Moderne Theoretische Physik III (TP)

Vorlesung 2

Kirill Melnikov
TTP KIT
April 23, 2024

2 Greensche Funktion und Bornsche Reihe

Generel, es ist sehr schwierig Streuamplituden und Wirkungsquerschnitte weil da brauchen wir die Schrödinger Gleichung zu lösen. Eine Möglichkeit das zu tun ergibt sich durch die Verwendung von Störungstheorie. Um die Störungstheorie systematisch zu entwickeln, brauchen wir einen Parameter der klein ist. In unserem Fall wollen wir das Potential $V(r)$ als "klein" betrachten. Was das genau bedeutet, werden wir später definieren.

Die Schrödingergleichung lautet

$$H\psi = E\psi, \quad H = H_0 + V(r), \quad H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (2.1)$$

Wir führen die Greensche Funktion durch die Operatorgleichung

$$(H_0 - E)G_E = 1, \quad (2.2)$$

ein. In Ortsdarstellung lautet diese Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2 \vec{\partial}^2}{2m} - E \right] G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.3)$$

Falls wir die Greensche Funktion kennen, können wir die Schrödingergleichung formal lösen. Wir schreiben

$$\begin{aligned} H\psi = E\psi &\Rightarrow (H_0 - E)\psi = -V\psi, \\ \left[-\frac{\hbar^2 \vec{\partial}^2}{2m} - E \right] \psi(\vec{r}) &= -V(\vec{r})\psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dann

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) - \int d^3\vec{r}' G_E(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi(\vec{r}'), \quad (2.5)$$

wobei $\psi_0(\vec{r})$ die Gleichung

$$(H_0 - E)\psi_0 = 0, \quad (2.6)$$

erfüllt.

Wir berechnen jetzt die Greensche Funktion. Wir schreiben die Greensche Funktion und die δ -Funktion in Gl. (2.3) im Impulsraum und erhalten

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{d^3\vec{l}}{(2\pi)^3} \frac{1}{l^2 - k^2} e^{i\vec{l}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}, \quad (2.7)$$

wobei $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ist.

Wir betrachten die Integration über l und stellen fest dass das Integral nicht existiert, weil auf der reellen Achse zwei Pole jeweils bei $l = \pm k$ liegen. Um das Integral vollständig zu definieren, müssen wir die Pole in die komplexe Ebene verschieben

$$l^2 - k^2 = (l - k)(l + k) \Rightarrow (l - k \pm i0)(l + k \pm i0). \quad (2.8)$$

Der letzte Schritt zeigt, dass es mehrere (vier) Möglichkeiten gibt, um dies zu erreichen. Um festzustellen, was wir aber genau machen müssen, untersuchen wir, zu welchem Ergebnis die verschiedenen Möglichkeiten führen. Wir fangen an, indem wir Gl. (2.7) über den Winkel von Vektor $\vec{l}$ integrieren. Wir erhalten

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{l^2 dl}{(2\pi)^2 (l^2 - k^2)} \frac{1}{i l |\vec{r} - \vec{r}'|} (e^{i l |\vec{r} - \vec{r}'|} - e^{-i l |\vec{r} - \vec{r}'|}). \quad (2.9)$$

Der Integrand ist eine gerade Funktion von l ; deswegen können wir die Integration auf die ganze reelle Achse erweitern

$$\int_0^\infty dl \rightarrow \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dl. \quad (2.10)$$

Nach der Erweiterung berechnen wir die Integrale über l , indem wir die Integrationskonturen in der komplexen Ebene entweder nach oben (falls wir e^{ilr} integrieren) oder nach unten (falls wir e^{-ilr} integrieren) schließen. Falls die Pole in Gl. (??) so verschoben sind, dass sie immer zum Integral beitragen, produzieren sie folgende Wellen

$$\begin{aligned} e^{ilr} : \quad l = k + i0 &\rightarrow e^{ikr}, & e^{ilr} : \quad l = -k + i0 &\rightarrow e^{-ikr}, \\ e^{-ilr} : \quad l = k - i0 &\rightarrow e^{-ikr}, & e^{-ilr} : \quad l = -k - i0 &\rightarrow e^{ikr}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Weil wir für die Beschreibung der Streuung auslaufender Kugelwellen e^{ikr} brauchen, müssen wir $k \rightarrow k + i0$ und $-k \rightarrow -k - i0$ analytisch fortsetzen. D.h.

$$\frac{1}{l^2 - k^2} \rightarrow \frac{1}{(l - k - i0)(l + k + i0)}. \quad (2.12)$$

Es ist einfach zu sehen, dass die obige Gleichung für $k > 0$ zu

$$\frac{1}{l^2 - k^2} \rightarrow \frac{1}{l^2 - k^2 - i0}, \quad (2.13)$$

äquivalent ist. Wir benutzen diesen Ausdruck, um die Greensche Funktion für das Streuproblem aus Gl. (2.7) wie folgt zu schreiben

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{d^3\vec{l}}{(2\pi)^3} \frac{1}{l^2 - k^2 - i0} e^{i\vec{l}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}. \quad (2.14)$$

In dieser Form ist die Greensche Funktion, die wir für Streuprobleme verwenden sollen, vollständig definiert.

Wir verwenden den Satz von Cauchy und erhalten

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}, \quad (2.15)$$

als die Greensche Funktion.

Wir wollen jetzt dieses Ergebnis mit Gl. (2.5) kombinieren, um die Streuamplitude zu berechnen. Dazu brauchen wir die Greensche Funktion für $r \gg r'$. Dann

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}', \quad (2.16)$$

sodass

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}'), \quad (2.17)$$

wobei $\vec{k}' = k \vec{r}/r$ ist. In Gl. (2.17) haben wir $\psi_0(\vec{r})$ mit einlaufender Welle e^{ikz} identifiziert.

Wir vergleichen Gl. (2.17) mit der Asymptotik der Wellenfunktion in Streuprozessen $\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + f(\theta)/r e^{ikr}$ und erhalten

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}'). \quad (2.18)$$

Dieser Ausdruck ist exakt, aber noch nicht praktisch, weil wir die exakte Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ brauchen um $f(\theta)$ zu berechnen. Die gute Nachricht ist, dass wir $V(\vec{r})$ auf der rechten Seite haben, sodass wir sehen dass $f(\theta) \sim V$ ist. Dann, falls $V(\vec{r})$ klein ist, können wir die Funktion $\psi(\vec{r})$ und die Phase $f(\theta)$ in Störungstheorie berechnen.

Der erste Schritt in die Richtung von Störungstheorie ist $\psi(\vec{r})$ auf der rechten Seite in Gl. (2.18) mit einlaufender Welle e^{ikz} zu ersetzen. Der

Grund dafür ist Gl. (2.5); aus dieser Gleichung folgt dass $\psi(\vec{r}) \approx \psi_0(\vec{r})$ ist falls $V(\vec{r})$ klein ist. Dann $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ wobei $\vec{k} = k\vec{e}_z$ ist. Wir erhalten

$$f_B(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}), \quad (2.19)$$

wobei

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad (2.20)$$

ist; der Streuwinkel θ ist der Winkel zwischen $\vec{k}'$ und $\vec{k}$.

Gleichung (2.19) nennt man *die Streuamplitude in Bornscher Näherung*. Beachten Sie, dass die Streuamplitude in der Bornschen Näherung proportional zur Fourierkomponente des Potentials ist; von daher kommt auch die Möglichkeit das Potential aus der Messung der Streutamplitude zu bestimmen.

Gleichung (2.19) ist der führende Term in der Entwicklung der Streuamplitude in Potenzen von $V(\vec{r})$. Wir können aber auch die gesamte Störungsreihe für $f_B(\theta)$ konstruieren. Um das zu erreichen, schreiben wir die Lösung der Schrödingergleichung Gl. (2.5) in darstellung-unabhängiger Form

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{1}{H_0 - E} \hat{V} |\psi\rangle, \quad (2.21)$$

Diese Gleichung können wir formal für $|\psi\rangle$ lösen. Wir erhalten

$$|\psi\rangle = \frac{1}{1 + \frac{1}{H_0 - E} \hat{V}} |\psi_0\rangle. \quad (2.22)$$

Dieser Ausdruck können wir systematisch in V entwickeln. Wir erhalten

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{1}{H_0 - E} \hat{V} |\psi_0\rangle + \frac{1}{H_0 - E} \hat{V} \frac{1}{H_0 - E} \hat{V} |\psi_0\rangle + \dots \quad (2.23)$$

Wir schreiben diese Reihe in der Ortsdarstellung um. Wir brauchen dafür die Vollständigkeitsbedingung

$$1 = \int d^3\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|, \quad (2.24)$$

und die folgende Matrixelemente

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle, \quad \langle \vec{r} | \frac{1}{H_0 - E} | \vec{r}' \rangle = G_E(\vec{r}, \vec{r}'), \quad \langle \vec{r} | V | \vec{r}' \rangle = V(\vec{r}) \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}). \quad (2.25)$$

Wir erhalten dann

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) = & \psi_0(\vec{r}) - \int d^3\vec{r}' G_E(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_0(\vec{r}') \\ & + \int d^3\vec{r}' d^3\vec{r}'' G_E(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') G_E(\vec{r}', \vec{r}'') V(\vec{r}'') \psi_0(\vec{r}'') + \dots \end{aligned} \quad (2.26)$$

Wir wollen auf dieser Stelle diskutieren wann die Störungstheorie verwendbar ist. Die Voraussetzung der Verwendung der Störungstheorie ist klar – die Korrekturen zur einlaufenden Welle sollen für alle $\vec{r}$ klein sein. D.h.

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \frac{V(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{ikz'} \right| \ll |e^{ikz}| \quad (2.27)$$

Wir wollen wissen unter welcher Bedingugen obige Ungleichung gilt. Dementsprechend, sollen wir das Integral auf der linken Seite der Gl. (2.27) abschätzen.

Wir stellen uns vor, dass $V(\vec{r}) \sim V_0\theta(r - a)$ (d.h. wir charakterisieren das Potential mit dem gemittelten Wert und der Reichweite). Dann sind $|\vec{r} - \vec{r}'| \sim a$, $d^3r' \sim 4\pi a^3$ und $|e^{ikr}| = 1$. Wir bekommen dann

$$\frac{4\pi m V_0 a^3}{2\pi\hbar^2 a^2} \sim \frac{2ma^2}{\hbar^2} V \sim \frac{V}{\Delta E_{\text{kin}}} \ll 1, \quad (2.28)$$

wobei ΔE_{kin} die Unschärfe der kinetischen Energie des Teilchens ist, welche durch die Lokalisierung im Raumgebiet der Größe a entstanden ist. Falls die Unschärfe größer als V ist, kann man die Störungstheorie verwenden.

Die obige Einschätzung muss modifiziert werden, falls die Energie groß wird. Aus Gl. (2.27) sehen wir dass für große k die Integration über z' nur bis $1/k$ beiträgt; für $z' > 1/k$ mitteln sich die Oszillationen der e-Funktion $e^{ikz'}$ in Gl. (2.27) zu Null. Um diese Begrenzung von z' -Integration in Betracht zu nehmen, sollen wir die rechte Seite in Gl.(2.28) mit $1/ka$ multiplizieren. Wir erhalten dann

$$\frac{4\pi m V_0 a^3}{2\pi\hbar^2 a^2 (ka)} \sim \frac{2ma^2}{\hbar^2 ka} V \sim \frac{1}{ka} \frac{V}{\Delta E_{\text{kin}}} \ll 1, \quad ka \gg 1. \quad (2.29)$$

Es folgt aus obige Gleichung dass bei größere Energien die Verwendbarkeit der Störungstheorie sich verbessert.

Wir gehen zurück zu Bornscher Näherung und betrachten, als Beispiel, die Streuung an zwei Streuzentren

$$V(\vec{r}) = V_0 [\delta(\vec{r}) - \delta(\vec{r} - \vec{a})]. \quad (2.30)$$

Das relative Vorzeichen entspricht die Situation, bei der ein Zentrum anziehend und das andere Zentrum abstoßend ist. Um die Berechnungen einfacher zu machen, nehmen wir an, dass $\vec{a}$ entlang der z-Achse gewählt ist, also parallel zum einlaufenden Impuls $\vec{k}$. Wir erhalten in der Bornschen Näherung

$$\begin{aligned} f_B(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) \\ &= -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} [\delta(\vec{r}) + \delta(\vec{r} - \vec{a})] = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} (1 - e^{-i\vec{q}\cdot\vec{a}}). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Der Wirkungsquerschnitt ist dann

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mV_0}{\pi\hbar^2} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{a}}{2} \right) = \left(\frac{mV_0}{\pi\hbar^2} \right)^2 \sin^2 \left(ka \sin^2 \frac{\theta}{2} \right). \quad (2.32)$$

Für den letzten Schritt haben wir benutzt

$$\vec{q} \cdot \vec{a} = (\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{a} = -ka(1 - \cos\theta) = -2ka \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (2.33)$$

wobei θ der Streuwinkel ist.

Es ist interessant, verschiedene Grenzwerte des Wirkungsquerschnitts zu untersuchen. Für den Vorwärtslimes $\theta \rightarrow 0$, ist der Wirkungsquerschnitt sehr klein

$$\frac{d\sigma}{d\cos\theta} \sim \theta^4. \quad (2.34)$$

Bei niedrigen Energien $k \rightarrow 0$ ist der Wirkungsquerschnitt auch sehr klein

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim (ka)^2. \quad (2.35)$$

Bei großen Energien $ka \gg 1$, hat der Wirkungsquerschnitt ein Interferenzmuster – es gibt viele Maxima und Minima, z.B.

$$d\sigma = 0, \quad \Rightarrow \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{\pi n}{2ka}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (2.36)$$