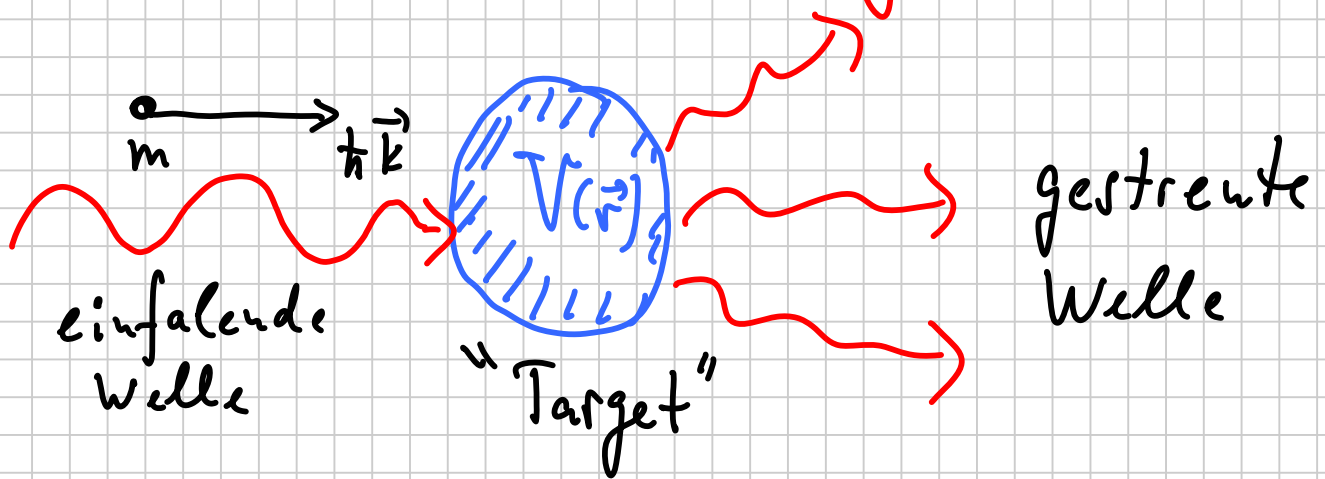


7. Potentialstreuung



$h\nu \rightarrow$ Kristallgitter

$h\nu \rightarrow e$

$e \rightarrow$ Kristall

$h\nu \rightarrow$ Moleküle

Teilchen $\rightarrow$ Teilchen

- "Laue - Streuung"

- "Compton - Streuung"

- "LEED"

- "Raman - Streuung"

$\rightarrow$ DESY, CERN...

Mikroskopische Objekte - Teilchen - werden quantenmechanisch beschrieben

"Target" $\rightarrow$ Potential $V(\vec{r})$ - "elastische - (Energie = const) - Streuung"

Beispiel: 1d



"Kurzreichweitiger" Potential:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |\vec{r}| V(\vec{r}) = 0$$

7.1 Lippmann-Schwinger-Gleichung

Eigenzustände des Hamilton-Operators:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + E_K \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Der Wellenvektor $\vec{k}$ ist ein Parameter und beschreibt die Richtung der einfallenden Welle und

die Energie:

$$0 < E_K = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

gebundene Zustände zu $E < 0$, tragen für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ nicht bei!

Streulösung: $\psi_K(\vec{r})$

mit Hilfe einer Greenfunktion! $G_0 (V=0)$

$$V_0=0 \rightarrow \hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} \rightarrow \left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + E \right) \psi_0(\vec{r}) = 0$$

GF des freien Teilchen:

def:
$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 + E \right) G_0(\vec{r}-\vec{r}', E) = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

Dann betrachten wir $V\psi$ als Quellenterm:

$$\psi_K(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \int d^3r' G_0(\vec{r}-\vec{r}', E_K) V(\vec{r}') \psi_K(\vec{r}')$$

Lippmann-Schwinger Gl.

a) $\psi_k(\vec{r})$ - erfüllt die Schrödinger-Gleichung:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 + E_k\right) \psi_k(\vec{r}) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + E_k\right) \psi_0(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2 + E_k\right) G_0(\vec{r}-\vec{r}', E_k)}_{\delta(\vec{r}-\vec{r}')} V(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}') = V(\vec{r}) \psi_k(\vec{r})$$

b) Berechnung der Green-Funktion

darstellungsfrei:

$$(\hat{H}_0 - E) \hat{G}_0(E) = -\hat{1} \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2$$

$\hat{G}_0(E)$ - Operator zu $G_0(\vec{r}-\vec{r}', E)$

"Resolvente": $E^+ = E + i\delta \equiv z$ ($\delta \rightarrow 0$)

$$\hat{G}_0(E^+) = \frac{\hat{1}}{E + i\delta - \hat{H}_0}$$

Spektraldarstellung: $\hat{H}_0 |\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\vec{k}\rangle$

$$\hat{1} = \sum_{\vec{k}} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|$$

$$\hat{G}_0(z) = \sum_{\vec{k}} \frac{|\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|}{z - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

$$\langle \vec{k} | \hat{G}_0(z) | \vec{k}' \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1}{z - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

Ortsdarstellung:

$$\langle \vec{r} | \hat{G}_0(z) | \vec{r}' \rangle = G_0(\vec{r} - \vec{r}', z)$$

Green-Funktion:

$$\sum_{\vec{k}} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|$$

$$G_0(\vec{r}-\vec{r}', E) = \langle \vec{r} | \frac{\hat{1}}{E - \frac{\hat{p}^2}{2m}} | \vec{r}' \rangle =$$

$$= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 dk \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{e^{i k |\vec{r}-\vec{r}'| \cos\theta}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} =$$

"aus" "in"

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty k dk \frac{1}{i k |\vec{r}-\vec{r}'|} \frac{e^{i k |\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{-i k |\vec{r}-\vec{r}'|}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} =$$

hier
"aus"

$$\frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 i |\vec{r}-\vec{r}'|} \int_0^\infty k dk \frac{e^{i k |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k_0^2 - k^2}$$

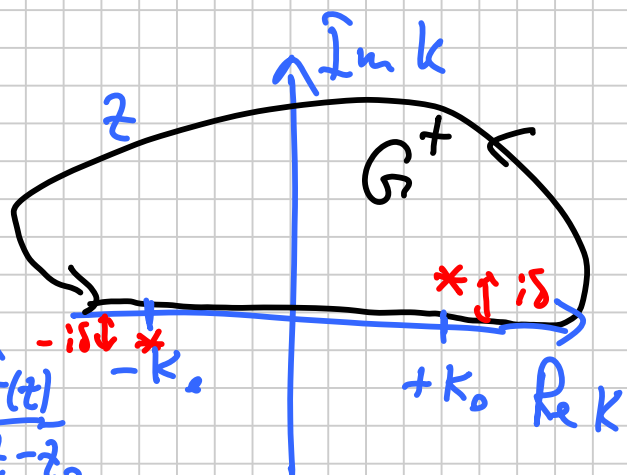
mit

Polstellen: $k^2 = k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Residuensatz: $f(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint dz \frac{f(z)}{z-z_0}$

$$-\frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 i} \int_0^\infty \frac{k e^{i k r}}{(k-k_0)(k+k_0)} dk = -\frac{m k_0}{2\pi \hbar^2 i r} \frac{e^{i k_0 r}}{2 k_0} \cdot 2\pi i$$

pic.



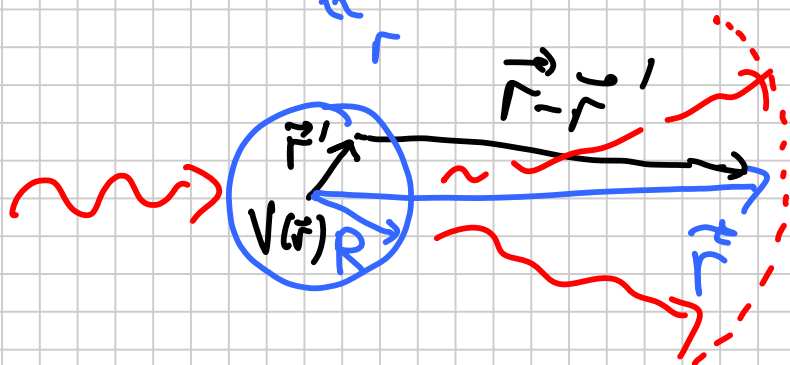
$$G_0(\vec{r}-\vec{r}', E_k) = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{i k |\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\psi_0} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}')$$

Abstände:

$$|\vec{r}-\vec{r}'| \gg |\vec{r}'| \sim R$$



Näherung:

$$k|\vec{r}-\vec{r}'| = k\sqrt{\vec{r}^2 + \vec{r}'^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}'} \approx kr - k\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{r}' \equiv kr - \vec{k}'\cdot\vec{r}'$$

mit: $\vec{k}' = \frac{\vec{r}}{r}\vec{k}$

Daher gilt für $|\vec{r}| \gg R$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}, \vec{k}')$$

mit:

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}')$$

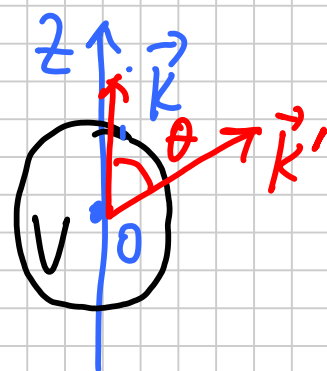
- Streuamplitude

7.2 Partialwellen Entwicklung

$$V = V(|\vec{r}|)$$

das Streupotential $\rightarrow$ ein Zentralpotential

Annahme: $\vec{k} \parallel \vec{e}_z$



Dann: $f(\vec{k}, \vec{k}')$ - eine Funktion nur von $\theta = \angle(\vec{k}, \vec{k}')$

die Entwicklung einer ebenen Welle nach Kugelfunktionen. ¹¹⁵

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\Omega_{\vec{k}}) Y_{lm}(\Omega_{\vec{r}})$$

$\uparrow$
 θ, φ

Additionstheorem für die Kugelfunktionen:

Legendre Polynome $\rightarrow P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\Omega_{\vec{k}}) Y_{lm}(\Omega_{\vec{r}})$

Dann:

$$e^{i\vec{k}\vec{r} \cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

Effektives Potential:

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}$$

← Zentrifugalpotential

Schrödinger-Gleichung, $\psi = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = -\frac{2mV(r)}{\hbar} R_l(r)$$

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r}$$

$$u_l''(r) - \left(\frac{2m}{\hbar} V_{\text{eff}}(r) - k^2 \right) u_l(r) = 0$$

Lösung: $r \rightarrow 0 \quad u_l(r) = \alpha r^{l+1}$

Für $r \rightarrow \infty, \quad V_{\text{eff}} \rightarrow 0$

$$u_l''(r) + k^2 u_l(r) = 0$$

$$U_\ell(r) = A \sin(kr - \frac{\pi}{2}\ell + \delta_\ell(k))$$

mit $\delta_\ell(k)$ - Streuphase: $\delta_\ell(k) = 0 \Leftrightarrow V_{\text{eff}} = 0$

Allgemeine Lösung der SG:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell U_\ell(r) P_\ell(\cos\theta)$$

Beachte, dass: $Y_{\ell,0}(\theta, \varphi) = P_\ell(\cos\theta) \sqrt{(2\ell+1)/4\pi}$

Dann: $\left(\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \right)$

$$\begin{aligned} \rightarrow \psi(\vec{r}) = & -\frac{e^{-ikr}}{2i r} \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell e^{-i\delta_\ell} e^{i\ell\pi/2} P_\ell(\cos\theta) + \\ & + \frac{e^{ikr}}{2i r} \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell e^{i\delta_\ell} e^{-i\ell\pi/2} P_\ell(\cos\theta) \end{aligned}$$

Vergleichen mit:

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta)$$

für $r \rightarrow \infty$

$$j_\ell(kr) \approx \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{\pi\ell}{2}) = \frac{e^{ikr - i\ell\pi/2} - e^{-ikr + i\ell\pi/2}}{2i kr}$$

Dann:

$$\begin{aligned} \rightarrow \psi(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} & -\frac{e^{-ikr}}{2i kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell e^{i\ell\pi/2} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) + \\ & + \frac{e^{ikr}}{2i kr} \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell e^{-i\ell\pi/2} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) + 2ik f(k, \theta) \right) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$C_\ell = \frac{i}{k} (2\ell+1) e^{i\delta_\ell}$$

und

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2i} (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta)$$

Vergleichen: $\vec{k} \parallel \vec{e}_z$

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) a_\ell P_\ell(\cos \theta)$$

$\Rightarrow$

$$a_\ell = \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2i} = e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell$$

- Die gesamte Information der Teilchenstreuung ist daher in den Streuphasen enthalten!

Optisches Theorem:

die totale Wirkungsquerschnitt:

$$\begin{aligned} \sigma(k) &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell, \ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1) a_\ell^* a_{\ell'} \int d\Omega P_\ell^*(z) P_{\ell'}(z) = \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell(k) \end{aligned}$$

$2\delta_{\ell\ell'}/(2\ell+1)$

$\theta=0$ - Vorwärtstreuung: ($P_\ell(\cos \theta=1) = 1$)

$$\text{Im}[f(k, \theta)] = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \text{Im}[a_\ell(k)] = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell$$

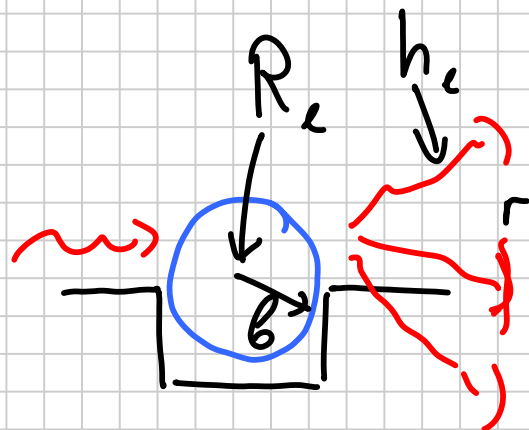
$\Rightarrow$

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k} \text{Im}[f(k, 0)]$$

7.3 Streuresonanzen

Betrachten wir ein Potential

$$V(r) = \begin{cases} V_0, & r \leq b \\ 0, & r > b \end{cases}$$



für $r \rightarrow \infty$

$$R_e(r) = \frac{1}{2} (h_e^*(kr) + S_e(k) h_e(kr))$$

$$S_e(k) = e^{2i\delta_e(k)} \quad \text{mit } |S_e|^2 = 1$$

- S-matrix

$\delta_e(k)$ - Streuphase

$$u_e(r) \sim \sin(kr - \frac{\pi}{2} + \delta_e)$$

Randbedingung: (ψ, ψ') für $r=b$:

$$\frac{\frac{\partial}{\partial r} [h_e^*(kr) + e^{2i\delta_e} h_e(kr)]}{h_e^*(kr) + e^{2i\delta_e} h_e(kr)} \Big|_{r=b} = \frac{\partial h_e R_e}{\partial r} \Big|_{r=b} \equiv \chi_e(k)$$

$$\rightarrow \cot \delta_e = \frac{\partial_r n_e(kr) - \chi_e h_e(kr)}{\partial_r j_e(kr) - \chi_e j_e(kr)} \Big|_{r=b}$$

$$h = j + in$$

Für kleiner Energie: $k \rightarrow 0$ ($E \rightarrow E_r = 0 + i\epsilon$)

nur: $l=0 \rightarrow j_0(x) \underset{x \rightarrow 0}{\approx} 1$ $n_0(x) \underset{x \rightarrow 0}{\approx} \frac{1}{x}$

$$\rightarrow \cot \delta_0 = - \frac{1 + b \chi_0(kr)}{k b^2 \chi_0(kr)} \equiv - \frac{1}{\underbrace{b_s}_S k}$$

$$\rightarrow \sigma(k=0) \approx 4\pi b_s^2$$

$E > 0, E \rightarrow 0$

$$\sigma(E) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{\cot^2 \delta_0 + 1} \equiv \frac{2\pi}{m} \frac{\hbar^2}{E - E_r + i\Gamma}$$

$$\cot \delta_l(E) \approx \frac{2(E - E_r)}{\Gamma}$$

- Resonanz: $E > 0$

Streuphase $= \frac{\pi}{2} + \pi n$

$E \rightarrow E_r + i\Gamma$

