1,02. Nach Abb. 21 sollte V_3Al eine kritische Temperatur $\geqq 17\,°K$ besitzen. Es kann deshalb auch weiterhin als interessantes Ziel gelten, V_3Al als A15-Phase zu gewinnen.

Einen großen Teil der Präparation hat mein Mitarbeiter Herr A. FINK geleistet, wofür ich ihm herzlich danke. Für wertvolle Unterstützung sind wir mehreren Damen und Herren des Forschungslaboratoriums der Siemens AG, Erlangen, zu großem Dank verpflichtet. So Frau Dr. GIESECKE für die Bestimmung von Gitterkonstanten, Herrn O. ERNST für chemische Analysen, Herrn W. HEINZEL und Herrn Dr. HILLENBRAND für die Messung kritischer Temperaturen.

Modell einer unelastischen Streuung

RUDOLF AVENHAUS

Institut für Angewandte Reaktorphysik, Kernforschungszentrum Karlsruhe

und HEINZ KOPPE

Institut für Theoretische Physik, Universität Kiel

(Z. Naturforsch. **24 a**, 1145—1150 [1969]; eingegangen am 15. April 1969)

Eine eindimensionale Zwei-Kanal-Streuung wird mit der stationären und der instationären Schrödinger-Gleichung behandelt. Es werden die gebundenen Zustände des Systems bestimmt sowie die Übergangswahrscheinlichkeiten bezüglich des Streukörpers. Es wird der Fall behandelt, daß der Streukörper sich vor der Streuung nicht in einem Energieeigenzustand befindet.

1. Problemstellung

Die Streuung eines Teilchens unter gleichzeitiger Anregung des Streuzentrums kann nach dem bekannten Bornschen Verfahren behandelt werden, welches von ZEEMACH und GLAUBER [1] in eine sehr elegante Form gebracht worden ist. Dabei wird aber vorausgesetzt, daß sich der Streuer anfänglich in einem stationären Zustand befindet, d. h. entweder in einem definierten Quantenzustand oder im thermischen Gleichgewicht.

In dieser Arbeit soll untersucht werden, was geschieht, wenn diese Bedingung nicht erfüllt ist.

Der Anlaß zu dieser Untersuchung war eine von E. WIGNER gesprächsweise geäußerte Frage, wieso man eigentlich stillschweigend annimmt, daß sich ein Zwischengitteratom immer in einer bestimmten Gitterlücke befindet, obwohl es ein periodisches Potential sieht und die Eigenzustände an sich Bloch-Wellen seien. Das Problem der Streuung an einem lokalisierten Zwischengitteratom führt unmittelbar zu der hier angeschnittenen Fragestellung.

Wir betrachten das einfachste Modell einer eindimensionalen unelastischen Streuung, eine Zwei-Kanal-Streuung, und behandeln es mit Hilfe des „zeitabhängigen Verfahrens“ [2]. Dieses Verfahren ermöglicht die Behandlung von Streuproblemen mit der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung; es vermeidet somit die Verwendung von ebenen Wellen und ihre Interpretation als Teilchenstrom, wie es bei der üblichen Methode mit der stationären Schrödinger-Gleichung geschieht. Daher lassen sich mit diesem Verfahren Probleme behandeln, die über den Rahmen der Bornschen Näherung hinausgehen. Insbesondere erlaubt es die Behandlung von Fällen, in denen sich der Streukörper vor der Streuung nicht in einem Energieeigenzustand befindet.

Der Hamilton-Operator unseres Modelles hat die Form

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \omega\,\boldsymbol{\sigma}_3 + \delta(x)\,(a + b\,\boldsymbol{\sigma}_1)\,. \quad (1.1)$$

Dabei ist $\omega > 0$, a und b sind beliebige Konstanten. $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_3$ sind die Paulischen Spinmatrizen. Wie üblich haben wir $\hbar = m_e = 1$ gesetzt. $\omega\,\boldsymbol{\sigma}_3$ ist der Hamilton-Operator des Streukörpers, der sich an der Stelle $x = 0$ befindet und die Energie ω bzw. $-\omega$ besitzen kann. Die Wechselwirkung $\delta(x)\,(a + b\,\boldsymbol{\sigma}_1)$ wirkt auf das einfallende Teilchen wie ein δ-Potential, auf den Streukörper dagegen so, daß er Energie aufnehmen oder abgeben kann.

Wir behandeln den Hamilton-Operator (1.1) im zweiten Teil mit der stationären Schrödinger-Gleichung. Wir bestimmen die gebundenen und die

Sonderdruckanforderungen erbeten an: RUDOLF AVENHAUS, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Institut für Angewandte Reaktorphysik, *D-7500 Karlsruhe*, Postach 3640.

[1] A. C. ZEMACH u. R. J. GLAUBER, Phys. Rev. **101**, 118 [1956].
[2] H. KOPPE, Z. Naturforsch. **6 a**, 229 [1951].

quasistationären Zustände des Systems und berechnen bei den freien Zuständen die Übergangswahrscheinlichkeiten dafür, daß der Streukörper aus seinem ursprünglichen Zustand in den anderen gestoßen wird bzw. im gleichen Zustand bleibt. Wir behandeln weiter den Fall eines statistischen Gemisches von Zuständen des Streukörpers, d. h. den Fall, daß sich der Streukörper vor der Streuung nicht in einem Energieeigenzustand befindet.

Ein Verfahren zur Behandlung von statistischen Gemischen, das von der Eigenwertgleichung ausgeht, wurde auch bei der Berechnung von Wirkungsquerschnitten für Neutronenstreuung angewandt [1, 3]. Zur Klärung der Frage, wann dies zulässig ist, behandeln wir unser Modell im dritten Teil mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung. Wir geben für die Zeit $t=0$ ein Wellenpaket an der Stelle $x=x_0$ vor, das sich auf der linken Seite der x-Achse befindet, und berechnen Ausbreitung und Streuung dieses Wellenpaketes nach der „zeitabhängigen Methode". Wir erhalten die gleichen Übergangswahrscheinlichkeiten wie im zweiten Teil, abgesehen von einem Spezialfall, der sich nicht mit der stationären Schrödinger-Gleichung behandeln läßt, da hier die Interpretation der ebenen Wellen als Teilchenstrom versagt. Wir betrachten schließlich den Fall eines statistischen Gemisches von Ausgangszuständen des Streukörpers und erhalten unter einer sehr anschaulichen Bedingung die gleichen Übergangswahrscheinlichkeiten, die wir mit der stationären Schrödinger-Gleichung erhielten.

2. Das zeitunabhängige Verfahren

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für unser Modell lautet nach (1.1)

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\omega\,\boldsymbol{\sigma}_3+\delta(x)\,(a+b\,\boldsymbol{\sigma}_1)\right)\psi(x)=E\,\psi(x)\,;\qquad \psi=\begin{pmatrix}u_2\\u_1\end{pmatrix}. \tag{2.1}$$

Für die allgemeine Lösung von (2.1) machen wir den Ansatz

$$u^p=e^{\boldsymbol{\varkappa}x}\cdot u_+^p+e^{-\boldsymbol{\varkappa}x}\cdot u_-^p \tag{2.2}$$

$$\mathrm{p}=\mathrm{l},\,\mathrm{r}\ (\text{links, rechts von } x=0)$$

$$\boldsymbol{\varkappa}=\begin{pmatrix}\varkappa_2&0\\0&\varkappa_1\end{pmatrix}=\tfrac{1}{2}\,(\varkappa_2+\varkappa_1)+\tfrac{1}{2}\,(\varkappa_2-\varkappa_1)\,\boldsymbol{\sigma}_3\,,$$

$$\varkappa_2=\left(-2(E-\omega)\right)^{1/2};\quad \varkappa_1=\left(-2(E+\omega)\right)^{1/2}.$$

Um das Vorzeichen von $\boldsymbol{\varkappa}$ festzulegen, setzen wir $\mathrm{Re}\,\boldsymbol{\varkappa}>0$. Für $\mathrm{Re}\,\boldsymbol{\varkappa}=0$ setzen wir $\mathrm{Im}\,\boldsymbol{\varkappa}<0$. Diese Vorzeichenwahl ist deshalb zweckmäßig, weil $\exp(\boldsymbol{\varkappa}\,x)$ dann entweder nach rechts exponentiell anwächst, oder eine nach links auslaufende Welle darstellt. Beide Möglichkeiten wollen wir später ausschließen.

Die Stetigkeits- und Sprungbedingungen an der Stelle $x=0$ ergeben mit $\boldsymbol{\nu}=a+b\,\boldsymbol{\sigma}_1$ für den Ansatz (2.2) folgende Gleichungen, die den Streuprozeß charakterisieren:

$$u_+^{\mathrm{r}}+u_-^{\mathrm{r}}=u_+^{\mathrm{l}}+u_-^{\mathrm{l}}\,, \tag{2.3}$$
$$\boldsymbol{\varkappa}\,(u_+^{\mathrm{r}}-u_-^{\mathrm{r}})=2\,\boldsymbol{\nu}\,(u_+^{\mathrm{l}}-u_-^{\mathrm{l}})+\boldsymbol{\varkappa}(u_+^{\mathrm{l}}-u_-^{\mathrm{l}})\,.$$

Wir unterscheiden im reellen Energiespektrum des Hamilton-Operators (1.1) drei verschiedene Bereiche: 1. Für $E<-\omega$ gilt $\mathrm{Im}\,\varkappa_{1,2}=0$, hier liegen die gebundenen Zustände. 2. Für $-\omega<E<\omega$ gilt $\mathrm{Re}\,\varkappa_1=0$, $\mathrm{Im}\,\varkappa_2=0$, wir haben bezüglich des $-\omega$-Zustandes des Streukörpers einen freien Zustand, bezüglich des ω-Zustandes einen gebundenen Zustand. 3. Für $E>\omega$ gilt $\mathrm{Re}\,\varkappa_{1,2}=0$, wir haben es daher mit freien Zuständen zu tun. Daneben treten noch Zustände auf, die durch komplexe Energien charakterisiert sind, und die sich nicht in das obige Schema einordnen lassen.

Gebundene Zustände

Damit $\psi(x)$ in diesem Fall für $x\to\pm\infty$ nicht gegen ∞ strebt, müssen wir fordern

$$u_-^{\mathrm{l}}=0,\qquad u_+^{\mathrm{r}}=0\,. \tag{2.4}$$

Das System (2.3) hat dann nur eine Lösung, wenn gilt

$$(\varkappa_1+a)\,(\varkappa_2+a)-b^2=0\,. \tag{2.5}$$

Gl. (2.5) stellt die Bestimmungsgleichung für die Energien E der gebundenen Zustände dar. Ihre Diskussion ergibt: Für $\mathrm{Re}\,\varkappa_1>0$, $\mathrm{Re}\,\varkappa_2>0$ existieren nur reelle Lösungen. Für $a>0$ existiert genau eine Lösung, falls $b^2-a^2>2\,a\,\omega^{1/2}$, d. h. falls $|b|>a$. Für $-2\,\omega^{1/2}<a<0$ existiert immer genau eine Lösung. Für $a<-2\,\omega^{1/2}$ existieren zwei Lösungen, falls $b^2-a^2<2\,a\,\omega^{1/2}$, genau eine Lösung, falls $b^2-a^2>2\,a\,\omega^{1/2}$.

Zum Verständnis dieser Bedingungen gehen wir aus von dem Fall $b=0$. Aus (2.3) und (2.5) folgt dann

$$\varkappa_1=-a,$$
$$\varkappa_2=\pm\,(a^2+4\,\omega)^{1/2}, \tag{2.6a}$$
$$u_{2+}^{\mathrm{l}}=0$$

[3] L. VAN HOVE, Phys. Rev. **95**, 249, 1347 [1954].

oder

$$\varkappa_1 = \pm (a^2 - 4\,\omega)^{1/2}, \quad \varkappa_2 = -a, \quad u^1_{1+} = 0, \tag{2.6b}$$

d. h. es existieren keine Übergänge zwischen den beiden möglichen Zuständen des Streukörpers.

Damit für $b=0$ ein gebundener Zustand existiert, muß $a<0$ sein; dies liefert die Erklärung für die erste Bedingung: da wir es mit einem abstoßenden Potential zu tun haben, muß $|b|$ hinreichend groß sein, damit ein gebundener Zustand existiert.

Die Tatsache, daß in (2.6b) $\varkappa_1$ für $a^2/4<\omega$ imaginär wird, hat nichts zu sagen, da der Koeffizient von $\exp(\varkappa_1 x)$ Null ist. Allerdings gehört dieser Zustand formal in das Zwischengebiet $-\omega<E<\omega$. Da für $b\neq 0$ gilt $u_1{}^1\neq 0$, entspricht dieser Fall keinem gebundenen Zustand mehr. Dies erklärt die Tatsache, daß für $a<-2\,\omega^{1/2}$ nur ein gebundener Zustand existiert.

Es erhebt sich die Frage, was geschieht, wenn sich das System für $b=0$, $a^2/4<\omega$, im Zustand $\varkappa_2=-a$ befindet, und wir das Wechselwirkungspotential einschalten. In diesem Fall erhalten wir aus Gl. (2.5)

$$E = E_{\mathrm{r}} - i\,\gamma; \qquad \gamma > 0$$

d. h. ein einfaches Beispiel eines Zerfallszustandes. Dabei ist $\mathrm{Re}\,\varkappa_1<0$, dieser Zustand liegt somit auf dem falschen, von uns ausgeschlossenen Energieblatt.

Im Falle $a^2>4\,\omega$ existieren für $b=0$ zwei verschiedene gebundene Zustände, dies entspricht der letzten Bedingung. Für $b^2-a^2>2\,a\,\omega^{1/2}$ verschwindet der eine der gebundenen Zustände. Wieder fragen wir, was geschieht, wenn sich das System für $b=0$ in diesem Zustand befindet, und wir das Wechselwirkungspotential über den kritischen Wert steigern: wieder erhalten wir einen auf dem falschen Energieblatt liegenden Zerfallszustand.

Streuzustände

Im Gebiet $E>\omega$ sind $\varkappa_1$ und $\varkappa_2$ imaginär. Mit der Einstrahlungsbedingung

$$u^1_- = \begin{pmatrix} \alpha^{1/2} \\ (1-\alpha)^{1/2} \end{pmatrix}, \qquad u^{\mathrm{r}}_+ = 0$$

läßt sich mit (2.3) die Lösung von (2.1) in folgender Form schreiben

$$\psi(x) = e^{-\varkappa x}\cdot u^1_- - e^{-\varkappa|x|}\cdot s; \qquad s = \begin{pmatrix} s_2 \\ s_1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{\nu}\,(\boldsymbol{\varkappa}-\boldsymbol{\nu})^{-1}\cdot u^1_- . \tag{2.7}$$

Für $\alpha=0$ befindet sich der Streukörper vor der Streuung im Zustand ω, für $\alpha=1$ im Zustand $-\omega$.

Aus (2.7) ergeben sich die Transmissionskoeffizienten D_1 bzw. D_2 und die Remissionskoeffizienten R_1 bzw. R_2 für die Kanäle ω bzw. $-\omega$ in folgender Form

$$D_1 = |(1-\alpha)^{1/2} + s_1|^2, \quad D_2 = |\alpha^{1/2} + s_2|^2; \quad R_1 = |s_1|^2, \quad R_2 = |s_2|^2. \tag{2.8}$$

Der Transmissionskoeffizient $D_1{}^1$ für den Fall, daß sich der Streukörper vor der Streuung im Zustand ω befand, lautet mit $\alpha=0$

$$D_1{}^1 = \frac{k_1{}^2\,k_2{}^2 + a^2\,k_1{}^2}{(a^2-b^2-k_1\,k_2)^2 + a^2\,(k_1+k_2)^2},$$

wobei $k_1 = i\,\varkappa_1$, $k_2 = i\,\varkappa_2$, $k_{1,2}>0$. Ähnliche Ausdrücke erhalten wir für die anderen Koeffizienten.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{\pm\omega}$ dafür, daß der Streukörper sich nach der Streuung im Energiezustand $\pm\,\omega$ befindet, sind gleich dem Verhältnis des Stromes im Kanal $\pm\,\omega$ zum anfänglichen Strom; es ist

$$p_{+\omega} = (D_2+R_2)\,\frac{k_2}{\alpha\,k_2 + (1-\alpha)\,k_1}, \quad p_{-\omega} = (D_1+R_1)\,\frac{k_1}{\alpha\,k_2 + (1-\alpha)\,k_2}. \tag{2.9}$$

Wir können die Übergangswahrscheinlichkeiten (2.9) auch mit Hilfe einer Transformationsmatrix $\mathbf{S}$ berechnen, die die Transformation des Zustandes u_i vor der Streuung in den Zustand u_f nach der Streuung beschreibt:

$$u_f = \mathbf{S}\cdot u_i; \quad u_f = \begin{pmatrix} k_2^{1/2}\cdot u^{\mathrm{r}}_{2+} \\ k_2^{1/2}\cdot u^1_{2-} \\ k_1^{1/2}\cdot u^{\mathrm{r}}_{1-} \\ k_1^{1/2}\cdot u^1_{1-} \end{pmatrix}, \quad u_i = \begin{pmatrix} k_2^{1/2}\cdot u^1_{2+} \\ k_2^{1/2}\cdot u^{\mathrm{r}}_{2+} \\ k_1^{1/2}\cdot u^1_{1+} \\ k_1^{1/2}\cdot u^{\mathrm{r}}_{1-} \end{pmatrix}. \tag{2.10}$$

Aus der Erhaltung des Stromes folgt mit Hilfe einer Normierung

$$(u_i^+, u_i) = (u_f^+, u_f) = 1\,. \tag{2.11}$$

Aus (2.3) ergibt sich

$$\mathbf{S} = \frac{1}{N}\begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix}, \tag{2.12}$$

$$\mathbf{S}_{11} = (i\,k_1 + a)\big(-\tfrac{1}{2}i(k_1+k_2) - \tfrac{1}{2}(k_1-k_2)\,\boldsymbol{\sigma}_3\big) + \big(a(i\,k_1+a) - b^2\big)\boldsymbol{\sigma}_1\,,$$

$$\mathbf{S}_{22} = (i\,k_2 + a)\big(-\tfrac{1}{2}i(k_1+k_2) + \tfrac{1}{2}(k_1-k_2)\,\boldsymbol{\sigma}_3\big) + \big(a(i\,k_2+a) - b^2\big)\boldsymbol{\sigma}_1\,,$$

$$\boldsymbol{S}_{12} = \boldsymbol{S}_{21} = -i\,b\,(k_1 k_2)^{1/2}\,(1+\boldsymbol{\sigma}_1),$$
$$N = b^2 - (i\,k_1 + a)\,(i\,k_2 + a)\,.$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich der Streukörper nach der Streuung im Zustand $\pm\omega$ befindet, ist gleich dem Erwartungswert der Eigenschaft $\boldsymbol{P}_{\pm\omega}$, daß der Streukörper nach der Streuung die Energie $\pm\omega$ besitzt. Für die Eigenschaft $\boldsymbol{P}_{\pm\omega}$ gilt

$$\boldsymbol{P}^2_{\pm\omega} = \boldsymbol{P}_{\pm\omega}\,; \quad \boldsymbol{P}^+_{\pm\omega} = \boldsymbol{P}_{\pm\omega}$$

$$\boldsymbol{P}_{+\omega}\,u_f = \begin{pmatrix} k_2^{1/2}\,u^{\mathrm{r}}_{2+} \\ k_2^{1/2}\,u^{\mathrm{l}}_{2-} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{P}_{-\omega}\,u_f = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k_1^{1/2}\,u^{\mathrm{r}}_{1+} \\ k_1^{1/2}\,u^{\mathrm{r}}_{1-} \end{pmatrix},$$

daher ist

$$\boldsymbol{P}_{+\omega} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{P}_{-\omega} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.13}$$

Der Erwartungswert von $\boldsymbol{P}_{\pm\omega}$ lautet dann

$$p_{\pm\omega} = (u_{\mathrm{f}}^+\,,\,\boldsymbol{P}_{\pm\omega}\,u_f) = (u_{\mathrm{i}}^+\,,\,\boldsymbol{S}^+\,\boldsymbol{P}_{\pm\omega}\,\boldsymbol{S}\,u_i)\,. \tag{2.14}$$

Dies läßt sich noch allgemeiner mit Hilfe des Zustandsoperators $\boldsymbol{W}_i$ in der Form

$$p_{\pm\omega} = \mathrm{Spur}\,(\boldsymbol{S}^+\,\boldsymbol{P}_{\pm\omega}\,\boldsymbol{S}\,\boldsymbol{W}_i) \tag{2.15}$$

schreiben. $\boldsymbol{W}_i$ ist definiert durch

$$\boldsymbol{W}_i = (u_i\,,\,u_{\mathrm{i}}^+)\,, \quad \mathrm{Spur}\,\boldsymbol{W}_i = 1\,. \tag{2.16}$$

Wir erhalten auf diese Weise wieder die Ausdrücke (2.9).

Mit Hilfe der Darstellung (2.16) können wir die Übergangswahrscheinlichkeiten für den Fall berechnen, daß sich der Streukörper vor der Streuung nicht in einem Quantenzustand befindet. Wir schreiben diesen Zustand in der Form

$$\boldsymbol{W}_i = \cos^2\vartheta\,\boldsymbol{W}_i^{+\omega} + \sin^2\vartheta\,\boldsymbol{W}_i^{-\omega}, \tag{2.17}$$

wobei $\boldsymbol{W}_i^{\pm\omega}$ der Zustandsoperator für den Fall ist, daß sich der Streukörper im Zustand $\pm\omega$ befindet. Mit (2.17) erhalten wir aus (2.16)

$$p_{\pm\omega} = \cos^2\vartheta\,p_{+\omega,\,\pm\omega} + \sin^2\vartheta\,p_{-\omega,\,\pm\omega}, \tag{2.18}$$

wobei $p_{\pm\omega,\pm\omega}$ die Übergangswahrscheinlichkeit dafür ist, daß sich der Streukörper nach der Streuung im Zustand $\pm\omega$ befindet, wenn er sich vor der Streuung im Zustand $\pm\omega$ befand.

Wir haben hier, ausgehend von der Eigenwertgleichung (2.1), den Fall eines statistischen Gemisches behandelt. Die Behandlung dieses Falles mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung wird uns zeigen, unter welcher Bedingung dies zulässig ist.

3. Das zeitabhängige Verfahren

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für unser Modell lautet nach (1.1)

$$\left(-\frac{1}{2}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \omega\,\boldsymbol{\sigma}_3 + \delta(x)\,(a + b\,\boldsymbol{\sigma}_1)\right)\psi(x,t) = i\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(x,t)\,; \tag{3.1}$$
$$\psi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}.$$

Dabei sei zur Zeit $t=0$ $\psi(x,0) = \psi_0(x)$ eine vorgegebene Funktion des Ortes (ein Wellenpaket).

Wir führen eine Laplace-Transformation bezüglich der Zeit durch

$$\psi(x,t) \to \hat{\psi}(x,s) = \int_0^\infty e^{-st}\,\psi(x,t)\,\mathrm{d}t \tag{3.2}$$

und erhalten aus (3.1)

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \boldsymbol{\varkappa}^2 - 2\,\delta(x)\cdot\boldsymbol{\nu}\right)\hat{\psi}(x,s) = 2\,i\,\psi_0(x)\,, \tag{3.3}$$

wobei

$$\boldsymbol{\varkappa} = \begin{pmatrix} (-2\,(i\,s-\omega))^{1/2} & 0 \\ 0 & (-2\,(i\,s+\omega))^{1/2} \end{pmatrix} \tag{3.4}$$
$$\boldsymbol{\nu} = a + b\,\boldsymbol{\sigma}_1\,.$$

Das Vorzeichen von $\boldsymbol{\varkappa}$ legen wir in der gleichen Weise wie früher fest: Wir setzen $\mathrm{Re}\,\boldsymbol{\varkappa} > 0$ bzw. $\mathrm{Im}\,\boldsymbol{\varkappa} < 0$ für $\mathrm{Re}\,\boldsymbol{\varkappa} = 0$.

Gleichung (3.3) lösen wir mit der Methode der Greenschen Funktion. Wir schreiben

$$\hat{\psi}(x,s) = i\int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{G}(x,x';s)\,\psi_0(x')\,\mathrm{d}x'. \tag{3.5}$$

Dabei ist $\boldsymbol{G}(x,x';s)$ als Funktion von x die Lösung der homogenen Gl. (3.3), die der Bedingung

$$\frac{\partial}{\partial x}\,\boldsymbol{G}(x,x';s)\big|_{x=x'-0} - \frac{\partial}{\partial x}\,\boldsymbol{G}(x,x';s)\big|_{x=x'+0} = 1 \tag{3.6}$$

genügt und quadratintegrabel ist. Die Lösung der Gl. (3.1) erhalten wir dann durch Laplace-Umkehr:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{st}\int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{G}(x,x';s)\,\psi_0(x')\,\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}s\,. \tag{3.7}$$

Es ergibt sich

$$\boldsymbol{G}(x,x';s) = e^{\overline{\boldsymbol{\varkappa}}x}\,\boldsymbol{A}_+(s)\,e^{\boldsymbol{\varkappa}x'} + e^{\overline{\boldsymbol{\varkappa}}x}\,\boldsymbol{A}_-(s)\,e^{-\boldsymbol{\varkappa}x'}, \tag{3.8}$$

wobei

$$\bar{\varkappa} = \begin{cases} \varkappa & \text{für} \quad x<0, \\ -\varkappa & \text{für} \quad x>0, \end{cases}$$

$$\boldsymbol{A}_{\pm}(s) = \begin{cases} \boldsymbol{A}^{\mathrm{d}}_{\pm}(s) & \text{für} \quad x>0, \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{r}}_{\pm}(s) & \text{für} \quad x<x'<0 \end{cases}$$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{d}}_{+}(s) = (-1+\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{\varkappa}+\boldsymbol{\nu})^{-1})\boldsymbol{\varkappa}^{-1}, \; \boldsymbol{A}^{\mathrm{d}}_{-}(s) = 0,$$
$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{r}}_{+}(s) = \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{\varkappa}+\boldsymbol{\nu})^{-1}\boldsymbol{\varkappa}^{-1}, \; \boldsymbol{A}^{\mathrm{r}}_{-}(s) = -\boldsymbol{\varkappa}^{-1}.$$

Die Greensche Funktion hat Pole, die durch die Gleichung

$$(a+\varkappa_1)(a+\varkappa_2) - b^2 = 0 \tag{3.9}$$

bestimmt sind. Die Pole der Greenschen Funktion sind die Eigenwerte der homogenen Gleichung (3.3). Diese entspricht der stationären Schrödinger-Gleichung (2.1); dort hatten wir aber gerade als Bedingungsgleichung für die Energien gebundener Zustände, d. h. für die diskreten Energieeigenwerte, die Gl. (2.5) gefunden, die mit Gl. (3.9) identisch ist.

Übergangswahrscheinlichkeiten

Wir gehen aus von einem Wellenpaket, das sich zur Zeit $t=0$ ganz auf der linken Seite der x-Achse annähernd an der Stelle $x_0<0$ befindet und annähernd die Geschwindigkeit k_0 besitzt, natürlich im Rahmen der Unschärferelationen. Dazu ist notwendig, daß $|\psi_0|^2$ ein einziges Maximum bei x_0 und $|\psi_0(k)|^2$ ein einziges Maximum bei k_0 hat, wobei $\psi_0(k)$ die Fourier-Transformierte von $\psi_0(x)$ ist. Wir machen für ψ_0 den Ansatz

$$\psi_0(x) = \varphi(x-x_0)\, e^{ik_0(x-x_0)}\, \chi_i, \tag{3.10}$$

wobei $\varphi(k)$ für reelle Werte von k nur ein einziges Maximum bei $k=0$ hat und χ_i den Zustand des Streukörpers vor der Streuung charakterisiert.

Mit (3.10) und (3.8) ergibt sich aus (3.7)

$$\psi_{\pm}(x,t) = \frac{i}{2\pi}\int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} \mathrm{d}s\, e^{\bar{\varkappa}x}\boldsymbol{A}_{\pm}(s) \cdot \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{\pm\varkappa x'}\varphi(x'-x_0)\, e^{ik_0(x'-x_0)}\mathrm{d}x'\, \chi_i. \tag{3.11}$$

Der Anteil $\psi_-(x,t)$ läßt sich vernachlässigen [2]. Weiter dürfen wir den Integrationsweg in die imaginäre Achse verschieben, da die Greensche Funktion keine Pole für $\mathrm{Re}\, s>0$ besitzt. Wir erhalten

$$\psi_+(x,t) = \psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-i\infty}^{i\infty} \mathrm{d}s\, \boldsymbol{B}(x,t;s)\, \chi_i, \tag{3.12}$$

wobei

$$\boldsymbol{B}(x,\mathrm{t};s) = e^{\bar{\varkappa}x}\boldsymbol{A}_+(s)\left(\tfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_3)\,\varphi(k_0-i\varkappa_2) + \tfrac{1}{2}(1-\boldsymbol{\sigma}_3)\,\varphi(k_0-i\varkappa_1)\right) e^{\varkappa x_0+st}.$$

Um die Transmissions- bzw. Remissionskoeffizienten D bzw. R zu erhalten, müssen wir die Absolutquadrate der jeweils in Frage kommenden Komponenten von $\psi(x,t)$ integrieren. Es sei χ_f der Zustand des Streukörpers nach der Streuung. Dann gilt

$$\begin{aligned} D_f^i &= \frac{1}{4\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left|\int\limits_{-i\infty}^{i\infty}\mathrm{d}s\,(\chi_f, \boldsymbol{B}^{\mathrm{d}}(x,t;s)\,\chi_i)\right|^2, \\ R_f^i &= \frac{1}{4\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left|\int\limits_{-i\infty}^{i\infty}\mathrm{d}s\,(\chi_f, \boldsymbol{B}^{\mathrm{r}}(x,t;s)\,\chi_i)\right|^2. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Es zeigt sich, daß die Koeffizienten D und R zeitunabhängig sind, was auch einleuchtet, da die Streuwahrscheinlichkeiten nicht mehr von der Zeit abhängen können, wenn das Wellenpaket einmal am Streukörper vorbeigelaufen ist. Unter dem Integral dürfen wir relativ zum Faktor $|B(\varkappa)|^2$ die Funktion $(1/2\pi)\,\varphi^2(k_0-i\varkappa)$ als δ-Funktion betrachten, wenn wir ihr Maximum scharf genug wählen. Wie weit diese Schärfe getrieben werden muß, hängt davon ab, wie der Faktor $|B(\varkappa)|^2$ in der Umgebung von $\varkappa=-i\,k_0$ von $\varkappa$ abhängt; eventuell muß eine große Ortsunschärfe des Wellenpaketes in Kauf genommen werden. Wir erhalten dann für die Transmissions- bzw. Remissionskoeffizienten wieder die Formeln (2.8). Die gesuchten Übergangswahrscheinlichkeiten lassen sich wieder aus den Formeln (2.9) bestimmen.

Wir betrachten noch ein Beispiel, das sich nur mit der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung behandeln läßt. Ein Teilchenstrom mit der Geschwindigkeit k_0 treffe auf den Streukörper, der sich im Zustand $+\omega$ befindet, es sei $k_0{}^2<2\,\omega$. Nach der Streuung des ersten Teilchens befindet sich der Streukörper mit der Wahrscheinlichkeit p im Zustand ω, mit der Wahrscheinlichkeit $1-p$ im Zustand $-\omega$. Im zweiten Fall kann der Streukörper durch das nächste Teilchen nicht wieder in den Zustand gehoben werden, da dazu die Energie des Teilchens nicht ausreicht. Nach der Streuung vieler Teilchen muß daher die Wahrscheinlichkeit, den Streukörper im Zustand $+\omega$ anzutreffen, verschwindend klein geworden sein. Behandelt man diesen Fall formal mit der stationären Schrödinger-Gleichung, so ergeben sich zeitunabhängige Übergangswahrscheinlichkeiten. Dies zeigt, daß in diesem Fall die Interpretation der ebenen Wellen als Teilchenstrom nicht mehr möglich ist.

Statistisches Gemisch von Ausgangszuständen

Der Streukörper befinde sich vor der Streuung nicht in einem Energieeigenzustand; wir beschreiben seinen Anfangszustand durch den Vektor

$$\chi_i = \begin{pmatrix} \cos\vartheta \; e^{-i\beta/2} \\ \sin\vartheta \; e^{-i\beta/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \tag{3.14}$$

wobei β die Phase des Streukörpers zur Zeit $t=0$ ist. Im folgenden beschränken wir uns auf die Berechnung der Wellenpakete, die in den Kanal $+\omega$ fließen und betrachten nur die durchgelaufenen Komponenten, d. h. den Teil, der sich auf der positiven x-Achse nach rechts bewegt. Aus Gl. (3.12) ergibt sich dann mit $\boldsymbol{A}^{\mathrm{d}}(s) = (a_{ik})$

$$\int |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi} \int \mathrm{d}\tau \, \tau^2 \, | a \, a_{11}(\tau) \, e^{i\tau x_0} \varphi(k_0 - \tau) + b \, a_{12}(\tau) \exp\{-i(\tau^2 - 4\,\omega)^{1/2} x_0\} \cdot \varphi(k_0 - (\tau^2 + 4\,\omega)^{1/2}) \, |^2. \tag{3.15}$$

Es sei Δk_0 die Unschärfe des Impulses des einlaufenden Wellenpaketes und

$$\Delta k = k_0 - (k_0^2 - 4\,\omega)^{1/2} \tag{3.16}$$

der Impulsunterschied der beiden in den Kanal $+\omega$ auslaufenden Wellenpakete. Im Falle

$$\Delta k \ll \Delta k_0 \tag{3.17}$$

erhalten wir aus (3.15)

$$\int |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = \cos^2\vartheta \, D_2^2 + \sin^2\vartheta \, D_2^1 + \sin 2\vartheta \, \mathrm{Re} \, k_0^2 \, a_{11} \, a_{12}^* e^{i(\Delta k_0 \cdot x_0 - \beta)} \, . \tag{3.18}$$

In diesem Fall hängt die Streuwahrscheinlichkeit über einen Interferenzterm von den Phasen von Wellenpaket und Streukörper vor der Streuung ab.

Im Falle

$$\Delta k \gg \Delta k_0 , \tag{3.19}$$

d. h. wenn die auslaufenden Wellenpakete im Impulsraum nicht überlappen, folgt aus (3.15)

$$\int |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = \cos^2\vartheta \, D_2^2 + \sin^2\vartheta \, D_2^1. \tag{3.20}$$

Die Streuwahrscheinlichkeit ist somit nicht von x_0 und β abhängig.

Wir können (3.19) auch in der Form

$$\Delta k \gg 1/\Delta x_0 \quad \text{oder} \quad \Delta k \gg 1/k_0 \cdot \Delta t \tag{3.21}$$

schreiben, wobei Δx_0 die Breite des Wellenpaketes im Ortsraum und Δt die Dauer des Streuprozesses ist. Für $k_0^2 \gg 4\,\omega$ folgt aus (3.16) $\Delta k \approx 2\,\omega/k_0$, somit folgt aus (3.21)

$$\Delta E \cdot \Delta t \gg 1 \, . \tag{3.22}$$

Dabei ist ΔE die Differenz der Energien der beiden Zustände des Streukörpers. Aus (3.21) bzw. (3.22) ersehen wir, daß die Voraussetzung (3.19) gleichbedeutend ist mit der Voraussetzung, daß die Streuung lang genug dauert. Es leuchtet ein, daß in diesem Falle die Phasen von einfallenden Teilchen und Streukörper vor der Streuung keine Rolle mehr spielen.

Formel (3.20) entspricht dem Ergebnis (2.18), das wir bei der stationären Behandlung des statistischen Gemisches erhalten hatten. Im Hinblick auf [1, 3] läßt sich verallgemeinernd sagen, daß die Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten im Falle von statistischen Gemischen mit Hilfe der stationären Schrödinger-Gleichung äquivalent ist der Vernachlässigung der Terme, die von den Phasen von streuenden und gestreuten Teilchen abhängen. Im Rahmen unseres Modelles ist dies unter der Bedingung (3.19) bzw. (3.22) erlaubt.

Die Anwendung dieser Ergebnisse auf die in der Einleitung erwähnte Wignersche Frage möchten wir einer späteren Arbeit vorbehalten.