Vorlesung 12

Greensche Funktion und Bornsche Reihe

Eine Möglichkeit, den Wirkungsquerschnitt zu berechnen, 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 als "klein" betrachten. Was das genau bedeutet, werden wir später sehen.

Die Schrödingergleichung lautet

$$H\psi = E\psi, \quad H = H_0 + V(r), \quad H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \tag{1}$$

Wir führen die Greensche Funktion durch die Operatorgleichung

$$(H_0 - E)G_E = 1 \tag{2}$$

ein. In Ortsdarstellung lautet diese Gleichung

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

Falls wir die Greensche Funktion kennen, können wir die Schrödingergleichung formal "lösen"

$$\begin{aligned} &H\psi = E\psi \quad \Rightarrow \quad (H_0 - E)\psi = -V\psi, \\ &\left[-\frac{\hbar^2\vec{\partial}^2}{2m} - E\right]\psi(\vec{r}) = -V(\vec{r})\psi(\vec{r}), \\ &\Rightarrow \psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) - \int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\; G_E(\vec{r},\vec{r}\,')V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,'), \end{aligned} \tag{4}$$

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

$$(H_0 - E)\psi_0 = 0 \tag{5}$$

erfüllt.

Wir berechnen jetzt die Greensche Funktion. Wir schreiben die Greensche Funktion und die δ-Funktion in Gl. (3) im Impulsraum und bekommen

$$G_E(\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{2m}{\hbar^2}\int \frac{\mathrm{d}^3\vec{l}}{(2\pi)^3}\frac{1}{l^2 - \frac{2mE}{\hbar^2}}\; e^{i\vec{l}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}. \tag{6}$$

Wir betrachten die Integration über l und stellen fest dass das Integral nicht existiert, weil auf der reellen Achse zwei Pole jeweils bei $l = \pm k = \pm\sqrt{2mE/\hbar^2}$ liegen. Um das Integral vollständig zu definieren, müssen wir die Pole in der komplexen Ebene verschieben

$$l^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} = l^2 - k^2 = (l-k)(l+k) \Rightarrow (l - k \pm i0)(l + k \pm i0). \tag{7}$$

Der letzte Schritt zeigt, dass es mehrere 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. (6) über den Winkel von $\vec{l}$ integrieren. Wir erhalten

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{l^2 \mathrm{d}l}{(2\pi)^2(l^2 - k^2)} \frac{1}{il|\vec{r} - \vec{r}'|} \left(e^{il|\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{-il|\vec{r}-\vec{r}'|} \right). \tag{8}$$

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

$$\int_0^\infty \mathrm{d}l \to \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}l. \tag{9}$$

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. (7) so verschoben sind, dass sie immer zum Integral beitragen, produzieren sie folgende Wellen

$$\begin{aligned} e^{ilr} &: \quad l = k + i0 \to e^{ikr}, & e^{ilr} &: \quad l = -k + i0 \to e^{-ikr}, \\ e^{-ilr} &: \quad l = k - i0 \to e^{-ikr}, & e^{-ilr} &: \quad l = -k - i0 \to e^{ikr}. \end{aligned} \tag{10}$$

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

$$\frac{1}{l^2 - k^2} \to \frac{1}{(l - k - i0)(l + k + i0)}. \tag{11}$$

Es ist einfach zu sehen, dass die obige Gleichung zu

$$\frac{1}{l^2 - k^2} \to \frac{1}{l^2 - k^2 - i0} \tag{12}$$

äquivalent ist. Wir benutzen diesen Ausdruck, um die Greensche Funktion für das Streuproblem aus Gl. (6) wie folgt zu schreiben

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} - i0} \, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}. \tag{13}$$

In dieser Form ist die Greensche Funktion vollständig definiert.

Wir verwenden den Satz von Cauchy und erhalten

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \tag{14}$$

als die Greensche Funktion.

Wir wollen jetzt dieses Ergebnis mit Gl. (4) kombinieren, um die Streuamplitude zu berechnen. Dazu brauchen wir die Greensche Funktion für $r \gg r'$. Dann

$$\lim_{r\to\infty} |\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}', \tag{15}$$

sodass

$$\lim_{r\to\infty} \psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \mathrm{d}^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} V(\vec{r}')\psi(\vec{r}'), \tag{16}$$

wobei $\vec{k}' = k\ \vec{r}/r$ ist. Wir vergleichen dieses Ergebnis mit der Asymptotik der Wellenfunktion in Streuprozessen $\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + f(\theta)/r\ e^{ikr}$ und bekommen

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}')\psi(\vec{r}'). \tag{17}$$

Dieses Ergebnis ist exakt, aber noch nicht praktisch, weil wir die exakte Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ brauchen. Die gute Nachricht ist, dass wir $V(\vec{r})$ auf der rechten Seite haben, sodass wir sehen dass $f(\theta) \sim V$ ist.

Falls $V(\vec{r})$ klein ist, können wir die Funktion $\psi(\vec{r})$ auf der rechten Seite in Gl. (17) als ebene Welle beschreiben (d.h. wir lösen die Schrödingergleichung in der Näherung, dass $V(\vec{r})$ Null ist). Dann ist $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ wobei $\vec{k} = k\vec{e}_z$ ist. Wir erhalten

$$f_B(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}^3\vec{r}\ e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}), \tag{18}$$

wobei

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \tag{19}$$

ist. Die Gl. (18) nennt man die Streuamplitude in Bornscher Näherung. Beachten Sie, dass die Streuamplitude in der Bornschen Näherung proportional zur Fourierkomponente des Potentials ist. Es ist auch wichtig zu verstehen, dass wir die Potentiale oft nicht kennen; die Streuamplituden können wir aber messen; falls wir das machen, können wir aus den Streuamplituden das Potential rekonstruieren.

Die Gl. (18) 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. Die Lösung der Schrödinger Gleichung können wir wie folgt umschreiben

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\psi_0\rangle - \frac{1}{H_0 - E} \hat{V} |\psi\rangle, \\ |\psi\rangle &= \frac{1}{1 + \frac{1}{H_0 - E} V} |\psi_0\rangle. \end{aligned} \tag{20}$$

Die letzte Gleichung können wir dann in V entwickeln. Wir erhalten

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{1}{H_0 - E} \hat{V} |\psi_0\rangle + \frac{1}{H_0 - E} \hat{V}\ \frac{1}{H_0 - E} \hat{V} |\ \psi_0\rangle + \dots\ . \tag{21}$$

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

$$1 = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|, \tag{22}$$

und die folgende Matrixelemente

$$\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle, \qquad \langle\vec{r}|\frac{1}{H_0 - E}|\vec{r}'\rangle = G_E(\vec{r},\vec{r}'), \qquad \langle\vec{r}|V|\vec{r}'\rangle = V(\vec{r})\delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}), \tag{23}$$

sodass wir bekommen

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_0) - \int \mathrm{d}^3\vec{r}'\, G_E(\vec{r},\vec{r}')V(\vec{r}')\psi_0(\vec{r}') \\ + \int \mathrm{d}^3\vec{r}'\mathrm{d}^3\vec{r}''\, G_E(\vec{r},\vec{r}')V(\vec{r}')G_E(\vec{r}',\vec{r}'')V(\vec{r}'')\psi_0(\vec{r}'') + ... \end{aligned} \tag{24}$$

Es sollte jetzt klar sein, wie man den allgemeinen Term für diese Reihe schreiben kann.

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

$$V(\vec{r}) = V_0\left[\delta(\vec{r}) - \delta(\vec{r} - \vec{a})\right]. \tag{25}$$

Das relative Vorzeichen entspricht der 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

$$\begin{aligned} f_B(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}V(\vec{r}) \\ &= -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\left[\delta(\vec{r}) + \delta(\vec{r} - \vec{a})\right] = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\left(1 - e^{-i\vec{q}\cdot\vec{a}}\right). \end{aligned} \tag{26}$$

Der Wirkungsquerschnitt ist dann

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{mV_0}{\pi\hbar^2}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}}{2}\right) = \left(\frac{mV_0}{\pi\hbar^2}\right)^2 \sin^2\left(ka\ \sin^2\frac{\theta}{2}\right). \tag{27}$$

Für den letzten Schritt haben wir benutzt

$$\vec{q}\cdot\vec{a} = (\vec{k}' - \vec{k})\cdot\vec{a} = -ka(1 - \cos\theta) = -2\ ka\ \sin^2\frac{\theta}{2}, \tag{28}$$

wobei θ der Streuwinkel ist.

Es ist interessant, verschiedene Grenzwerte zu untersuchen. Für den Vorwärtslimes $\theta \to 0$, ist der Wirkungsquerschnitt Null, da er sich verhält wie

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\cos\theta} \sim \theta^4. \tag{29}$$

Bei niedrigen Energien $k \to 0$ ist der Wirkungsquerschnitt auch Null

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \sim (ka)^2. \tag{30}$$

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

$$\mathrm{d}\sigma = 0, \quad \Rightarrow \sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{\pi n}{2ka}, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{31}$$

Als nächstes Thema wollen wir diskutieren, wann die Bornsche Näherung verwendbar ist. Um die Bornsche Näherung zu verwenden, ist Voraussetzung, dass die Korrekturen zur einlaufenden Welle überall klein sein sollen. D.h.

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}^3\vec{r}' \, \frac{V(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \, e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{ikz'} \right| \ll |e^{ikz}| \tag{32}$$

Wir wollen dieses Integral 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 $|\vec{r}-\vec{r}'| \sim a$, $\mathrm{d}^3r' \sim 4\pi a^3$ und $|e^{ikr}| = 1$. Wir bekommen dann

$$\frac{4\pi V_0 a^3}{2\pi\hbar^2 a^2} \sim \frac{2ma^2}{\hbar^2} V \sim \frac{V}{\delta E_{\mathrm{kin}}} \ll 1, \tag{33}$$

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 Bornsche Näherung verwenden.

Die obige Einschätzung muss modifiziert werden, falls die Energie groß wird. Aus Gl. (28) sehen wir, dass für

$$ka(1-\cos\theta) \gtrsim 1 \tag{34}$$

die Oszillationen des Exponentials in Gl. (26) sich zu null mitteln. Außerhalb eines Kegels mit Winkel $\theta \sim \frac{1}{\sqrt{ka}}$ wird der Integrand unterdrückt, sodass die Abschätzung zusätzlich mit einem Faktor $1/(ka)$ multipliziert wird

$$\frac{4\pi V_0 a^3}{2\pi\hbar^2 a^2 (ka)} \sim \frac{2ma^2}{\hbar^2 ka} V \sim \frac{1}{ka}\,\frac{V}{\delta E_{\mathrm{kin}}} \ll 1, \quad ka \gg 1. \tag{35}$$

Wir sehen dann, dass falls die Energie $E \sim k^2$ größer wird, sich die Qualität der Bornschen Näherung verbessert.