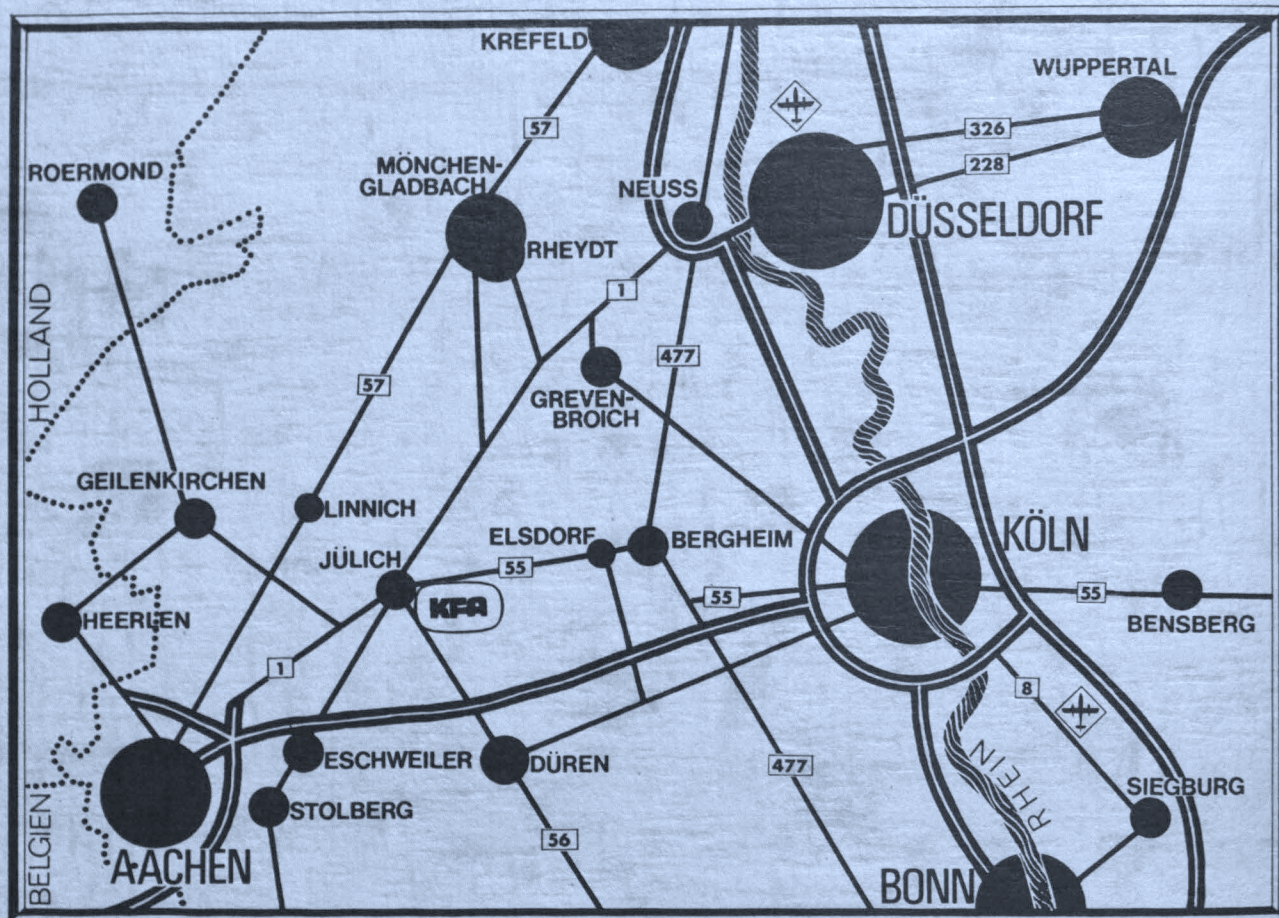
KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG
Institut für Festkörperforschung

**Klassische Potentialstreuung
als Grenzfall einer quantenmechanischen
Wellenpaket-Theorie**

von
F. Drepper

JüI - 1150 - FF
Dezember 1974

Als Manuskript gedruckt



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 1150

Institut für Festkörperforschung Jül - 1150 - FF

Dok.: Scattering Theory - Potential Scattering, Narrow Wave Packets
 Potential Scattering - Semiclassical Cross Section
 Classical Cross Section - Validity Criteria

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
 Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Klassische Potentialstreuung als Grenzfall einer quantenmechanischen Wellenpaket-Theorie

von
F. Drepper

D 82 (Diss. T. H. Aachen)

ABSTRACT

A new method for the transition from quantum to classical mechanics in potential scattering theory is presented. The incoming wave packet is decomposed into many narrow wave packets with different impact parameters, whose width becomes small inside the potential. In the classical limit this decomposition has the following two properties:

- 1) Only certain impact parameters depending on the direction of observation contribute to the transition amplitude.
- 2) In the equation of motion for each narrow wave packet the potential can be expanded about the momentary center of mass. To get the classical cross section in general directions terms of second order have to be included.

KLASSISCHE POTENTIALSTREUUNG ALS GRENZFALL EINER QUANTENMECHANISCHEN
WELLENPAKET-THEORIE

I	Einleitung	1
II	Klassischer Wirkungsquerschnitt für beliebige (auch nicht drehinvariante) Potentiale	4
III	Quantenmechanischer Wirkungsquerschnitt aus einer Zerlegung nach mikroskopischen Wellenpaketen	9
	a) Klassische Näherung für kleine Streuwinkel	21
	b) Klassische Näherung für beliebige Streuwinkel	25
	c) Gültigkeitskriterien für den klassischen Wirkungsquerschnitt	38
IV	Anhang	
	A1) Überlagerung freier Wellenpakete	47
	A2) Gauss'sches Wellenpaket im Feld eines zeitabhängigen harmonischen Oszillators	49
V	Literatur	59

Einleitung

Gegenstand dieser Arbeit ist der Übergang von der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik beim differentiellen Wirkungsquerschnitt für Potentialstreuung. Mit hinreichend kleiner Wellenlänge bzw. hinreichend großem Impuls der einfallenden Teilchen geht der quantenmechanische Wirkungsquerschnitt im allgemeinen in den klassischen Wirkungsquerschnitt über. Bei speziellen Potentialen und Einfallsenergien treten jedoch für spezielle Beobachtungswinkel besondere semiklassische Interferenzeffekte auf. Das ist immer dann der Fall, wenn mehr als ein Stoßparameter zum klassischen Wirkungsquerschnitt beiträgt.

Der Übergang vom quantenmechanischen zum klassischen Wirkungsquerschnitt wurde bisher bereits auf zwei verschiedenen Wegen erreicht. Der erste Weg (siehe /1/) benutzt die Drehimpulszerlegung der Übergangsamplitude und ist daher auf drehinvariante Potentiale beschränkt. Die Beiträge zu den einzelnen Drehimpulsen werden mit Hilfe der WKB Näherung bestimmt. Zur Herleitung des klassischen Wirkungsquerschnitts sind dann noch weitere Näherungen erforderlich, deren Fehler sich quantitativ schwer abschätzen läßt.

Die zweite Methode von P. Pechukas /2/ geht von Feynman's Funktional Integral Formulierung der Quantenmechanik aus. Diese Methode erreicht auf besonders elegante Art und Weise den Übergang zur klassischen Mechanik, bietet aber im Gegensatz zur WKB Methode keinen Zugang zu dem der klassischen Mechanik benachbarten Bereich und damit auch keine Möglichkeit zur Aufstellung von Gültigkeitskriterien.

Die hier gewählte dritte Methode benutzt ebenso wie die WKB Methode als Zwischenschritt eine quantenmechanische Näherung, die noch den klassischen Wirkungsquerschnitt als Grenzfall enthält und läßt daher auch das Aufstellen von Gültigkeitskriterien zu. Ein weiterer Gesichtspunkt für den hier gewählten dritten Weg ist es, eine Herleitung des klassischen Wirkungsquerschnitts aus einer quantenmechanischen Wellenpakettheorie zu geben, ohne Beschränkung auf drehinvariante Potentiale sowie ohne Benutzung von Feynman Integralen. Im Gegensatz zur WKB-Näherung bietet

dieser dritte Weg außerdem die Möglichkeit zu einer direkten Übertragung auf die Streuung zwischen zusammengesetzten Systemen, wie z.B. zwischen Atomen.

Mit dem hier beschriebenen Weg knüpfen wir an zwei Arbeiten von Lebedeff an /3/. Ebenso wie Lebedeff werden wir im Rahmen einer zeitabhängigen Wellenpaketformulierung das einfallende makroskopische Wellenpaket zerlegen in viele kleine Wellenpakete (Narrow Wave Packets) zu unterschiedlichen Stoßparametern, wobei die NWP die Eigenschaft haben, daß sie im Innern des Potentials ihre minimale Breite annehmen. Im Unterschied zu Lebedeff wählen wir jedoch die Zerlegung so, daß wir bereits ohne Näherung eine Darstellung der Übergangsamplitude ($P_f \rightarrow P_i$) als Integral über alle Stoßparameter erreichen. Für hinreichend großen Impuls der NWP läßt sich dann ihre minimale Breite so wählen, daß die Wellenpakete auf dem Weg durch das Potential so eng sind und bleiben, daß für sie das Potential um den jeweiligen Schwerpunkt entwickelt werden kann. Bei einer Berücksichtigung der Entwicklung bis maximal zur quadratischen Ordnung lassen sich die Wellenpakete allein durch Lösungen klassischer Bewegungsgleichungen beschreiben. Während Lebedeff in den beiden Arbeiten /3/ die Wellenpakete im linear entwickelten Potential berechnet, werden wir im Abschnitt IIIa zunächst nur die nullte Ordnung berücksichtigen und anschließend in IIIb die Entwicklung bis zu den quadratischen Termen mitnehmen. Der Einfachheit halber werden wir uns im letzteren Fall auf gaussische Form der Wellenpakete beschränken.

Im klassischen Grenzfall tragen bei allen 3 Entwicklungsstufen nur bestimmte, vom Beobachtungswinkel abhängige Stoßparameter zur Zerlegung der Übergangsamplitude bei. Bei der Entwicklung bis zur nullten Ordnung entspricht die Zuordnung von Streurichtung und Stoßparameter der Impulsnäherung der klassischen Mechanik. Bei einer Entwicklung bis zur ersten oder zweiten Ordnung tragen für alle Streuwinkel die "klassisch" richtigen Stoßparameter bei.

Gibt es zu einer Streurichtung nur einen klassischen Stoßparameter, so liefert die Entwicklung bis zur nullten Ordnung den klassischen Wirkungsquerschnitt in Impulsnäherung. Bei einer

Entwicklung bis zur zweiten Ordnung erhalten wir für alle Streuwinkel den klassischen Wirkungsquerschnitt. Die Entwicklung bis zur ersten Ordnung liefert im allgemeinen nur eine Verbesserung gegenüber der Impulsnäherung zu größeren Winkeln hin.

Im Abschnitt IIIc werden wir schließlich Gültigkeitskriterien für die zur Herleitung des klassischen Wirkungsquerschnitts benutzten Näherungen angeben.

Wir beginnen im Kapitel II mit der Ableitung einer speziellen Darstellung des klassischen Wirkungsquerschnitts, wie wir sie später im Kapitel III aus der Quantenmechanik erhalten werden.

II Klassischer Wirkungsquerschnitt für beliebige (auch nicht drehinvariante) Potentiale

In diesem Kapitel setzen wir uns das Ziel, den klassischen differentiellen Wirkungsquerschnitt für allgemeine insbesondere auch nicht drehinvariante Potentiale zu definieren. Hierzu betrachten wir eine Schar von Bahnen $\underline{S}(t, \underline{b})$ durch das Potential $V(\underline{R})$ mit gemeinsamer Anfangsgeschwindigkeit $\underline{v}_i$. Die Anfangsorte dieser Bahnen sollen das infinitesimale Flächenelement $d^2\underline{b} = d^2\underline{b}$ senkrecht zu $\underline{v}_i$ bilden. In Abb. 1 sind zwei dieser Bahnen herausgegriffen.

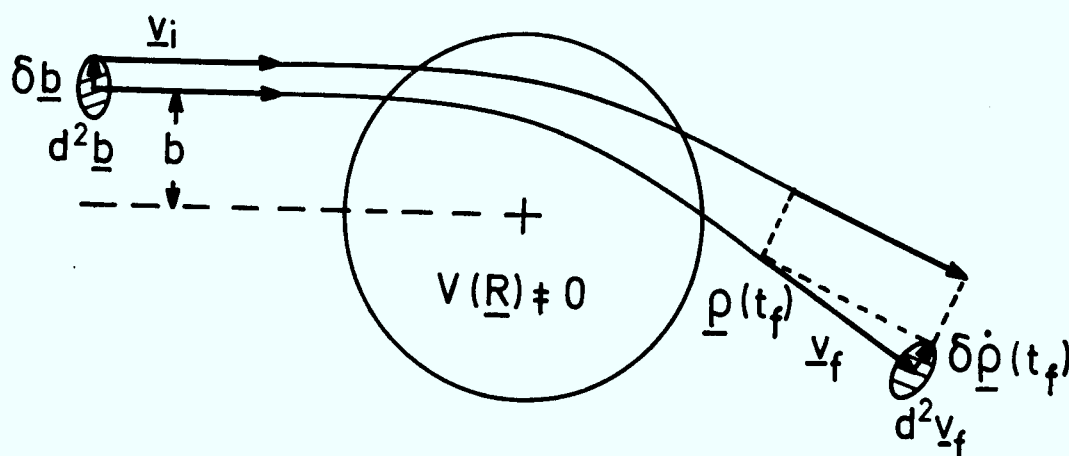


Abb. 1 Erläuterung zum klassischen Wirkungsquerschnitt

Außerdem betrachten wir die infinitesimale Fläche $d^2\underline{v}_f$, die durch die Endpunkte der Geschwindigkeitsvektoren nach Durchlaufen des Potentials aufgespannt wird. Nach dem Energiesatz ist dieses Flächenelement Teil einer Kugelschale mit dem Radius v_f . Mit dem Raumwinkelement $d\Omega$ gilt somit

$$d^2\underline{v}_f = v_f^2 d\Omega$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt in der klassischen Mechanik ist definiert als der Quotient

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = v_f^2 \frac{d^2\sigma}{d^2v_f} \quad (1.1)$$

Für diesen Quotienten wollen wir in diesem Kapitel eine Darstellung herleiten, die wir später auch aus der quantenmechanischen Formulierung erhalten werden. Ausgangspunkt dieser Darstellung ist die Bewegungsgleichung für die Differenz infinitesimal benachbarter Bahnen. Zur Herleitung dieser Gleichung gehen wir aus von der Newtonschen Bewegungsgleichung

$$m \ddot{\underline{\xi}}(t, \underline{b}) = - \partial_{\underline{\xi}} V(\underline{\xi}(t, \underline{b})) \quad (1.2)$$

Da diese auch für die benachbarten Bahnen

$$\underline{\xi}(t, \underline{b} + \delta \underline{b}) = \underline{\xi}(t, \underline{b}) + \delta \underline{\xi}(t)$$

gelten muß, erhalten wir, indem wir uns auf lineare Glieder in $\delta \underline{\xi}(t)$ beschränken

$$m \ddot{\underline{\xi}}(t, \underline{b}) + m \delta \ddot{\underline{\xi}}(t) = - \partial_{\underline{\xi}} V(\underline{\xi}(t, \underline{b})) - \alpha(t) \delta \underline{\xi}(t)$$

oder wegen (1.2)

$$m \delta \ddot{\underline{\xi}}(t) = - \alpha(t, \underline{b}) \delta \underline{\xi}(t) \quad (1.3)$$

mit

$$\alpha_{ik}(t, \underline{\xi}) = \partial_{\xi_i} \partial_{\xi_k} V(\underline{\xi}(t, \underline{\xi}))$$

Die Differenz zweier infinitesimal benachbarter Bahnen genügt also der Bewegungsgleichung eines zeitabhängigen harmonischen Oszillators. Die Federstärken dieses Oszillators sind die quadratischen Entwicklungskoeffizienten des Potentials.

Wie aus Abb. 1 hervorgeht, gelten für $\int \underline{\xi}(t)$ die Anfangsbedingungen

$$\int \underline{\xi}(t_i) = \int \underline{\xi} \quad \int \dot{\underline{\xi}}(t_i) = 0 \quad (1.4)$$

Die Lösungen der linearen Differentialgleichung (1.3) müssen linear in den Anfangswerten (1.4) sein und lassen sich daher in der Form schreiben

$$\int \underline{\xi}(t) = \chi(t) \int \underline{\xi} \quad (1.5)$$

mit der rein zeitabhängigen Matrix $\chi(t)$, die definiert ist durch die Gleichungen

$$m \ddot{\chi}(t) = -\alpha(t) \chi(t) \quad (1.6)$$

$$\chi(t_i) = 1 \quad \dot{\chi}(t_i) = 0$$

Mit den 3 Spaltenvektoren $\underline{\chi}_i(t)$ ($i = 1, 2, 3$) können wir diese Gleichungen auch in der Form schreiben

$$m \ddot{\underline{X}}_i(t) = -\alpha(t) \underline{X}_i(t)$$

$$\underline{X}_i(t_i) = \underline{e}_i \quad \dot{\underline{X}}_i(t_i) = 0$$

Die Matrix χ setzt sich also zusammen aus 3 Grundlösungen eines zeitabhängigen harmonischen Oszillators.

Wir differenzieren Gleichung (1.5) und erhalten

$$\dot{S} \dot{\underline{S}}(t) = \dot{\chi}(t) S \underline{e} \quad (1.7)$$

Die Vektoren $S \underline{e}$ haben wir so gewählt, daß sie alle in einer Fläche senkrecht zur Anfangsgeschwindigkeit $\underline{v}_i$ liegen. Aufgrund des Energiesatzes liegen die Vektoren $S \dot{\underline{S}}(t_+)$ zur Zeit t_+ nach Verlassen des Potentials alle auf einer Fläche senkrecht zu $\dot{\underline{S}}(t_+, \underline{e})$. Es ist daher zweckmäßig, für die Vektoren $S \underline{e}$ und $S \dot{\underline{S}}(t_+)$ zwei unterschiedliche Darstellungen zu wählen. Die Vektoren $S \underline{e}$ wollen wir darstellen in einem Koordinatensystem (x, y, z) , dessen z -Achse mit $\underline{v}_i$ zusammenfällt, die Vektoren $S \dot{\underline{S}}(t_+)$ in einem anderen Koordinatensystem (x', y', z') , dessen z' -Achse mit $\dot{\underline{S}}(t_+, \underline{e})$ zusammenfällt.

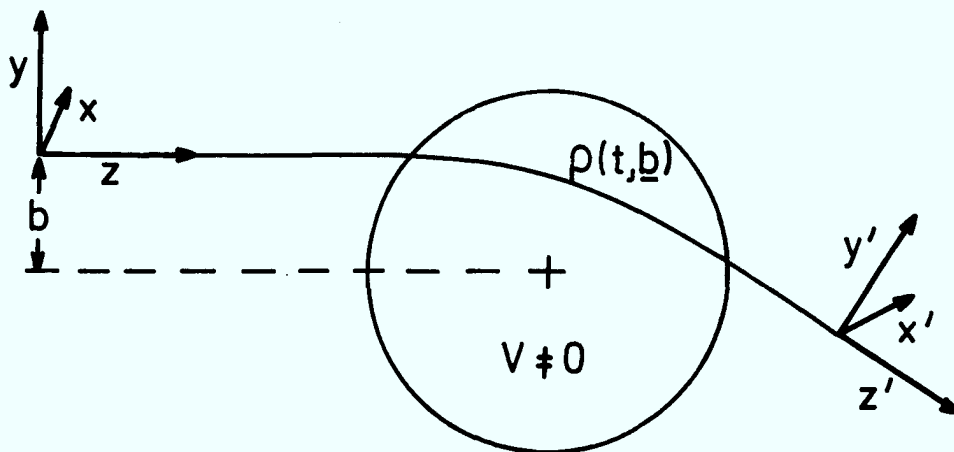


Abb. 2: Erläuterung der beiden Koordinatensysteme (x, y, z) und (x', y', z')

Für diese gemischte Darstellung können wir Gleichung (1.7) mit der 2-dimensionalen Matrix ${}_2\dot{\chi}(t_+)$ schreiben.

$$\int \dot{\underline{\xi}}(t_+) = {}_2\dot{\chi}(t_+) \int \underline{\xi}$$

Hieraus erhalten wir die gesuchte Beziehung zwischen den differentiellen Flächenelementen $d^2\underline{v}_t$ und $d^2\underline{\xi}$

$$d^2\underline{v}_t = d^2\dot{\underline{\xi}}(t_+) = \|{}_2\dot{\chi}(t_+)\| d^2\underline{\xi}$$

Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt erhalten wir somit nach Gleichung (1.1)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = v^2 \|{}_2\dot{\chi}(t_+)\|^{-1} \quad (1.8)$$

III Quantenmechanischer Wirkungsquerschnitt aus einer Zerlegung nach mikroskopischen Wellenpaketen

Die im Folgenden beschriebene Narrow Wave Packet Approximation ist eine zeitabhängige Theorie. Wir werden daher zur Berechnung des quantenmechanischen Wirkungsquerschnitts nicht von der stationären Streutheorie ausgehen, sondern direkt auf eine zeitabhängige Wellenpakettheorie zurückgreifen, und zwar auf eine Formulierung mit normierten Wellenpaketen, wie sie von Goldberger und Watson /4/ bzw. von K. Dettmann /5/ angegeben wurde.

Wir beschreiben den Streuvorgang eines Teilchens am Potential $V(R)$ durch ein normiertes makroskopisches Wellenpaket, das auf das Potential bei $R=0$ gezielt ist. Als Anfangszustand dieses Wellenpakets wählen wir ein freies Wellenpaket mit mittlerem Impuls $\underline{p}_i$, das bei freier Bewegung zur Zeit $t=0$ bei $R=0$ seine minimale Breite T annimmt. Die Form des Wellenpakets zu diesem Zeitpunkt ist definiert durch die reelle Funktion $g(R)$

$$\int dR \, g^2(R) = 1$$

unter der wir uns etwa eine Gaußfunktion vorstellen können. Unter makroskopisch verstehen wir, daß die Breite T dieser Funktion groß sein soll gegen die Ausdehnung des Potentials. Zur Zeit t_i , so lange vor dem Stoß, daß noch kein Überlapp mit dem Potential erfolgt, geben wir also das Wellenpaket vor in der Form

$$\phi_i(\underline{p}_i, t_i) = e^{-i\mathcal{H}_0 t_i} \frac{e^{i\underline{p}_i R}}{(2\pi)^{3/2}} g(R)$$

Wir wählen die Einheiten so, daß $\hbar = 1$ gilt. Den Streuvorgang am Potential beschreiben wir durch den Zeitentwicklungsoperator

$$U(t - t_i) = e^{-i(\mathcal{H}_0 + V(R))(t - t_i)}$$

Nach Verlassen des Potentials analysieren wir das gestreute Wellenpaket nach einem bestimmten Endimpuls $\underline{P}_f$. Die entsprechende Wahrscheinlichkeitsamplitude lautet dann

$$F(\underline{P}_f, \underline{P}_i)$$

(2.1)

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{t_f, t_i \rightarrow \pm\infty} \left(e^{-i\mathcal{H}_0 t_f} e^{i\underline{P}_f \underline{R}}, U(t_f - t_i) e^{-i\mathcal{H}_0 t_i} e^{i\underline{P}_i \underline{R}} \right) g(\underline{R})$$

Der Faktor $e^{-i\mathcal{H}_0 t_f}$ wurde eingeführt, damit dieser Ausdruck asymptotisch weder von t_i noch von t_f abhängt und wir den Grenzübergang $t_f \rightarrow +\infty$, $t_i \rightarrow -\infty$ schon in der Amplitude F durchführen können. Wir wollen im folgenden davon ausgehen, daß t_i und t_f weit vor bzw. nach dem Stoß liegen, so daß wir das limes Zeichen sparen können. Die Wahrscheinlichkeit in der gestreuten Wellenfunktion Impulse im Bereich $\underline{P}_f + d^3\underline{P}_f$ vorzufinden, ist dann

$$W(\underline{P}_f, \underline{P}_i) d^3\underline{P}_f = |F(\underline{P}_f, \underline{P}_i)|^2 d^3\underline{P}_f$$

Um den differentiellen Wirkungsquerschnitt zu erhalten, dividieren wir noch durch den gesamten eingefallenen Wahrscheinlichkeitsstrom pro Flächeneinheit, gebildet an der Stelle $\underline{R} = 0$

$$d\sigma(\underline{P}_f, \underline{P}_i) d^3\underline{P}_f = |F(\underline{P}_f, \underline{P}_i)|^2 \frac{d^3\underline{P}_f}{J} \quad (2.2)$$

$$J = \frac{1}{2m_i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\phi_i(\underline{P}_i, t) \nabla_{\underline{R}} \phi_i(\underline{P}_i, t) - \text{c.c.} \right) \Big|_{\underline{R}=0}$$

Wir werden im folgenden die Übergangsamplitude $F(\underline{P}_f, \underline{P}_i)$ dadurch berechnen, daß wir das makroskopische Wellenpaket zerlegen in

viele kleine Wellenpakete, deren Breiten klein sind gegen die typische Länge des Potentials. Ist der Impuls des einfallenden Teilchens genügend groß, so wird es möglich sein, die mikroskopischen Wellenpakete so zu wählen, daß sie während der gesamten Zeit innerhalb des Potentials klein bleiben. In diesem Fall haben wir dann den Näherungsgesichtspunkt, das Potential um den jeweiligen Schwerpunkt eines mikroskopischen Wellenpakets entwickeln zu können.

Wir beginnen mit einer Zerlegung des makroskopischen Wellenpakets nach ebenen Wellen.

$$e^{i \underline{P}_i \underline{R}} g(\underline{R}) = \int d\underline{P} \tilde{g}(\underline{P} - \underline{P}_i) e^{i \underline{P} \underline{R}} \quad (2.3)$$

$$\int d\underline{P} |\tilde{g}(\underline{P})|^2 = (2\pi)^{-3}$$

Die ebenen Wellen $e^{i \underline{P} \underline{R}}$ zerlegen wir ihrerseits dann nach Narrow Wave Packets (NWP) $g(\underline{R}, \underline{R}_1, \underline{P})$ mit unterschiedlichen Schwerpunkten

$$\underline{R}_1 = \underline{b} + \underline{v} t_1 \quad \underline{v} = \frac{1}{m} \underline{P}$$

und gemeinsamem mittleren Impuls $\underline{P}$. Wir wählen die NWP so, daß sie bei freier Bewegung nach Verlauf der Zeit $t_1 = \frac{m}{\hbar} \underline{P} \underline{R}_1$ auf der Ebene $z = 0$ ihre minimale Breite γ annehmen. Die Form der Wellenpakete auf dieser Ebene beschreiben wir durch die Funktion $g(\underline{R} - \underline{b})$, die reell, inversionssymmetrisch sowie um $\underline{R} = \underline{b}$ konzentriert sein soll. Man denke z.B. an eine Gaußfunktion.

$$\begin{aligned}
 g(\underline{R}, \underline{R}_0, \underline{P}) &= e^{i(E_P - \mathcal{H}_0)t} e^{i\underline{P}\underline{R}} g(\underline{R} - \underline{R}_0) \\
 &= e^{i\underline{P}\underline{R}} e^{-i\mathcal{H}_0 t} g(\underline{R} - \underline{R}_0)
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

(Zur zweiten Hälfte der Gleichung siehe Anhang a)

Die zeitliche Veränderung eines freien Wellenpakets setzt sich zusammen aus einer Verschiebung $\underline{v}t$, und aus einer Verbreiterung $e^{i\mathcal{H}_0 t} g(\underline{R})$. Abb. 2 ist eine schematische Darstellung dieses Sachverhalts. Wir können diese Abbildung einmal auffassen als zeitlichen Verlauf von 3 NWP aber auch als Momentaufnahme von vielen NWP mit unterschiedlichen Schwerpunkten.

Wie im Anhang gezeigt wird, ergibt eine Überlagerung solcher Wellenpakete entsprechend Gleichung (2.5) nicht nur die ebene Welle $e^{i\underline{P}\underline{R}}$ sondern auch noch eine ebene Welle in entgegengesetzter Richtung mit dem impulsabhängigen Gewichtungsfaktor $\tilde{g}(2\underline{P})$ ⁺

$$\int d\underline{R} g(\underline{R}, \underline{R}_0, \underline{P}) = (2\pi)^3 \left(e^{i\underline{P}\underline{R}} + \tilde{g}(2\underline{P}) e^{-i\underline{P}\underline{R}} \right) \tag{2.5}$$

Die Funktion $g(\underline{R})$ ist hierbei aus Gründen der Bequemlichkeit folgendermaßen normiert

$$\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\underline{R} g(\underline{R}) = \tilde{g}(0) = 1 \tag{2.6}$$

⁺) Wie in Abschnitt IIIc gezeigt wird, können wir im Grenzfall der klassischen Mechanik annehmen, daß $\tilde{g}(2\underline{P}) \ll 1$ gilt, und den zweiten Term vernachlässigen.

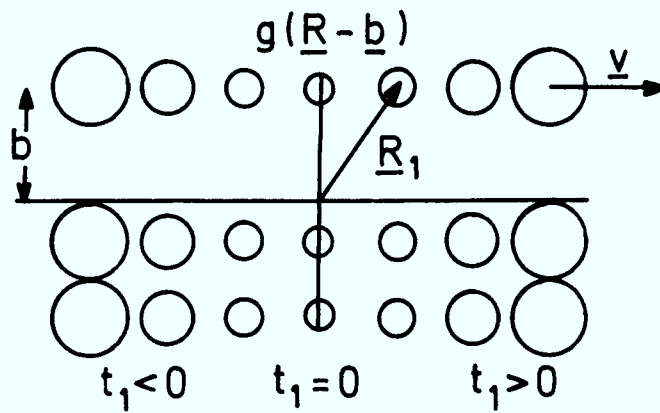


Abb. 3: Wellenpakete $e^{i\kappa_0 t_1} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}} g(\mathbf{R}-\underline{b})$ für verschiedene $\underline{R}_1 = \underline{b} + \underline{v} t_1$

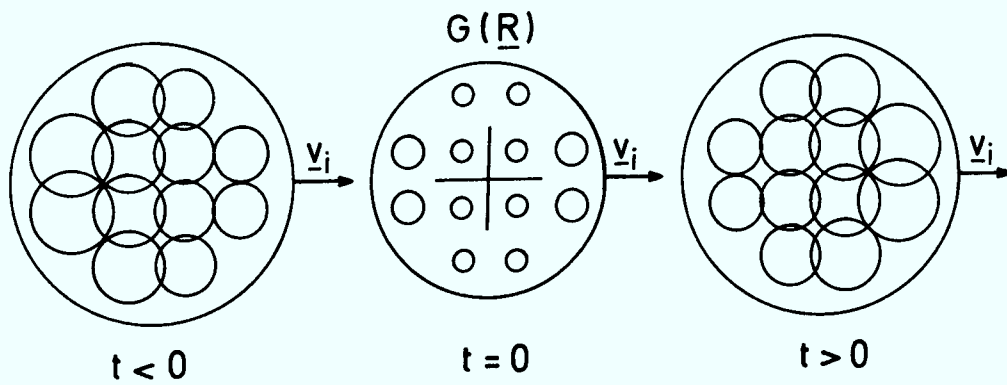


Abb. 4: Wellenpaket $e^{i\kappa_0 t} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}} g(\mathbf{R})$ mit einigen Narrow Wave Packets zu 3 verschiedenen Zeiten t

Um eine reine ebene Welle zu erhalten, müssen wir noch Wellenpakete mit umgekehrtem Impuls mit überlagern.

$$e^{i \underline{P} \underline{R}} = \frac{(2\pi)^{-3}}{1 - \tilde{g}^2(2\underline{P})} \cdot$$

$$\int d\underline{R}_1 \left\{ g(\underline{R}, \underline{R}_1, \underline{P}) - \tilde{g}(2\underline{P}) g(\underline{R}, \underline{R}_1, -\underline{P}) \right\}$$

Wir fassen nun diese Gleichung mit (2.3) zusammen und erhalten

$$e^{i \underline{P} \underline{R}} \underline{g}(\underline{R}) = \int d\underline{P} \tilde{\underline{g}}(\underline{P} - \underline{P}_i) \frac{(2\pi)^{-3}}{1 - \tilde{g}^2(2\underline{P})} \cdot$$

(2.7)

$$\int d\underline{R}_1 \left\{ g(\underline{R}, \underline{R}_1, \underline{P}) - \tilde{g}(2\underline{P}) g(\underline{R}, \underline{R}_1, -\underline{P}) \right\}$$

Abb. 3 zeigt schematisch die oben beschriebene Zerlegung des einfallenden Wellenpakets. Diese Zerlegung setzen wir in die Wahrscheinlichkeitsamplitude nach Gleichung (2.1) ein.

$$\underline{F}(\underline{P}_f, \underline{P}_i) = \int d\underline{P} \tilde{\underline{g}}(\underline{P} - \underline{P}_i) \frac{1}{1 - \tilde{g}^2(2\underline{P})} \cdot$$

$$\int d\underline{R}_1 \left\{ f(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{R}_1) - \tilde{g}(2\underline{P}) f(\underline{P}_f, -\underline{P}_i, \underline{R}_1) \right\}$$

Hier bedeutet

$$f(\underline{P}_f, \underline{P}, \underline{R}_1) = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{-i\mathcal{H}_0 t_f} e^{i\underline{P}_f \underline{R}} \right), \quad (2.8)$$

$$U(t_f - t_i) e^{-i\mathcal{H}_0 t_i} e^{-i(\mathcal{H}_0 - E_P) t_1} e^{i\underline{P} \underline{R}} g(\underline{R} - \underline{b})$$

Die t_1 Abhängigkeit von f läßt sich explizit angeben.

$$f = \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(E_P - E_{P_f}) t_1} \left(e^{-i\mathcal{H}_0 (t_f + t_1)} e^{i\underline{P}_f \underline{R}} \right),$$

$$U(t_f + t_1 - t_i - t_1) e^{-i\mathcal{H}_0 (t_i + t_1)} e^{i\underline{P} \underline{R}} g(\underline{R} - \underline{b})$$

Wegen der Integration über $\underline{P}$ bleibt $\underline{R}$ und damit auch t_1 beschränkt, so daß unter dem Integral über $\underline{P}$

$$f(\underline{P}_f, \pm \underline{P}, \underline{R}_1) = e^{\pm i(E_P - E_{P_f}) t_1} f(\underline{P}_f, \pm \underline{P}, \underline{b})$$

ersetzt werden kann.

Hiermit können wir die Integration über t_1 ausführen und erhalten

$$F(\underline{P}_f, \underline{P}_i) = \int d\underline{P} \tilde{g}(\underline{P} - \underline{P}_i) \delta(E_{P_f} - E_P) \tilde{S}(\underline{P}_f, \underline{P})$$

mit

$$\tilde{S}(\underline{P}_f, \underline{P}) = \frac{2\pi v}{1 - \tilde{g}^2(2P)} \quad (2.9)$$

$$\left\{ d' \underline{b} \right\} f(\underline{P}_f, \underline{P}, \underline{b}) = \tilde{g}(2P) f(\underline{P}_f, -\underline{P}, \underline{b})$$

Der Ausdruck $\delta(E_{P_f} - E_P) \tilde{S}(\underline{P}_f, \underline{P})$ wird gewöhnlich als S -Matrix bezeichnet (vergleiche z.B. Goldberger und Watson /4/). Mit Gleichung (2.9) haben wir also eine Stoßparameterzerlegung der S -Matrix erreicht. Als Integrand tritt hierbei die Übergangsamplitude $f(\underline{P}_f, \underline{P}, \underline{b})$ auf (2.8)

$$f(\underline{P}_f, \underline{P}, \underline{b}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{-i\mathcal{K} \cdot t_f} e^{i\underline{P}_f \underline{R}}, \psi(t_f, \underline{P}, \underline{b}) \right) \quad (2.10)$$

mit dem mikroskopischen Wellenpaket

$$\psi(t, \underline{P}, \underline{b}) = u(t - t_i) e^{-i\mathcal{K} \cdot t_i} e^{i\underline{P} \underline{R}} g(\underline{R} - \underline{b}) \quad (2.11)$$

Zur Berechnung des Wirkungsquerschnittes bilden wir

$$|F(\underline{P}_f, \underline{P}_i)|^2 = \int d\underline{P}_1 d\underline{P}_2 \tilde{g}(\underline{P}_f - \underline{P}_1) \tilde{g}^*(\underline{P}_2 - \underline{P}_i)$$

$$\tilde{S}(\underline{P}_f, \underline{P}_1) \tilde{S}^*(\underline{P}_2, \underline{P}_i) \delta(E_{P_f} - E_{P_1}) \delta(E_{P_2} - E_{P_i})$$

und benutzen

$$\delta(E_{p_f} - E_{p_1}) \delta(E_{p_f} - E_{p_2}) = \delta(E_{p_f} - E_{p_1}) \delta(E_{p_1} - E_{p_2})$$

Außerdem bilden wir den Grenzübergang $T \rightarrow \infty$.

$\tilde{g}(\underline{p}_{1,2} - \underline{p}_i)$ verhält sich dann wie die Wurzel aus einer δ -Funktion.
Entsprechend Gleichung (2.3) können wir schreiben

$$\tilde{g}(\underline{p}_{1,2} - \underline{p}_i) \cong \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \delta(\underline{p}_{1,2} - \underline{p}_i) \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Durch Zerlegung nach Betrag und Richtung kann man sich von der Richtigkeit der folgenden Beziehung überzeugen

$$\begin{aligned} & \left\{ \delta(\underline{p}_1 - \underline{p}_i) \delta(\underline{p}_2 - \underline{p}_i) \right\}^{\frac{1}{2}} \delta(E_{p_1} - E_{p_2}) \\ &= \left\{ \delta(\underline{p}_1 - \underline{p}_i) \delta(\underline{p}_2 - \underline{p}_i) \right\}^{\frac{1}{2}} \delta(E_{p_1} - E_{p_i}) \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich dann für $T \rightarrow \infty$

$$|F(\underline{p}_f, \underline{p}_i)|^2 \cong |S(\underline{p}_f, \underline{p}_i)|^2 \delta(E_{p_f} - E_{p_i}) G \quad (2.12)$$

mit

$$G = \int d\underline{p}_1 d\underline{p}_2 \hat{g}(\underline{p}_1 - \underline{p}_i) \tilde{g}^*(\underline{p}_2 - \underline{p}_i) \delta(E_{p_1} - E_{p_2})$$

Der eingefallene Wahrscheinlichkeitsstrom pro Flächeneinheit ist ebenfalls proportional zu $C/5/$.

$$\underline{J} \approx \frac{(2\pi)^4}{m} \underline{P}_i C \quad (2.13)$$

Die Gleichungen (2.12) und (2.13) in (2.2) eingesetzt liefern dann

$$d\sigma(\underline{P}_f, \underline{P}_i) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{m}{P_i} |\tilde{S}(\underline{P}_f, \underline{P}_i)|^2 \delta(E_{P_f} - E_{P_i}) d^3\underline{P}_f$$

Hieraus erhalten wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt bezüglich des Raumwinkels indem wir über $|\underline{P}_f|$ integrieren

$$d\sigma(\Omega_f, \underline{P}_i) = \frac{m^2}{(2\pi)^4} |\tilde{S}(\underline{P}_f, \underline{P}_i)|^2 d\Omega_f \quad (2.14)$$

$\tilde{S}(\underline{P}_f, \underline{P}_i)$ ist hierbei auf der Energieschale zu nehmen. ($P_f = P_i$)

Mit den Gleichungen (2.9), (2.10) und (2.14) haben wir die Berechnung des quantenmechanischen Wirkungsquerschnitts zurückgeführt auf die Berechnung der Narrow Wave Packets $\psi(t, \underline{P}_i, \underline{\ell})$ nach Gleichung (2.11). Die Anfangsbedingungen für die Wellenpakete sind so gewählt, daß sie ihre minimale Breite innerhalb des Potentials annehmen (Abb. 4).

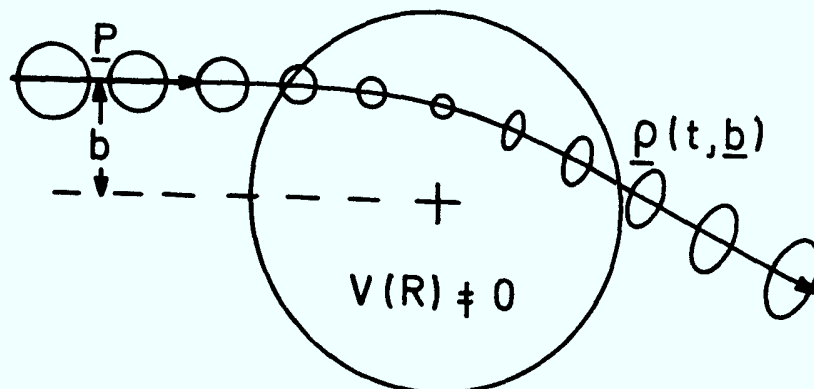


Abb. 5: Narrow Wave Packet $\psi(t, \underline{P}_i, \underline{\ell})$ zu verschiedenen Zeiten t

Für hinreichend große Impulse (siehe Abschnitt C) ist es möglich, die minimale Breite so zu wählen, daß die Wellenpakete bei Durchlaufen des Potentials klein bleiben gegen die typische Länge des Potentials bzw. gegen den kürzesten Abstand vom Ursprung.

Unter diesen Voraussetzungen können wir zur Berechnung der Narrow Wave Packets das Potential um den jeweiligen Schwerpunkt $\underline{Q}$ entwickeln.

$$\underline{Q}(t, \underline{b}) \equiv (\psi(t, \underline{b}), \underline{R} \psi(t, \underline{b}))$$

$$\begin{aligned} V(\underline{R}) &= V(\underline{Q}(t)) + (\underline{R} - \underline{Q}(t)) \partial_{\underline{Q}} V(\underline{Q}(t)) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\underline{R} - \underline{Q}(t)) \alpha(t, \underline{b}) (\underline{R} - \underline{Q}(t)) + \dots \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\alpha_{ik}(t, \underline{b}) = \partial_{Q_i} \partial_{Q_k} V(\underline{Q}(t, \underline{b}))$$

Die Anfangsbedingungen für die Schwerpunktbewegung erhalten wir aus $\psi(t_i, \underline{P}_i, \underline{b})$ (siehe Gleichung (2.11) und (2.4))

$$\begin{aligned} \psi(t_i, \underline{P}_i, \underline{b}) &= e^{i \kappa_0 t_i} e^{i \underline{P}_i \underline{R}} g(\underline{R} - \underline{b}) \\ &= e^{i (\underline{P}_i \underline{R} - E_{P_i} t_i)} e^{i \kappa_0 t_i} g(\underline{R} - \underline{b} - \underline{v}_i t_i) \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\underline{S}(t, \underline{b}) = (\psi(t, \underline{b}), \underline{R} \psi(t, \underline{b})) = \underline{b} + \underline{v} \cdot t \quad (2.17)$$

$$\dot{\underline{S}}(t, \underline{b}) = \frac{1}{m} (\psi(t, \underline{b}), -i \partial_{\underline{R}} \psi(t, \underline{b})) = \underline{v}$$

Die Bewegungsgleichung des Schwerpunkts wird je nach Anzahl der Entwicklungskoeffizienten selbstkonsistent nach dem Ehrenfest-schen Theorem bestimmt. Zunächst mit nur einem Entwicklungsterm gilt

$$m \ddot{\underline{S}}(t, \underline{b}) = - (\psi(t, \underline{b}), \partial_{\underline{R}} V(\underline{S}(t)) \psi(t, \underline{b})) = 0 \quad (2.18)$$

Wenn wir uns also auf den $\underline{R}$ -unabhängigen Term beschränken, bewegen sich die Narrow Wave Packets entlang unbeschleunigter Bahnen. Nehmen wir die beiden nächsten Entwicklungsterme (oder auch nur einen weiteren) mit hinzu, so erhalten wir die klassische Bewegungsgleichung für die Schwerpunktskoordinaten

$$\begin{aligned} m \ddot{\underline{S}}(t, \underline{b}) &= - (\psi(t, \underline{b}), \{ \partial_{\underline{S}} V(\underline{S}) + \alpha (\underline{R} - \underline{S}) \} \psi(t, \underline{b})) \\ &= - \partial_{\underline{S}} V(\underline{S}(t, \underline{b})) \end{aligned}$$

Bei weiteren Entwicklungstermen kommen schließlich Korrekturen zur klassischen Mechanik ins Spiel.

Im folgenden Abschnitt werden wir die Narrow Wave Packets zunächst nur mit dem rein zeitabhängigen Anteil des Potentials berechnen. Im übernächsten Abschnitt werden wir schließlich die Entwicklung des Potentials bis zu den quadratischen Gliedern berücksichtigen.

a) Klassische Näherung für kleine Streuwinkel

Im vorigen Abschnitt haben wir den quantenmechanischen Wirkungsquerschnitt auf die Berechnung von Narrow Wave Packets zurückgeführt, die im Innern des Potentials ihre minimale Breite annehmen. Ist der Impuls des einfallenden Teilchens hinreichend groß, so können wir die Narrow Wave Packets so eng wählen, daß ihr zeitlicher Verlauf allein durch den ersten Entwicklungsterm des Potentials um den jeweiligen Schwerpunkt bestimmt wird. Entsprechend den Gleichungen (2.10) und (2.11) können wir dann für die Übergangsamplitude der Narrow Wave Packets schreiben

$$f_0(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{-i\mathcal{H}_0 t_f} e^{i\underline{P}_f \underline{R}}, U_0(t_f, t_i) e^{-i\mathcal{H}_0 t_i} e^{i\underline{P}_i \underline{R}} g(\underline{R}-\underline{b}) \right) \quad (3.1)$$

wobei U_0 der Zeitentwicklungsoperator in dem rein zeitabhängigen Potential $V(\underline{S}(t, \underline{b}))$ ist.

$$i \partial_t U_0(t, t_i) = (\mathcal{H}_0 + V(\underline{S}(t, \underline{b}))) U_0(t, t_i)$$

$$U_0(t_f, t_i) = e^{-i \int_{t_i}^{t_f} dt V(\underline{S}(t, \underline{b}))} e^{-i\mathcal{H}_0(t_f - t_i)}$$

Nach den Gleichungen (2.17) und (2.18) gilt

$$\underline{S}(t, \underline{b}) = \underline{b} + \underline{v} t$$

Für die Übergangsamplitude erhalten wir dann nach Gleichung (3.1)

$$\begin{aligned}
 f_0(\underline{p}_f, \underline{p}_i, \underline{b}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{i \underline{p}_f \underline{R}}, e^{-i \int_{-\infty}^{\infty} dt V(\underline{b} + \underline{v}; t)} e^{i \underline{p}_i \underline{R}} g(\underline{R} - \underline{b}) \right) \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^3} e^{-i \int_{-\infty}^{\infty} dt V(\underline{b} + \underline{v}; t)} \left(e^{i (\underline{p}_f - \underline{p}_i) \underline{R}}, g(\underline{R} - \underline{b}) \right) \\
 &= \tilde{g}(\underline{p}_f - \underline{p}_i) e^{i \phi_0(\underline{p}_f, \underline{p}_i, \underline{b})}
 \end{aligned}$$

mit

$$\phi_0(\underline{p}_f, \underline{p}_i, \underline{b}) = - \underline{p}_f \underline{b} - \int_{-\infty}^{\infty} dt V(\underline{b} + \underline{v}; t) \quad (3.2)$$

In die S-Matrix geht nach Formel (2.9) das Integral von f_0 über alle Stoßparameter $\underline{b}$ ein.

$$\tilde{S}(\underline{p}_f, \underline{p}_i) = 2\pi v_i \tilde{g}(\underline{p}_f - \underline{p}_i) \int d^3 \underline{b} e^{i \phi_0(\underline{p}_f, \underline{p}_i, \underline{b})} \quad (3.3)$$

Außer in Vorwärtsrichtung ($\underline{p}_f \underline{b} = 0$)^{+) wird $e^{i \underline{p}_f \underline{b}}$ und damit auch die Phase ϕ_0 für große Impulse stark oszillierend als Funktion von $\underline{b}$. Das obige Integral liefert dann nur Beiträge für bestimmte Stoßparameter, für die $\phi_0(\underline{p}_f, \underline{p}_i, \underline{b})$ stationär wird. Die Bedingung für diese klassischen Stoßparameter $\underline{b}_c$ lautet}

+) In Abschnitt IIIc werden wir die Gültigkeitsbedingung in Abhängigkeit von Impuls und Streuwinkel angeben.

$$\underline{P}_f^\perp = - \partial_{\underline{b}} \int_{-\infty}^{\infty} dt V(\underline{b}_c + \underline{v}_i t) \quad (3.4)$$

Mit $\perp$ bezeichnen wir jeweils die Komponente senkrecht zu $\underline{v}_i$. Der mit Gleichung (3.4) gegebene Zusammenhang zwischen klassischem Stoßparameter und Endimpuls wird gewöhnlich als Impulsnäherung der klassischen Mechanik bezeichnet.

Wir wollen hier der Einfachheit halber annehmen, daß es zu einem Endimpuls $\underline{P}_f$ jeweils nur einen klassischen Stoßparameter $\underline{b}_c$ gibt. Wir entwickeln nun die Phase ϕ_0 um diesen Stoßparameter, für den ϕ_0 stationär wird.

$$\begin{aligned} \phi_0(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}) &= \phi_0(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}_c) \\ &+ \frac{1}{2} \partial_{b_i} \partial_{b_j} \phi_0(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}_c) \int b_i \int b_j \end{aligned}$$

Nach den Gleichungen (3.2) und (3.4) gilt für die Entwicklungskoeffizienten

$$\begin{aligned} \partial_{b_i} \partial_{b_j} \phi_0(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}_c) &= - \partial_{b_i} \partial_{b_j} \int_{-\infty}^{\infty} dt V(\underline{b}_c + \underline{v}_i t) \\ &= - \partial_{b_i} P_{fj} \end{aligned}$$

Wir ersetzen nun in Gleichung (3.3) die Phase ϕ_0 durch ihre quadratische Entwicklung.

$$S(\underline{P}_f, \underline{P}_i) = 2\pi v_i \hat{g}(\underline{P}_f - \underline{P}_i) e^{i\phi_0(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}_c)}.$$

$$\int d^2 \underline{b} e^{-\frac{i}{2} \frac{\partial P_{fy}}{\partial b_i} \int b_i \int b_r}$$

$$= (2\pi)^2 v_i \hat{g}(\underline{P}_f - \underline{P}_i) \left\| \frac{\partial P_{fy}}{\partial b_i} \right\|^{-\frac{1}{2}} e^{i\phi_0(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}_c)}$$

Für den Wirkungsquerschnitt gilt damit nach Gleichung (2.14)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = m^2 v_i^2 \hat{g}(\underline{P}_f - \underline{P}_i) \left\| \frac{\partial P_{fy}}{\partial b_i} \right\|^{-1}$$

In der Nähe der Vorwärtsrichtung gilt $\hat{g}(\underline{P}_f - \underline{P}_i) \approx \hat{g}(0) = 1$, so daß wir den klassischen Wirkungsquerschnitt in Impulsnäherung erhalten.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = P_f^2 \frac{d^2 \underline{b}}{d^2 \underline{P}_f^\perp}$$

In unmittelbarer Nähe der Vorwärtsrichtung bricht die soeben beschriebene Sattelpunktmethode jedoch zusammen, da in der Vorwärtsrichtung der quadratische Entwicklungsterm der Phase ϕ_0 verschwindet ($\frac{d\sigma}{d\Omega} \rightarrow \infty$). In diesem Fall muß man direkt auf Formel (3.3) zurückgreifen, welche mit $\hat{g}(\underline{P}_f - \underline{P}_i) = 1$ der Glaubernäherung entspricht.

III b) Klassische Näherung für beliebige Streuwinkel

Zu Beginn des Kapitels III wurde der quantenmechanische Wirkungsquerschnitt auf die Berechnung der Übergangsamplitude $f(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{E})$ zurückgeführt. Dieses ist eine Übergangsamplitude für enge Wellenpakete, die eine Entwicklung des Potentials um den jeweiligen Schwerpunkt ermöglichen. In diesem Abschnitt wollen wir diese Entwicklung bis zu den quadratischen Gliedern berücksichtigen. Entsprechend Gleichung (2.10) schreiben wir

$$f_2(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{-i\mathcal{H}_0 t_f} e^{i\underline{P}_i \underline{R}}, \psi_2(t_f, \underline{P}_i, \underline{E}) \right) \quad (4.1)$$

wobei ψ_2 das Wellenpaket im quadratisch entwickelten Potential V_2 (vgl. 2.15) bedeutet.

$$(\mathcal{H}_0 + V_2(t, \underline{E}) - i\partial_t) \psi_2(t, \underline{P}_i, \underline{E}) = 0 \quad (4.2)$$

$$V_2(t, \underline{E}) = V(\underline{Q}(t, \underline{E})) - m \ddot{\underline{Q}}(\underline{R} - \underline{Q}(t, \underline{E})) + \frac{1}{2} (\underline{R} - \underline{Q}) \alpha(t, \underline{E}) (\underline{R} - \underline{Q})$$

$$m \ddot{\underline{Q}}(t, \underline{E}) = -\partial_{\underline{Q}} V(\underline{Q}(t, \underline{E})) ; \underline{Q}(t, \underline{E}) = \underline{E} + \underline{v} t$$

Entsprechend Gleichung (2.11) genügt ψ_2 der Anfangsbedingung

$$\begin{aligned} \psi_2(t, \underline{P}_i, \underline{E}) &= e^{-i\mathcal{H}_0 t} e^{i\underline{P}_i \underline{R}} g(\underline{R} - \underline{E}) \\ &= e^{iE_i t} e^{i\underline{P}_i (\underline{R} - \underline{Q}(t, \underline{E}))} g(\underline{R} - \underline{Q}(t, \underline{E})) \end{aligned} \quad (4.3)$$

(Zur zweiten Gleichung siehe Anhang A)

In einem ersten Schritt wollen wir zunächst die Wellenfunktion ψ_1 ersetzen durch eine entsprechende Wellenfunktion ψ_2 in dem mit der klassischen Bahn $\underline{z}(t, \underline{g})$ mitbewegten Koordinatensystem (Schwerpunktsystem des Wellenpakets)

$$\Delta \underline{R} = \underline{R} - \underline{z}(t, \underline{g})$$

Ähnlich wie bei einer Galilei Transformation, die in unserem Fall einer unbeschleunigten Bahn entsprechen würde, ersetzen wir

$$\psi_2(\underline{R}, t, \underline{g}) = e^{i \{ S(t) + m \dot{\underline{z}}(t, \underline{g}) \Delta \underline{R} \}} \psi_2(\Delta \underline{R}, t, \underline{g}) \quad (4.4)$$

$S(t)$ soll eine zunächst beliebige reelle Zeitfunktion sein, die wir so wählen werden, daß die "neue Schrödingergleichung" für ψ_2 einfach wird. Indem wir den Ansatz (4.4) in (4.2) einsetzen, erhalten wir

$$\{ \partial_t S + V(\underline{z}) - \frac{m}{2} \dot{\underline{z}}^2 + \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2} \Delta \underline{R} \alpha \Delta \underline{R} - i \partial_t \} \psi_2 = 0$$

Wir wählen $S(t)$ als Lösung der Gleichung

$$\partial_t S(t, \underline{g}) = \frac{m}{2} \dot{\underline{z}}^2(t, \underline{g}) - V(\underline{z}(t, \underline{g})) \quad (4.5)$$

ψ_2 genügt damit der Schrödingergleichung eines rein harmonischen Oszillators.

$$\{ \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2} \underline{R} \alpha(t, \underline{g}) \underline{R} - i \partial_t \} \psi_2(\underline{R}, t, \underline{g}) = 0 \quad (4.6)$$

Entsprechend Gleichung (4.3) gelten die Anfangsbedingungen

$$S(t_i, \underline{q}) = e^{i E_i t_i}$$

$$\varphi_2(\underline{R}, t_i, \underline{q}) = e^{-i \kappa_0 t_i} g(\underline{R}) \quad (4.7)$$

Zusammen mit Gleichung (4.5) erhalten wir also

$$S(t, \underline{q}) = E_i t_i + \int_{t_i}^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{\underline{q}}^2(\tau, \underline{q}) - V(\underline{q}(\tau, \underline{q})) \right\} \quad (4.8)$$

Die Phase S ist also im wesentlichen gleich dem klassischen Wirkungsintegral und hängt für $t_i \rightarrow -\infty$ nicht mehr von t_i ab. Wir setzen nun Gleichung (4.4) in (4.1) ein und erhalten

$$f_2(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{q})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i \{ E_+ t_+ + S(t_+, \underline{q}) - \underline{P}_+ \underline{q}(t_+, \underline{q}) \}} \quad (4.9)$$

$$* \left(e^{i \Delta \underline{P}_+ \Delta \underline{R}}, \varphi_2(\Delta \underline{R}, t_+, \underline{q}) \right)$$

mit

$$\Delta \underline{P}_+ = \underline{P}_+ - m \dot{\underline{q}}(t_+, \underline{q}) \quad (4.10)$$

Bei einer Entwicklung des Potentials bis zur linearen Ordnung ($\alpha \equiv 0$) hat Gleichung (4.6) mit (4.7) die triviale Lösung

$$\varphi_1(\underline{R}, t, \underline{q}) = e^{-i \kappa_0 t} g(\underline{R})$$

Die entsprechende Übergangsamplitude lautet damit

$$f_1(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{Q}) = e^{i \phi_1(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{Q})} \tilde{g}(\Delta \underline{P}_+) \quad (4.11)$$

mit

$$\phi_1(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{Q}) = E_+ t_+ + S(t_+, \underline{Q}) - \underline{P}_+ \underline{Q}(t_+, \underline{Q}) - \frac{1}{2m} \Delta \underline{P}_+^2 t_+ \quad (4.12)$$

und $S(t_+, \underline{Q})$ nach Gleichung (4.8).

Mit dem Energiesatz für die klassischen Bahnen $\underline{Q}(\tau, \underline{Q})$ sowie durch partielle Integrationen erhält man hieraus andere Darstellungen für die Phase ϕ_1 , die für den Grenzübergang $t_+ \rightarrow \infty$ geeigneter sind.

$$\phi_1(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{Q}) \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, m \, \ddot{\underline{Q}}(\tau) \underline{Q}(\tau) - \Delta \underline{P}_+ (\underline{Q}(t_+) - t_+ \dot{\underline{Q}}(t_+)) \\ &= - 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, V(\underline{Q}(\tau)) - \underline{P}_+ (\underline{Q}(t_+) - t_+ \dot{\underline{Q}}(t_+)) \\ &= - 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, V(\underline{Q}(\tau)) - \underline{P}_+ \left(\underline{Q} + \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, \nabla_{\underline{Q}} V(\underline{Q}(\tau)) \right) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, V(\underline{Q}(\tau)) - \underline{P}_+ \underline{Q} \\ &\quad + (\underline{P}_+ - m \dot{\underline{Q}}(\infty)) \int_0^{\infty} d\tau \, \tau \, \ddot{\underline{Q}}(\tau) + \frac{m}{2} \int_0^{\infty} d\tau (\dot{\underline{Q}}(\infty) - \dot{\underline{Q}}(\tau))^2 \\ &\quad + (\underline{P}_+ - m \dot{\underline{Q}}(-\infty)) \int_{-\infty}^0 d\tau \, \tau \, \ddot{\underline{Q}}(\tau) + \frac{m}{2} \int_{-\infty}^0 d\tau (\dot{\underline{Q}}(-\infty) - \dot{\underline{Q}}(\tau))^2 \end{aligned}$$

Die beiden letzten Darstellungen entsprechen den von Lebedeff /3/ gewählten.

Aufgrund der anderen Zerlegung der einlaufenden ebenen Welle ist hier im Unterschied zu Lebedeff die Phase ϕ_1 symmetrisch bezüglich Zeitumkehr. Die letzte Darstellung ist dazu geeignet, sich davon zu überzeugen, daß ϕ_1 im Grenzfall unbeschleunigter Bahnen und kleiner Streuwinkel in ϕ_0 übergeht (vgl. Gleichung (3.2)).

Wir gehen nun wieder dazu über, die Übergangsamplitude f_2 für das quadratisch entwickelte Potential zu berechnen. Der Einfachheit halber beschränken wir uns im Folgenden speziell auf gaussische Form der mikroskopischen Wellenpakete. Entsprechend der Normierung nach Gleichung (2.6) wählen wir also

$$\hat{g}(\underline{p}) = e^{-\frac{1}{2m} p^2 \gamma} \quad (4.14)$$

Hierbei ist $\sqrt{m\gamma}$ die Breite der Funktion $\hat{g}(\underline{p})$ und $\sqrt{\gamma/m}$ entsprechend die Breite von $g(\underline{R})$. Hiermit erhalten wir als Anfangsbedingung für φ_2

$$\begin{aligned} \varphi_2(\underline{R}, t; \beta) &= e^{-i\mathcal{H}_0 t} \int d\underline{p} e^{-\frac{p^2}{2m} \gamma} e^{i \underline{p} \underline{R}} \\ &= \int d\underline{p} e^{-\frac{p^2}{2m} (\gamma + i t)} e^{i \underline{p} \underline{R}} \\ &= \left(\frac{2\pi m}{\gamma + i t} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2} \frac{\underline{R}^2}{\gamma + i t}} \end{aligned} \quad (4.15)$$

(Zum letzten Schritt siehe A2, Gleichung (6.14))

Wie im Anhang gezeigt wird, behält ein gauss'sches Wellenpaket auch unter der Einwirkung eines zeitabhängigen harmonischen Oszillator Potentials eine gaussische Gestalt allgemeinsten Art bei. Darüberhinaus zeigt sich, daß sich ein solches Wellenpaket allein

durch Lösungen der zugehörigen klassischen Bewegungsgleichung beschreiben läßt. Wir übernehmen hier die Berechnung des Matrixelementes in Gleichung (4.9) aus dem Anhang A2 (6.15)

$$\begin{aligned} & \left(e^{i \Delta P \Delta R}, \psi_2(\Delta R, t_i, \underline{g}) \right) \\ &= (2\pi)^3 \|\dot{\underline{\epsilon}}(t_i, \underline{g})\|^{-\frac{1}{2}} e^{-i \frac{1}{2m} \Delta \underline{P}_+ \underline{\epsilon}(t_i, \underline{g}) \frac{1}{\underline{\epsilon}} \Delta \underline{P}_+} \end{aligned} \quad (4.16)$$

mit der komplexen Matrix $\underline{\epsilon}$, die der klassischen Bewegungsgleichung

$$m \ddot{\underline{\epsilon}}(t, \underline{g}) = -\alpha(t, \underline{g}) \underline{\epsilon}(t, \underline{g}) \quad (4.17)$$

genügt mit den Anfangsbedingungen

$$\underline{\epsilon}(t_i, \underline{g}) = t_i - i\gamma, \quad \dot{\underline{\epsilon}}(t_i, \underline{g}) = 1 \quad (4.18)$$

Für Zeiten vor dem Stoß bzw. für $\alpha(t, \underline{g}) \equiv 0$ gilt

$$\underline{\epsilon}(t, \underline{g}) = t - i\gamma$$

$\underline{\epsilon}$ wird also für $t_i \rightarrow -\infty$ unabhängig von t_i . Weiterhin sieht man, daß f_2 mit $\alpha \rightarrow 0$ in f_0 übergeht.

Wir setzen nun Gleichung (4.16) in (4.9) ein und erhalten

$$\begin{aligned} & f_2(\underline{P}_+, \underline{P}_i, \underline{g}) \\ &= \|\dot{\underline{\epsilon}}\|^{-\frac{1}{2}} e^{i \{ E_f t_+ + S(t_i, \underline{g}) - \underline{P}_+ \underline{\epsilon}(t_i, \underline{g}) \}} \\ & \quad * e^{-i \frac{1}{2m} \Delta \underline{P}_+ \underline{\epsilon} \frac{1}{\underline{\epsilon}} \Delta \underline{P}_+} \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$= \|\dot{\underline{\xi}}\|^{-\frac{1}{2}} e^{i \phi_1(\underline{P}_t, \underline{P}_i, \underline{\xi})} - \frac{i}{2m} \Delta \underline{P}_t (\underline{\xi} - t_+ \dot{\underline{\xi}}) \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \Delta \underline{P}_t$$

Auch hier existiert der Grenzwert $t_+ \rightarrow \infty$, da wegen $\ddot{\underline{\xi}}(t_+) \rightarrow 0$, $(\underline{\xi}(t_+, \underline{\xi}) - t_+ \dot{\underline{\xi}}(t_+, \underline{\xi}))$ unabhängig von t_+ wird. Außerdem bilden wir mit Hilfe von Gleichung (6.17) A2 das Betragsquadrat der Übergangsamplitude und ersetzen $\Delta \underline{P}_t = m \Delta \underline{v}_t$

$$|f_2(\underline{P}_t, \underline{P}_i, \underline{\xi})|^2 = \|\dot{\underline{\xi}}\|^{-1} e^{-m \gamma \Delta \underline{v}_t \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}^+} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \Delta \underline{v}_t} \quad (4.20)$$

Der Ausdruck $\Delta \underline{v}_t \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}^+} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \Delta \underline{v}_t = \left| \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \Delta \underline{v}_t \right|^2$ ist immer positiv. Für große Massen m ist die Amplitude f_2 daher nur in der Nähe solcher Kombinationen von $\underline{P}_t$ und $\underline{\xi}$ von Null verschieden, für die $\Delta \underline{v}_t$ verschwindet. Da aufgrund von (2.14) $f_2(\underline{P}_t, \underline{P}_i, \underline{\xi})$ nur auf der Energieschale $\underline{P}_t^2 = \underline{P}_i^2 = m \dot{\underline{\xi}}^2(\infty, \underline{\xi})$ vorkommt, gibt es bei allen Potentialen Kombinationen von $\underline{P}_t$ und $\underline{\xi}$ für die

$$m \dot{\underline{\xi}}(\infty, \underline{\xi}) = m \dot{\underline{\xi}}_t(\infty) = \underline{P}_t$$

erfüllt ist. Für stetige Potentiale mit "hartem Kern" gibt es darüberhinaus zu jedem Endimpuls mindestens einen solchen Stoßparameter $\underline{\xi}$. Wir wollen jedenfalls von nun an voraussetzen, daß es zum vorgegebenen Endimpuls $\underline{P}_t$ mindestens einen solchen Stoßparameter gibt. Der Einfachheit halber gehen wir zunächst einmal davon aus, daß es genau einen zugehörigen klassischen Stoßparameter $\underline{\xi}$ gibt.

Zur Berechnung der S-Matrix haben wir nach Gleichung (2.9) die Amplitude f_2 über alle Stoßparameter zu integrieren. Aufgrund von (4.20) tragen für große m zu diesem Integral nur solche Stoßparameter bei, für die $\Delta \underline{v}_t = \underline{v}_t - \dot{\underline{\xi}}(\infty, \underline{\xi})$ klein ist.

Wir führen nun die Differenz einer beliebigen Bahn $\underline{S}(\tau, \underline{\theta})$ zu der zum Endimpuls $\underline{P}_f$ gehörigen Bahn $\underline{S}(\tau, \underline{\theta}_e) = \underline{S}_f(\tau)$ ein.

$$\underline{S}(\tau, \underline{\theta}) = \underline{S}_f(\tau) + \Delta \underline{S}(\tau, \Delta \underline{\theta})$$

$\Delta \underline{S}(\tau, \Delta \underline{\theta})$ ist eine Funktion von $\Delta \underline{\theta} = \underline{\theta} - \underline{\theta}_e$ und verschwindet für $\Delta \underline{\theta} = 0$.

Mit dieser Substitution formen wir das Wirkungsintegral $S(t_+, \underline{\theta})$ (4.8) um. Wir wollen hierbei davon ausgehen, daß wegen $\Delta \dot{\underline{S}}(\alpha) \approx 0$ auch $\Delta \underline{S}(\tau)$ klein ist und uns daher auf Glieder maximal quadratischer Ordnung in $\Delta \underline{S}$ beschränken

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{\underline{S}}^2(\tau, \underline{\theta}) - V(\underline{S}(\tau, \underline{\theta})) \right\} \\ &= \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{\underline{S}}_f'^2(\tau) + m \dot{\underline{S}}_f(\tau) \Delta \dot{\underline{S}}(\tau) + \frac{m}{2} (\Delta \dot{\underline{S}}(\tau))^2 \right. \\ &\quad \left. - V(\underline{S}_f(\tau)) + m \ddot{\underline{S}}_f(\tau) \Delta \underline{S}(\tau) - \frac{1}{2} \Delta \underline{S} \alpha \Delta \underline{S} \right\} \end{aligned}$$

Wir ordnen nach Potenzen von $\Delta \underline{S}(\tau)$ und erhalten durch partielle Integration

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{\underline{S}}_f'^2(\tau) - V(\underline{S}_f(\tau)) \right\} \\ &\quad + m \dot{\underline{S}}_f(t_+) \Delta \underline{S}(t_+) - m \dot{\underline{S}}_f(t_i) \Delta \underline{S}(t_i) \quad (4.21) \\ &\quad + \frac{m}{2} (\Delta \dot{\underline{S}}(t_+) \Delta \underline{S}(t_+) - \Delta \dot{\underline{S}}(t_i) \Delta \underline{S}(t_i)) \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} d\tau \Delta \underline{S}(\tau) \left\{ m \Delta \ddot{\underline{S}}(\tau) + \alpha(\tau) \Delta \underline{S}(\tau) \right\} \end{aligned}$$

Aufgrund der Anfangsbedingungen für die Bahn $\underline{S}(\tau, \underline{b})$ gilt

$$\Delta \underline{S}(t_i) \dot{\underline{S}}_f(t_i) = 0 \quad ; \quad \Delta \dot{\underline{S}}(t_i) = 0$$

Der letzte Ausdruck fällt ebenfalls fort, da er wegen Gleichung 1.3 von der Ordnung $(\Delta \underline{S})^3$ ist. Wir erhalten daher für das Wirkungsintegral

$$S = \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{\underline{S}}_f^2(\tau) - V(\underline{S}_f(\tau)) \right\} \\ + m \dot{\underline{S}}_f(t_f) \Delta \underline{S}(t_f) + \frac{m}{2} \Delta \dot{\underline{S}}(t_f) \Delta \underline{S}(t_f)$$

Mit dieser Entwicklung der Wirkungsfunktion bis zu den quadratischen Gliedern in $\Delta \underline{S}$ erhalten wir somit die Übergangsamplitude in folgender Form

$$f_2(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}) = \left\| \dot{\underline{S}}(\infty) \right\|^{-\frac{1}{2}} e^{i \phi_c(\underline{P}_f, \underline{P}_i)} \quad (4.22) \\ \times e^{i \frac{m}{2} \Delta \dot{\underline{S}}(t_f) \left(\Delta \underline{S}(t_f) - \underline{S}(t_f) \frac{1}{\underline{E}} \Delta \dot{\underline{S}}(t_f) \right)}$$

wobei für ϕ_c nach Gleichung (4.13) gilt

$$\phi_c(\underline{P}_f, \underline{P}_i) = \phi_1(\underline{P}_f, \underline{P}_i, \underline{b}_c) \quad (4.23) \\ = -m \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ddot{\underline{S}}_f(\tau) \underline{S}_f(\tau)$$

ϕ_c ist also vom Stoßparameter $\underline{b}$ unabhängig. Um die Integration über alle Stoßparameter ausführen zu können, drücken wir nun $\Delta \underline{S}(t_f)$ und $\Delta \dot{\underline{S}}(t_f)$ als Funktion von $\Delta \underline{b}$ aus, d.h. wir stel-

len die beiden Größen durch den führenden Term der Entwicklung nach kleinen $\Delta \underline{b}$ dar. Wenn wir zunächst einmal von den speziellen Fällen Rainbow-, Glory- bzw. Vorwärtsstreuung absehen, so wird der führende Term durch den in $\Delta \underline{b}$ linearen Term geliefert. Gemäß den Gleichungen (1.5) und (1.7) aus Kap. II schreiben wir also

$$\begin{aligned}\Delta \underline{S}(t_+) &= \chi(t_+) \Delta \underline{b} \\ \Delta \dot{\underline{S}}(t_+) &= \dot{\chi}(t_+) \Delta \underline{b}\end{aligned}\tag{4.24}$$

Hiermit lautet dann der führende Term in der Entwicklung des Exponenten nach $\Delta \underline{b}$

$$\begin{aligned}\Delta \dot{\underline{S}} \left(\Delta \underline{S} - \varepsilon \frac{1}{\dot{\chi}} \Delta \dot{\underline{S}} \right) &= \Delta \underline{b} \left(\dot{\chi}' \chi - \dot{\chi}' \varepsilon \frac{1}{\dot{\chi}} \dot{\chi} \right) \Delta \underline{b} \\ &= \Delta \underline{b} \left(\dot{\chi}' \chi \frac{1}{\dot{\chi}} \dot{\chi} - \dot{\chi}' \varepsilon \right) \frac{1}{\dot{\chi}} \dot{\chi} \Delta \underline{b} \\ &= \Delta \underline{b} \left(\chi' \dot{\chi} - \dot{\chi}' \varepsilon \right) \frac{1}{\dot{\chi}} \dot{\chi} \Delta \underline{b}\end{aligned}\tag{4.25}$$

Zum letzten Schritt haben wir die Eigenschaft benutzt, daß $\chi \frac{1}{\dot{\chi}}$ symmetrisch ist. Nach (1.6) erfüllt χ dieselbe Differentialgleichung wie ε . Damit erfüllt $\dot{\chi} \frac{1}{\dot{\chi}}$ dieselbe Differentialgleichung wie $\beta = \dot{\varepsilon} \frac{1}{\dot{\chi}}$ und ist daher symmetrisch ebenso wie β . (vergleiche (6.9)). Mit $\dot{\chi} \frac{1}{\dot{\chi}}$ ist dann auch die Inverse $\chi \frac{1}{\dot{\chi}}$ symmetrisch. Der Ausdruck $(\chi' \dot{\chi} - \dot{\chi}' \varepsilon)$ ist eine Bildung analog der Wronski-Determinante und ist zeitlich konstant, wie im Anhang A2 Gleichung (6.16) gezeigt wird. Nach (1.6) und (4.18) gilt somit

$$(\chi' \dot{\chi} - \dot{\chi}' \varepsilon) = \dot{\varepsilon}(t_i) = 1\tag{4.26}$$

Indem wir Gleichung (4.25) und (4.26) in Gleichung (4.22) einsetzen, erhalten wir schließlich die Übergangsamplitude f_2 in einer für die Integration über $\underline{b}$ geeigneten Form.

$$f_2(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{b}) = \|\dot{\underline{\epsilon}}(\infty, \underline{b})\|^{-\frac{1}{2}} e^{i\phi_c(\underline{P}_+, \underline{P}_-)} e^{i\frac{m}{2} \Delta \underline{b} \frac{1}{\dot{\underline{\epsilon}}} \dot{\underline{\chi}} \Delta \underline{b}} \quad (4.27)$$

Die Integration führen wir mit Hilfe der Sattelpunktmethode durch, welche uns den führenden Term für große m liefert

$$\int d^2 \underline{b} f_2(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{b}) = \frac{2\pi i}{m} \|\dot{\underline{\epsilon}}(\infty, \underline{b}_c)\|^{-\frac{1}{2}} \left\| \frac{1}{\dot{\underline{\epsilon}}} \dot{\underline{\chi}} \right\|_2^{-\frac{1}{2}} e^{i\phi_c(\underline{P}_+, \underline{P}_-)} \quad (4.28)$$

Mit dem Index 2 bezeichnen wir hierbei die zweidimensionale Unterdeterminante, die man durch Beschränkung auf den Unterraum senkrecht zur Bahn erhält. Wir nutzen nun noch die Eigenschaft aus, daß t_+ groß gegen die Stoßzeit ist. In dem uns aus Kap. II bereits bekannten Koordinatensystem (x', y', z') (z' parallel zu $\dot{\underline{P}}_+(\infty)$) vereinfachen sich die Matrizen $\dot{\underline{\epsilon}}$ und $\dot{\underline{\chi}}$, wie im Anhang gezeigt wird für $t_+ \rightarrow \infty$ wie folgt

$$\dot{\underline{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \dot{\underline{\epsilon}}_{11} & \dot{\underline{\epsilon}}_{12} \\ \dot{\underline{\epsilon}}_{21} & \dot{\underline{\epsilon}}_{22} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \dot{\underline{\chi}} = \begin{pmatrix} \dot{\underline{\chi}}_{11} & 0 \\ \dot{\underline{\chi}}_{21} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Hiermit gilt

$$\|\dot{\underline{\epsilon}}\| \left\| \frac{1}{\dot{\underline{\epsilon}}} \dot{\underline{\chi}} \right\|_2 = \|\dot{\underline{\chi}}\|_2$$

so daß wir schließlich erhalten

$$\int d^2 \underline{b} f_2(\underline{P}_+, \underline{P}_-, \underline{b}) = \frac{2\pi i}{m} \|\dot{\underline{\chi}}\|_2^{-\frac{1}{2}} e^{i\phi_c(\underline{P}_+, \underline{P}_-)} \quad (4.29)$$

Das Integral über f_2 hängt also für große Massen nicht mehr von dem zunächst willkürlichen γ ab. Wie man leicht sieht, würde das gleiche auch für jede symmetrische Matrix γ gelten. Das obige Integral ist also für große m von der speziellen Wahl der mikroskopischen Wellenpakete weitgehend unabhängig.

Bei mehreren klassischen Stoßparametern zu einem Endimpuls erhalten wir, wenn die klassischen Stoßparameter nicht zu nah beieinander liegen, eine Summe von entsprechenden Termen. Nicht zu nah bedeutet hierbei, daß sich die jeweiligen Stoßparameterbereiche, die zur Integration beitragen, nicht überlappen.

Wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird, bedeutet es unter den bisher gemachten Voraussetzungen keine zusätzliche Einschränkung, wenn wir zur Bildung der S -Matrix nach Gleichung (2.9) den Term proportional zu $\tilde{g}(z, p)$ fortlassen

$$\tilde{S}(P_f, P_i) = i (2\pi)^2 \frac{v}{m} \sum_{b_c} (\| \dot{X}(t_c) \|^{-\frac{1}{2}} e^{i \phi_c(P_f, P_i)})$$

Für den Wirkungsquerschnitt in klassischer Näherung erhalten wir schließlich nach Gleichung (2.14)

$$\frac{d\sigma(P_f, P_i)}{d\Omega} = v^2 \left| \sum_{b_c} (\| \dot{X}(t_c) \|^{-\frac{1}{2}} e^{i \phi_c(P_f, P_i)}) \right|^2 \quad (4.30)$$

Bei einem klassischen Stoßparameter reduziert sich damit der Wirkungsquerschnitt auf Formel (1.8), Kap. II.

Wir wollen noch kurz untersuchen, welcher "klassische Wirkungsquerschnitt" sich bei einer Entwicklung des Potentials bis zur ersten Ordnung ergibt. Ausgehend von Gleichung (4.11) erhalten wir anstelle der Gleichungen (4.22), (4.27) und (4.29)

$$f_1(\underline{p}_+, \underline{p}_-, \underline{b}) = e^{i \phi_c(\underline{p}_+, \underline{p}_-)} e^{i \frac{m}{2} \Delta \dot{\underline{x}}(t_+) (\Delta \underline{x}(t_+) - (t_+ - i\epsilon) \Delta \dot{\underline{x}}(t_+))}$$

$$= e^{i \phi_c} e^{i \frac{m}{2} \Delta \underline{b} \dot{\underline{x}}'(\chi - (t_+ - i\epsilon) \dot{\underline{x}}) \Delta \underline{b}}$$

$$\int d^2 \underline{b} f_1(\underline{p}_+, \underline{p}_-, \underline{b}) = \frac{2\pi i}{m} e^{i \phi_c(\underline{p}_+, \underline{p}_-)}$$

$$\|\dot{\underline{x}}\|_2^{-\frac{1}{2}} \|\chi(t_+) - (t_+ - i\epsilon) \dot{\underline{x}}\|_2^{-\frac{1}{2}}$$

Durch Überlegungen ähnlich denen zum Schluß des Anhangs 2, kann man sich davon überzeugen, daß $\|\chi - (t_+ - i\epsilon) \dot{\underline{x}}\|_2$ nur in der Nähe der Vorwärtsrichtung gleich 1 wird.

Für allgemeine Streuwinkel würden wir einen von der speziellen Wahl der mikroskopischen Wellenpakete abhängigen "Wirkungsquerschnitt" erhalten.

Bei beliebiger Streurichtung führt also die Interferenz der Wellenpakete zu benachbarten Bahnen nur dann zum richtigen Wirkungsquerschnitt, wenn für die Berechnung der Wellenpakete das Potential bis zur quadratischen Ordnung um die jeweiligen Bahnpunkte (Schwerpunkte) berücksichtigt wird.

III c) Gültigkeitsbedingungen für den klassischen Wirkungsquerschnitt

Zur Herleitung des klassischen Wirkungsquerschnittes haben wir die folgenden 3 Näherungen benutzt.

- 1) Entwicklung des Potentials um den Schwerpunkt der Narrow Wave Packets nach Gleichung (4.1)
- 2) Vernachlässigung der Narrow Wave Packets in Rückwärtsrichtung bei der Zerlegung der ebenen Welle nach Gleichung (2.7)
- 3) Sattelpunktmethode bei der Integration über alle Stoßparameter

Zur Abschätzung dieser 3 Näherungen spezialisieren wir die Narrow Wave Packets von vornherein auf gaussische Form.

Zur Gültigkeit der ersten Näherung müssen wir verlangen, daß die Breite der Narrow Wave Packets während des Durchlaufens des Potentials klein ist und klein bleibt gegen eine für die Bewegung im Potential typische Länge. Für nicht singuläre Potentiale mit einer endlichen Reichweite ist dies die Reichweite Q_0 , für singuläre Potentiale, z.B. Potenzpotentiale, der kürzeste Abstand der klassischen Bahn vom Ursprung. Wir wollen diese Größe im folgenden R_0 nennen. Der Einfachheit halber formulieren wir hier die Gültigkeitsbedingung für eine Entwicklung des Potentials bis zur ersten Ordnung. Nach den Gleichungen (4.4) und (4.15) gilt

$$\begin{aligned}
 | \psi_1(\underline{R}, t, \underline{b}) |^2 &= | \Psi_1(\underline{R}, t, \underline{b}) |^2 \\
 &= (2\pi m)^3 \left(\frac{2\gamma}{\gamma^2 + t^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-m \Delta \underline{R}^2 \frac{\gamma}{\gamma^2 + t^2}}
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Die Breite $\omega(t) = \sqrt{\gamma(t)/m}$ eines Wellenpaketes im linear entwickelten Potential ist also gleich der eines freien Wellenpakets und wird nach Gleichung (5.1) charakterisiert durch die Funktion

$$\gamma(t) = \gamma + \frac{t^2}{\gamma}$$

Wir wollen zunächst die Narrow Wave Packets bezüglich der Größe γ optimieren. Dieses erreichen wir durch die Forderung, daß die Funktion $\gamma(t)$ nach Durchlaufen der Strecke R_0 minimal sein soll. Zum Durchlaufen der Strecke R_0 braucht das Wellenpaket ungefähr die Zeit R_0/v .

Der Ausdruck

$$\gamma\left(\frac{R_0}{v}\right) = \gamma + \frac{1}{\gamma} \left(\frac{R_0}{v}\right)^2$$

wird minimal für

$$\gamma_0 = \frac{R_0^2}{v^2} \quad \text{bzw} \quad \omega_0 = \sqrt{\gamma_0/m} = \sqrt{R_0} \lambda \quad (5.2)$$

Die optimale Breite der mikroskopischen Wellenpakete ist also das geometrische Mittel aus der typischen Länge R_0 und der DeBroglie Wellenlänge λ . Die Gültigkeitsbedingung für die Entwicklung des Potentials bis zur ersten Ordnung lautet damit

$$\omega_0^2 \ll R_0^2$$

bzw. mit Gleichung (5.2)

$$\lambda \ll R_0 \quad (5.3)$$

Die zweite Näherung ist nach Gleichung (4.14) gerechtfertigt für

$$\tilde{g}(2P_i) = e^{-2P_i^2 R_0 \lambda} = e^{-2 \frac{R_0}{\lambda}} \ll 1$$

Der durch die Bedingung (5.3) definierte Gültigkeitsbereich wird also durch die zweite Näherung nicht weiter eingeschränkt.

Zur Abschätzung der dritten Näherung greifen wir zurück auf Formel (4.27). Wie im vorigen Abschnitt gezeigt wurde, stellt Gleichung (4.27) eine konsistente Entwicklung des Exponenten von $f_2(P_i, P_i, \epsilon)$ um den klassischen Stoßparameter ϵ bis zu den quadratischen Gliedern in $\Delta \epsilon$ dar. Gleichung (4.27) definiert außerdem den $\Delta \epsilon$ Bereich der zur Integration über den Sattelpunkt beiträgt

$$m \left| \Delta \epsilon \frac{1}{\epsilon} \dot{\chi} \Delta \epsilon \right| \leq 1 \quad (5.4)$$

Nach der im vorigen Abschnitt gegebenen Herleitung geht der quantenmechanische Wirkungsquerschnitt dann in den klassischen W.Q. über, wenn der in $\Delta \epsilon$ quadratische Term in dem durch Gleichung (5.4) definierten $\Delta \epsilon$ Bereich den führenden Term darstellt.

Nach Gleichung (4.22) ist das nur dann der Fall, wenn in dem besagten $\Delta \epsilon$ Bereich der lineare Entwicklungsterm von $\Delta \dot{\xi}(t_i)$ nach $\Delta \epsilon$ führend ist. Wenn andererseits diese Bedingung erfüllt ist, sind aber auch alle bei der Herleitung von Gleichung (4.27) vernachlässigten Terme höherer Ordnung klein gegen den quadratischen Term. Als weiteres Gültigkeitskriterium für den klassischen Wirkungsquerschnitt stellen wir also die Bedingung auf, daß in dem besagten $\Delta \epsilon$ Bereich (5.4) der quadratische Entwicklungsterm von $\Delta \dot{\xi}^{\perp}(t_i)$ nach $\Delta \epsilon$ klein ist gegen den linearen. Wenn wir zweckmäßigerweise eine Darstellung wählen, in der der lineare Term diagonal wird, erhalten wir die beiden Bedingungen ($i = 1, 2$)

$$|\dot{\chi}_{ii}| \Delta \epsilon_i \gg \sum_{j,k=1}^2 \left| \frac{\partial^2 \dot{\xi}_i(t_i)}{\partial \epsilon_j \partial \epsilon_k} \right| \Delta \epsilon_j \Delta \epsilon_k \quad (5.5)$$

wobei Δb_1 u. Δb_2 definiert sind durch die Gleichungen ($i=1,2$)

$$m (\Delta b_i)^2 / \underline{e}_i \frac{1}{\dot{\underline{x}}} \dot{\underline{x}} \underline{e}_i = 1$$

Wir benutzen die asymptotische Vereinfachung von $\dot{\underline{x}}$ und $\dot{\underline{x}}$ für $t \rightarrow \infty$ (A2, Gleichung (6.21) und (6.22)) und setzen für $\mathcal{Y}$ den optimalen Wert nach Gleichung (5.2) ein. Für Δb_1 und Δb_2 gilt damit

$$(\Delta b_i)^2 = \left| \frac{1}{m} \left(\frac{1}{\dot{\underline{x}}} \dot{\underline{x}} \right)_{ii} - i R_0 \lambda \right| \quad (5.6)$$

Wir wollen nun die Bedingungen (5.5) und (5.6) an drehinvarianten Potentialen erläutern.

Drücken wir zunächst einmal die Endgeschwindigkeit in kartesischen Koordinaten als Funktion des Stoßparameters in ebenen Polarkoordinaten (b, φ) aus, so können wir schreiben

$$\dot{\underline{s}}(b, \varphi) = v \begin{pmatrix} \sin \mathcal{I}(b) \sin \varphi \\ \sin \mathcal{I}(b) \cos \varphi \\ \cos \mathcal{I}(b) \end{pmatrix}$$

Wir wollen nun b und φ durch Δx und Δy nach Abb. 6 ausdrücken

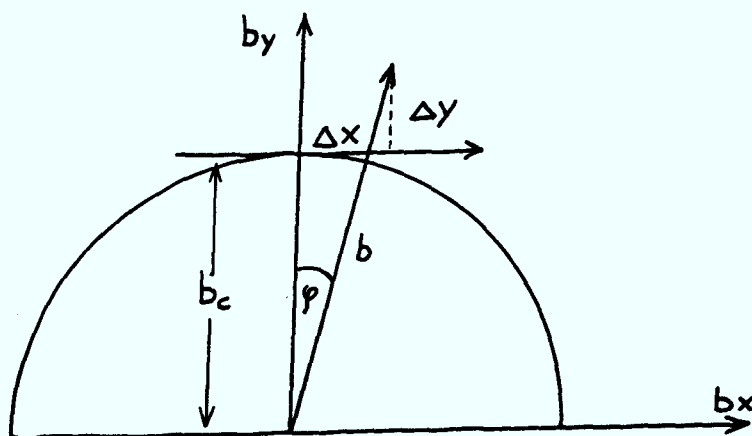


Abb. 6: Erläuterung der Stoßparameter Koordinaten (b, φ) und $(\Delta x, \Delta y)$

Wenn wir uns auf Glieder maximal quadratischer Ordnung in Δx und Δy beschränken, so gilt

$$b = \sqrt{(b_c + \Delta y)^2 + (\Delta x)^2} \simeq b_c + \Delta y + \frac{(\Delta x)^2}{2b_c}$$

$$\sin \varphi = \frac{\Delta x}{b} \simeq \frac{\Delta x}{b_c} - \frac{\Delta x \Delta y}{b_c^2}$$

$$\cos \varphi = \frac{b_c + \Delta y}{b} \simeq 1 - \frac{(\Delta x)^2}{2b_c^2}$$

Hiermit bilden wir die Differenz

$$\Delta \underline{\dot{\xi}}(\Delta x, \Delta y) = \underline{\dot{\xi}}(\Delta x, \Delta y) - \underline{\dot{\xi}}(0, 0)$$

entwickeln wieder bis zur quadratischen Ordnung in Δx u. Δy und gehen schließlich durch Drehung um die X -Achse mit dem Winkel $\mathcal{J}_c = \mathcal{J}(b_c)$ in das gestrichene Koordinatensystem nach Abb. 2 über.

$$\Delta \underline{\dot{\xi}}'(\Delta x, \Delta y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \mathcal{J}_c & -\sin \mathcal{J}_c \\ 0 & \sin \mathcal{J}_c & \cos \mathcal{J}_c \end{pmatrix} \Delta \underline{\dot{\xi}}(\Delta x, \Delta y)$$

$$= v \begin{pmatrix} \frac{\sin \mathcal{J}_c}{b_c} \Delta x + \left(\frac{\cos \mathcal{J}_c}{b_c} \frac{d\mathcal{J}}{db} - \frac{\sin \mathcal{J}_c}{b_c^2} \right) \Delta x \Delta y \\ \frac{d\mathcal{J}}{db} \Delta y + \left(\frac{1}{b_c} \frac{d\mathcal{J}}{db} - \frac{\cos \mathcal{J}_c \sin \mathcal{J}_c}{b_c^2} \right) \frac{\Delta x^2}{2} + \frac{d^2 \mathcal{J}}{db^2} \frac{\Delta y^2}{2} \\ 0 - \frac{1}{2} \left(\frac{\sin \mathcal{J}_c}{b_c} \Delta x \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathcal{J}}{db} \Delta y \right)^2 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

Die Bedingungen (5.5) lauten damit für drehinvariante Potentiale

$$\begin{aligned} \left| \frac{\sin \vartheta}{b} \right| \Delta x &>> \left| \frac{\cos \vartheta}{b} \frac{d\vartheta}{db} - \frac{\sin \vartheta}{b^2} \right| \Delta x \Delta y \\ &\quad (5.7) \\ \left| \frac{d\vartheta}{db} \right| \Delta y &>> \left| \frac{1}{b} \frac{d\vartheta}{db} - \frac{\cos \vartheta \sin \vartheta}{b^2} \right| \frac{\Delta x^2}{2} + \left| \frac{d^2 \vartheta}{db^2} \right| \frac{\Delta y^2}{2} \end{aligned}$$

Die Gleichungen (5.6) für Δx und Δy vereinfachen sich ebenfalls für Zentralpotentiale. Wie im Anhang A2 Gleichung (6.23) gezeigt wird, gilt für drehinvariante Potentiale $\dot{\varphi} = 1$. Mit $\dot{\chi}$ nach Gleichung (5.7) und $\lambda = 1/mv$ erhalten wir somit

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\lambda} \left| \frac{b}{\sin \vartheta} + i R_0 \right|^{\frac{1}{2}} \\ \Delta y &= \sqrt{\lambda} \left| \frac{db}{d\vartheta} + i R_0 \right|^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Zur Diskussion der Bedingungen (5.7) stellen wir zunächst einmal fest, daß außer beim Orbiting, wo ϑ , $\frac{d\vartheta}{db}$ und $\frac{d^2 \vartheta}{db^2}$ divergieren, keiner der Koeffizienten singulär wird, insbesondere auch für $b \rightarrow 0$. Nach /7/ lautet die Entwicklung von $\vartheta(b)$ für kleine b unabhängig vom Potential

$$\vartheta(b) = \pi - \beta_0 b - \beta_1 b^2$$

Damit gilt für kleine b

$$\begin{aligned} \frac{\sin \vartheta}{b} &\rightarrow \beta_0 \approx \frac{1}{R_0} \\ \frac{1}{b} \frac{d\vartheta}{db} + \frac{\sin \vartheta}{b^2} &= O(b) \approx \frac{b}{R_0^3} \end{aligned}$$

Bei kleinen Stoßparametern können wir die quadratischen Koeffizienten durch $\frac{b}{R_0}$ abschätzen und erhalten damit das Kriterium

$$\frac{b}{R_0} \sqrt{\frac{\lambda}{R_0}} \ll 1$$

Für Streuung bei kleinen Stoßparametern erhalten wir somit keine Einschränkung gegenüber der Bedingung (5.3)

Bei allen anderen Stoßparametern können wir die quadratischen Koeffizienten durch $\frac{\vartheta}{R_0}$ abschätzen. Hierbei benutzen wir

$$\frac{d\vartheta}{db} \simeq \frac{\vartheta}{R_0}, \quad b \simeq R_0 \quad (5.9)$$

Im Gegensatz zu (5.9) gilt die obige Abschätzung auch dann, wenn $\frac{d\vartheta}{db}$ verschwindet (Rainbow).

Mit dieser Abschätzung vereinfachen sich die Bedingungen (5.7) zu

$$1 \gg \frac{\vartheta}{R_0} \frac{b}{\sin \vartheta} \sqrt{\frac{\lambda}{R_0} \left| \frac{1}{R_0} \frac{db}{d\vartheta} + i \right|} \quad (5.10a)$$

$$1 \gg \frac{\vartheta}{R_0} \frac{db}{d\vartheta} \sqrt{\frac{\lambda}{R_0} \left| \frac{1}{R_0} \frac{db}{d\vartheta} + i \right|} \quad (5.10b)$$

Im Normalfall gehen diese beiden Bedingungen über in

$$\sqrt{\frac{\lambda}{R_0}} \ll 1$$

In den folgenden Fällen muß diese Bedingung jedoch verschärft werden.

a) In der Nähe der Regenbogenstreuung wird $\frac{d\vartheta}{db}$ klein. Das Kriterium (5.10b) vereinfacht sich damit zu

$$\left(R_0 \frac{d\vartheta}{db} \right)^{-\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{\lambda}{R_0}} \ll 1$$

- b) Erfolgt die Regenbogenstreuung bei großen Streuwinkeln (Deep Rainbow, bzw. Orbiting) so gehen die Bedingungen (5.10) über in

$$\sqrt{\frac{\lambda}{R_0}} \ll 1$$

$$\sqrt{\left(R_0 \frac{d^2 \vartheta}{db^2}\right)^{-\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{\lambda}{R_0}}} \ll 1$$

- c) Bei der Glorystreuung (Rückwärtsstreuung bei $b \neq 0$) muß die Bedingung

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \sqrt{\frac{\lambda}{R_0}} \ll 1$$

zur Gültigkeit der klassischen Näherung erfüllt sein.

- d) In der Nähe der Vorwärtsrichtung geht der quantenmechanische Wirkungsquerschnitt unter der Bedingung

$$\sqrt{\frac{\lambda}{R_0 \vartheta}} \ll 1$$

in den klassischen W.Q. über.

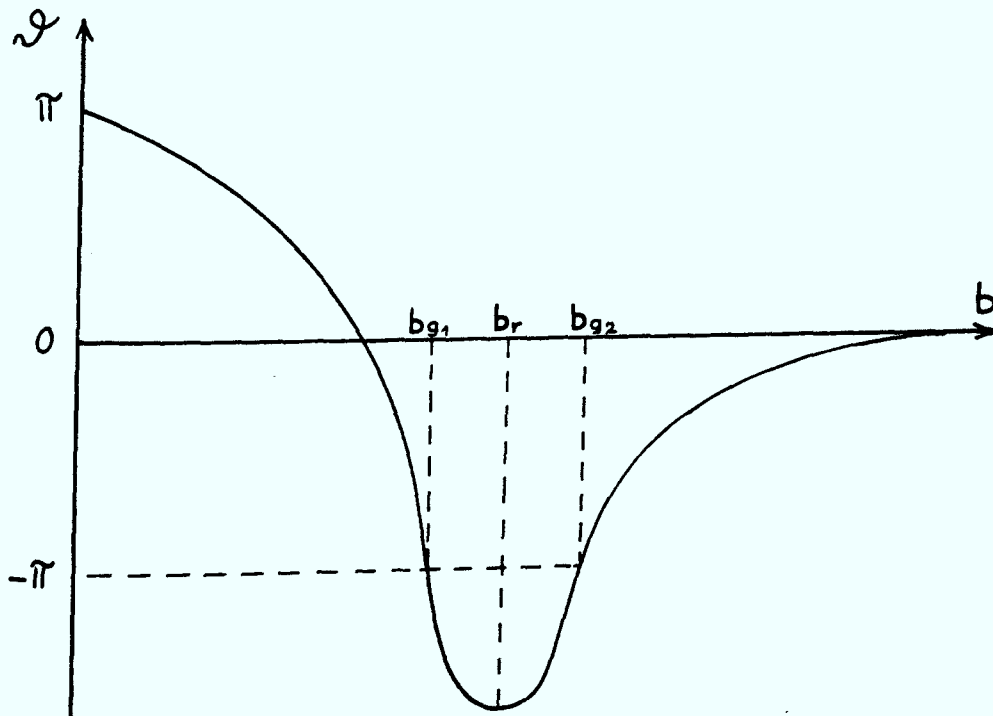


Abb. 7: Erläuterung zur Glory- und Regenbogenstreuung

Zusammenfassend stellen wir also fest:

Außer bei der Streuung mit kleinen Stoßparametern wird die Gültigkeit des klassischen Wirkungsquerschnittes allein durch die Gültigkeit der Sattelpunktmethode begrenzt. Im Normalfall führt das zu der Bedingung $\sqrt{\lambda/r_0} \ll 1$. In der Nähe von Orbiting, Rainbow-, Glory- und Vorwärtsstreuung ergeben sich jedoch einschränkendere Bedingungen.

Soweit es zu einem Streuwinkel mehrere klassische Stoßparameter gibt, gelten die hier angegebenen Kriterien nur für den semiklassischen Wirkungsquerschnitt, der unter Berücksichtigung der Interferenz nach Gleichung (4.30) gebildet wird.

ANHANG

a) Überlagerung freier Wellenpakete

In diesem Abschnitt wollen wir die Formeln (2.4) und (2.5), Kapitel III, herleiten. Wir beginnen mit Formel (2.4)

$$\begin{aligned}
 & e^{-i\mathcal{H}_0 t_1} e^{i\frac{P^2}{2m}} g(\underline{R} - \underline{b}) \\
 &= e^{i\frac{P^2}{2m}} e^{-\frac{i}{2m} (P - i\mathcal{H}_0)^2 t_1} g(\underline{R} - \underline{b}) \\
 &= e^{i\frac{P^2}{2m}} e^{-i(E_P - \mathcal{H}_0)t_1} e^{-\frac{1}{2} \mathcal{H}_0 t_1} g(\underline{R} - \underline{b}) \\
 &= e^{i\frac{P^2}{2m}} e^{-i(E_P - \mathcal{H}_0)t_1} g(\underline{R} - \underline{b} - \frac{1}{2} \mathcal{H}_0 t_1)
 \end{aligned}$$

Indem wir die zweite Darstellung der Narrow Wave Packets nach Gleichung (2.4) benutzen, können wir die linke Seite von Gleichung (2.5) in die Form bringen

$$\int d\underline{R}_1 g(\underline{R}, \underline{R}_1, \underline{b}) = e^{i\frac{P^2}{2m}} \int d\underline{R}_1 e^{-i\mathcal{H}_0 t_1} g(\underline{R} - \underline{R}_1)$$

mit

$$t_1 = \frac{m}{P^2} \underline{P} \underline{R}_1$$

Wir führen nun die Fourierzerlegung der Funktion $g(\underline{R} - \underline{R}_1)$ ein

$$\begin{aligned}
 & \int d\underline{R}_1 e^{-i\underline{K}_0 \cdot \underline{t}_1} g(\underline{R} - \underline{R}_1) \\
 &= \int d\underline{q} d\underline{R}_1 e^{-i\left(\frac{\underline{q}^2}{2P^2} \underline{P} + \underline{q}\right) \underline{R}_1} e^{i\underline{q} \underline{R}} \tilde{g}(\underline{q}) \\
 &= (2\pi)^3 \int d\underline{q} \mathcal{J}\left(\underline{q} + \frac{\underline{q}^2}{2P^2} \underline{P}\right) e^{i\underline{q} \underline{R}} \tilde{g}(\underline{q})
 \end{aligned}$$

Wir zerlegen $\underline{q}$ in seine Komponenten parallel bzw. senkrecht zu $\underline{P}$

$$\underline{q} = \underline{q}^\perp + q_\parallel \frac{\underline{P}}{P}$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}\left(\underline{q} + \frac{\underline{q}^2}{2P^2} \underline{P}\right) &= \mathcal{J}(\underline{q}^\perp) \mathcal{J}\left(q_\parallel + \frac{q_\parallel^2}{2P}\right) \\
 &= \mathcal{J}(\underline{q}^\perp) \left\{ \mathcal{J}(q_\parallel) + \mathcal{J}(q_\parallel + 2P) \right\} \\
 &= \mathcal{J}(\underline{q}) + \mathcal{J}(\underline{q} + 2\underline{P})
 \end{aligned}$$

Hiermit bringen wir Formel (2.5) in die Form

$$\begin{aligned}
 & \int d\underline{R}_1 g(\underline{R}, \underline{R}_1, \underline{P}) \\
 &= (2\pi)^3 \left\{ \hat{g}(0) e^{i\underline{P} \underline{R}} + \hat{g}(-2\underline{P}) e^{-i\underline{P} \underline{R}} \right\}
 \end{aligned}$$

Mit der Normierung (2.6) erhalten wir schließlich die rechte Seite von Gleichung (2.5).

b) Gauss'sches Wellenpaket im Feld eines zeitabhängigen harmonischen Oszillators

Zur Berechnung der Übergangsamplitude für Narrow Wave Packets benötigen wir nach Gleichung (4.9) Wellenpakete im Feld eines 3-dimensionalen harmonischen Oszillators mit zeitabhängigen Federn und Hauptachsen

$$\left(\mathcal{H}_0 + \frac{1}{2} \underline{R} \alpha(t) \underline{R} - i \partial_t \right) \psi_2(\underline{R}, t) = 0 \quad (6.1)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir davon ausgehen, daß α symmetrisch ist

$$\alpha = \alpha'$$

Indem wir uns auf gaussische Form der Wellenpakete spezialisieren lautet die Anfangsbedingung entsprechend Gleichung (4.15)

$$\psi_2(\underline{R}, t_i) = \left(\frac{2\pi m}{\gamma + i t_i} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2} \frac{\underline{R}^2}{\gamma + i t_i}} \quad (6.2)$$

Zur Lösung dieser beiden Gleichungen machen wir den Ansatz, daß das Wellenpaket ψ_2 unter der Einwirkung des Oszillatorpotentials eine allgemein gaussische Gestalt beibehält

$$\psi_2(\underline{R}, t) = A(t) e^{\frac{i}{m} \underline{R} \beta(t) \underline{R}} \quad (6.3)$$

mit einer komplexen symmetrischen Matrix β

$$\beta = \beta' \quad (6.4)$$

Wir setzen diesen Ansatz in Gleichung (4.6) ein

$$\left\{ -i \left(\frac{\dot{A}}{A} + \frac{1}{2} \text{Spur } \beta \right) + \frac{m}{2} \underline{R} \left(\beta^2 + \dot{\beta} + \frac{\alpha}{m} \right) \underline{R} \right\} \psi_2 = 0$$

und erhalten hieraus das Differentialgleichungssystem

$$\frac{\dot{A}}{A} + \frac{1}{2} \text{Spur } \beta = 0 \quad (6.5)$$

$$\beta^2 + \dot{\beta} + \frac{\alpha}{m} = 0 \quad (6.6)$$

Nach Gleichung (6.2) ergeben sich die folgenden Anfangsbedingungen

$$A(t_i) = \left(\frac{28m}{j+t_i} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (6.7)$$

$$\beta(t_i) = \frac{1}{t_i - i j} \quad (6.8)$$

Wir wollen uns nun noch davon überzeugen, daß $\beta = \beta'$ erfüllt ist. Hierzu bringen wir (6.6) in die Form

$$\int \beta = - \left(\frac{\alpha}{m} + \beta^2 \right) \int t \quad (6.9)$$

Wegen $\alpha = \alpha'$ ist β zu allen Zeiten symmetrisch, wenn es zu irgend einer Zeit symmetrisch ist. Nach Gleichung (6.8) ist das zur Zeit t_i der Fall.

Wir beginnen mit der Lösung der Gleichung (6.6). Zunächst führen

wir diese nicht lineare Differentialgleichung durch die Substitution

$$\beta = \dot{\xi} \frac{1}{\xi} \quad (6.10)$$

in eine lineare Differentialgleichung über. Wir bilden

$$\frac{d}{dt} \left(\xi \frac{1}{\xi} \right) = \dot{\xi} \frac{1}{\xi} - \xi \left(\frac{\dot{1}}{\xi} \right) = 0$$

und erhalten somit

$$\left(\frac{\dot{1}}{\xi} \right) = - \frac{1}{\xi} \dot{\xi} \frac{1}{\xi}$$

$$\dot{\beta} + \beta^2 = \ddot{\xi} \frac{1}{\xi} = - \frac{\alpha}{m}$$

$$m \ddot{\xi} = - \alpha \xi \quad (6.11)$$

Die Matrix ξ genügt damit der Bewegungsgleichung des zugehörigen klassischen Oszillators. Die Anfangsbedingungen für ξ sind mit (6.10) und (6.8) nur bis auf einen gemeinsamen Faktor bestimmt.

Wir wählen

$$\dot{\xi}(t_i) = 1 \quad ; \quad \xi(t_i) = t_i - i\delta \quad (6.12)$$

Wir gehen nun zur Lösung von Gleichung (6.5) über und drücken $A(t)$ durch die Matrix $\xi(t)$ aus. Hierzu formen wir zunächst

$$\text{Spur } \beta = \text{Spur } \dot{\xi} \frac{1}{\xi}$$

mit Hilfe der Jakobischen Formel aus der Theorie der Systeme von linearen Differentialgleichungen um.

$$\text{Spur } \dot{\Sigma} \frac{1}{\Sigma} = \frac{\frac{d}{dt} \|\Sigma\|}{\|\Sigma\|}$$

Zum Beweis dieser Formel definieren wir

$$\dot{\Sigma} = J \Sigma$$

$$\Sigma = (\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$$

und bilden

$$\frac{d}{dt} \|\Sigma\| = \|\dot{\underline{e}}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3\| + \|\underline{e}_1, \dot{\underline{e}}_2, \underline{e}_3\| + \|\underline{e}_1, \underline{e}_2, \dot{\underline{e}}_3\|$$

$$= \sum_{i=1}^3 \|\delta_{1i} \underline{e}_i, \underline{e}_2, \underline{e}_3\| + \dots$$

$$= \delta_{11} \|\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3\| + \delta_{22} \|\Sigma\| + \delta_{33} \|\Sigma\|$$

$$= \text{Spur } J \|\Sigma\|$$

Mit Hilfe der obigen Identität können wir Gleichung (6.5) in die Form bringen

$$\frac{d}{dt} \ln A = - \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \ln \|\Sigma\|$$

mit der allgemeinen Lösung

$$A(t) = a \|\xi(t)\|^{-\frac{1}{2}}$$

Zusammen mit den Anfangswerten für $A(t)$ (6.7) und $\xi(t)$ (6.12) erhalten wir somit folgende Lösung von Gleichung (6.5)

$$A(t) = \left(\frac{2\pi m}{i} \right)^{\frac{3}{2}} \|\xi(t)\|^{-\frac{1}{2}}$$

Hiermit haben wir die zeitliche Entwicklung eines gaussischen Wellenpaketes in einem allgemeinen zeitabhängigen Oszillator Potential auf Lösungen des zugehörigen klassischen Oszillator Problems zurückgeführt.

$$\varphi_2(R, t) = \left(\frac{2\pi m}{i} \right)^{\frac{3}{2}} \|\xi(t)\|^{-\frac{1}{2}} e^{i \frac{m}{2} R \dot{\xi} \frac{1}{\xi} R} \quad (6.13)$$

Im Kap. III b benötigen wir die Fouriertransformierte dieser Wellenfunktion

$$(e^{i \Delta P R}, \varphi_2(R, t))$$

$$= \left(\frac{2\pi m}{i} \right)^{\frac{3}{2}} \|\xi(t)\|^{-\frac{1}{2}} \int dR e^{i \frac{m}{2} R \dot{\xi} \frac{1}{\xi} R - i \Delta P R}$$

Das hier auftretende Integral lösen wir durch quadratische Ergänzung des Exponenten

$$\begin{aligned} & \int dR e^{i \frac{m}{2} R \dot{\xi} \frac{1}{\xi} R - i P R} \\ &= \int dR e^{i \frac{m}{2} (R - \frac{1}{m\dot{\xi}} P) \dot{\xi} (R - \frac{1}{m\dot{\xi}} P) - \frac{i}{2m} \frac{P^2}{\dot{\xi}}} \quad (6.14) \end{aligned}$$

$$= \left(\frac{2\pi i}{m} \right)^{\frac{3}{2}} \| \beta \|^{-\frac{1}{2}} e^{-i \frac{1}{2m} \underline{p} \frac{1}{\beta} \underline{p}}$$

Für das im Kap. III b benötigte Matrixelement erhalten wir damit

$$\begin{aligned} & \left(e^{i \Delta \underline{p}_t \underline{R}}, \psi_2(\underline{R}, t) \right) \\ &= (2\pi)^3 \| \dot{\underline{\xi}}(t) \|^{-\frac{1}{2}} e^{-i \frac{1}{2m} \Delta \underline{p}_t \underline{\xi} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \Delta \underline{p}_t} \end{aligned} \quad (6.15)$$

Um mit diesem Ausdruck etwas vertrauter zu werden, bilden wir noch das Betragsquadrat

$$\begin{aligned} & \left| \left(e^{i \Delta \underline{p}_t \underline{R}}, \psi_2(\underline{R}, t) \right) \right|^2 \\ &= (2\pi)^6 \| \dot{\underline{\xi}} \|^{-1} e^{i \frac{1}{2m} \Delta \underline{p}_t \left((\underline{\xi} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}})^* - \underline{\xi} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \right) \Delta \underline{p}_t} \end{aligned}$$

Da $\underline{\xi} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} = \frac{1}{\beta}$ symmetrisch ist (vgl. (6.9)), gilt mit $\underline{\xi}^+ = \underline{\xi}'^*$

$$\begin{aligned} \left(\underline{\xi} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \right)^* - \underline{\xi} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} &= \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}^+} \underline{\xi}^+ - \underline{\xi} \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \\ &= \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}^+} \left(\underline{\xi}^+ \dot{\underline{\xi}} - \dot{\underline{\xi}}^+ \underline{\xi} \right) \frac{1}{\dot{\underline{\xi}}} \end{aligned}$$

Der Ausdruck $(\underline{\xi}^+ \dot{\underline{\xi}} - \dot{\underline{\xi}}^+ \underline{\xi})$ ist eine Bildung analog der Wronski Determinante aus der Theorie der linearen Differentialgleichungen 2. Ordnung. Wir erwarten daher, daß dieser Ausdruck konstant ist. Im Hinblick auf weitere Anwendung im Kap. III b betrachten wir den obigen Ausdruck in etwas allgemeinerer Form mit zwei be-

liebigen komplexen Matrizen η und ε , die Lösungen der Differentialgleichung (6.11) sein sollen und bilden

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\eta' \dot{\varepsilon} - \dot{\eta}' \varepsilon) &= \eta' \ddot{\varepsilon} - \ddot{\eta}' \varepsilon \\ &= -\frac{1}{m} (\eta' \alpha \varepsilon - \dot{\eta}' \alpha \varepsilon) = 0 \end{aligned} \quad (6.16)$$

Damit ist der Ausdruck $(\eta' \dot{\varepsilon} - \dot{\eta}' \varepsilon)$ zeitlich konstant. In unserem Fall können wir daher schreiben

$$\varepsilon^+ \dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}^+ \varepsilon = t i + i f - (t i - i f) = 2 i f$$

und erhalten

$$\begin{aligned} & \left| \left(e^{i \Delta P_t \mathbb{R}}, \varphi_2(\mathbb{R}, t) \right) \right|^2 \\ &= (2\pi)^6 \left| \|\dot{\varepsilon}\| \right|^{-1} e^{-\frac{\gamma}{m} \Delta P_t \frac{1}{\dot{\varepsilon}^+} \frac{1}{\dot{\varepsilon}} \Delta P_t} \end{aligned} \quad (6.17)$$

Zum Schluß wollen wir noch das asymptotische Verhalten der Matrix $\dot{\varepsilon}(t_+)$ für $t_+ \rightarrow \infty$ untersuchen. Hierbei machen wir uns zunutze, daß ε derselben Bewegungsgleichung genügt wie die infinitesimale Differenz zwischen zwei klassischen Bahnen (vgl. Kap. II). Zunächst zerlegen wir ε in Real- und Imaginärteil

$$\varepsilon = \xi - i f \chi \quad (6.18)$$

Da α reell ist, genügen sowohl Real- als auch Imaginärteil getrennt der Differentialgleichung (6.11)

$$m \ddot{\xi} = -\alpha \xi \qquad m \ddot{\chi} = -\alpha \chi \qquad (6.19)$$

Nach Gleichung (6.12) erfüllen χ und ξ die folgenden Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} \xi(t_i) &= t_i & \chi(t_i) &= 1 \\ \dot{\xi}(t_i) &= 1 & \dot{\chi}(t_i) &= 0 \end{aligned} \qquad (6.20)$$

Wir können also den Imaginärteil von ξ bis auf den Faktor $-i\gamma$ mit der Matrix χ aus Kap. II identifizieren. Im Kap. II wurde gezeigt, daß $\chi(t)$ die infinitesimalen Differenzen zwischen zwei klassischen Bahnen gleicher Anfangsgeschwindigkeit beschreibt ($\delta \dot{\xi}(t_i) = 0$)

$$\delta \xi(t) = \chi(t) \delta \xi(t_i)$$

$$\delta \dot{\xi}(t) = \dot{\chi}(t) \delta \xi(t_i)$$

Dementsprechend beschreibt die Matrix $\xi(t, \xi)$ die infinitesimalen Änderungen der klassischen Bahn $\xi(t, \xi)$ als Funktion der Anfangsgeschwindigkeit

$$\delta \xi(t) = \xi(t) \delta \dot{\xi}(t_i)$$

$$\delta \dot{\xi}(t) = \dot{\xi}(t) \delta \dot{\xi}(t_i)$$

Entsprechend den Anfangsbedingungen (6.20) wird hierbei jedoch nicht der Anfangsort festgehalten, sondern gleichzeitig so geändert, daß die geänderte Bahn im potentialfreien Fall bei $t = 0$ mit der alten Bahn zusammenfällt ($\underline{q}(0) = \underline{\theta}$ für $\alpha(t) \equiv 0$) oder anders ausgedrückt, daß die geänderte Bahn auf den gleichen Punkt bei $t = 0$ gezielt ist. Bis auf Glieder höherer Ordnung entspricht das einer Änderung der Bahn bei gleichem Stoßparameter.

Aufgrund der Zeitverschiebungsinvarianz sowie der Energieerhaltung der klassischen Mechanik können wir nun Aussagen über das asymptotische Verhalten von $\dot{\underline{X}}(t_+)$ und $\dot{\underline{q}}(t_+)$ für $t_+ \rightarrow \infty$ machen. Hierzu ist es zweckmäßig, für die Matrizen $\dot{\underline{X}}$ und $\dot{\underline{q}}$ die gemischte Darstellung nach Kap. II, Abb. 2 zu wählen, die die Komponenten von $\dot{\underline{S}} \dot{\underline{q}}(t_+)$ im Koordinatensystem (X', y', z') ($\underline{e}_x' \parallel \dot{\underline{q}}(t_+)$) mit den Komponenten von $\dot{\underline{S}} \underline{q}(t_+)$ bzw. $\dot{\underline{S}} \dot{\underline{q}}(t_+)$ im Koordinatensystem (x, y, z) ($\underline{e}_x \parallel \underline{p}_x$) verknüpft. Aus der Zeitverschiebungsinvarianz folgt, daß $\Delta \dot{\underline{q}}(t_+)$ verschwindet, wenn $\dot{\underline{S}} \underline{q}(t_+)$ parallel zu $\underline{p}_x$ ist. Hieraus folgt, daß die letzte Spalte von $\dot{\underline{X}}(t_+)$ nur Nullen enthält. Aus der Energieerhaltung für die Bahnen $\underline{q}(t)$ und $\underline{q}(t) + \dot{\underline{S}} \underline{p}(t)$ ergibt sich die Beziehung

$$\dot{\underline{q}}(t_+) \dot{\underline{S}} \dot{\underline{q}}(t_+) = \dot{\underline{q}}(t_+) \dot{\underline{S}} \dot{\underline{q}}(t_+)$$

Damit verschwindet auch die letzte Zeile von $\dot{\underline{X}}(t_+)$

$$\dot{\underline{X}}(t_+) = \begin{pmatrix} \dot{\underline{X}}(t_+) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

Für die letzte Zeile der Matrix $\dot{\underline{q}}$ folgt ebenso

$$\dot{\underline{q}}(t_+) = \begin{pmatrix} \dot{\underline{q}}(t_+) & \dot{q}_{2,3} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.22)$$

Die zweidimensionale Matrix $\dot{\mathcal{P}}(t_+)$ beschreibt nach dem oben gesagten eine infinitesimale Drehung der Bahn $\underline{\mathcal{P}}(t_+)$ bei konstantem Stoßparameter. Für drehinvariante Potentiale gilt damit

$$\dot{\mathcal{P}}(t_+) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.23)$$

Den Herren Prof. G. Leibfried und Dr. N. Breuer danke ich für viele anregende und klärende Diskussionen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. K. Dettmann für seine intensive Betreuung dieser Arbeit.

Literaturverzeichnis

- /1/ K.W. Ford and J.A. Wheeler, Ann. Phys. 7, 259 (1959) oder
R.G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles
(McGraw-Hill Book Company, New York, 1966) Chap. 18

- /2/ P. Pechukas, Phys. Rev. 181, 166 (1969)

- /3/ S.A. Lebedeff, Phys. Rev. 165, 1399 (1968), Phys. Rev. D1,
1583 (1970)

- /4/ M.L. Goldberger and K.M. Watson, Collision Theory (John
Wiley & Sons, Inc., New York, 1964) Chap. 3

- /5/ K. Dettmann, High Energy Treatment of Atomic Collisions in
Springer Tracts in Mod. Phys. Vol 58 (Springer Verlag Ber-
lin, Heidelberg, New York 1971)

- /6/ Glauber, Lectures in Theor. Physics Vol. 1 (Interscience
Publishers, Inc., New York, 1959)

- /7/ G. Leibfried, Bestrahlungseffekte in Festkörpern, Teubner
Verlagsgesellschaft, Stuttgart, Kap. 3.3