

Lippmann-Schwinger-Gleichung (erzählt)

$$\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' \frac{e^{\pm i\underline{k}(\underline{r}-\underline{r}')} V(\underline{r}') \psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

Streuzustand im
Wegpunkt ($\underline{r}=0$)
 $r \gg r'$

$$\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} + \underbrace{\frac{e^{\pm i\underline{k}\cdot\underline{r}}}{N}}_{\text{Kugelwelle}} \left(\underbrace{-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' e^{\mp i\underline{k}\cdot\underline{r}-\underline{r}'} V(\underline{r}') \psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}')}_{f^{\pm}(\underline{k}_{\text{ein}}, \underline{k}) \text{ Streuamplitude}} \right)$$

Lippmann-Schwinger-Gl. ist implizit für $\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r})$

Eine Möglichkeit: iterative Lösung: setze unter dem Integral für $\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}')$ wieder die rechte Seite der Gleichung ein usw.

Born'sche Näherung ($\hat{=}$ 1. Iteration der Lippmann-Schwinger-Gl.)

\Rightarrow ersetze $\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}')$ im Integral durch ebene Welle!

Ergebn für Streuamplitude

$$f_{\text{Born}}^{\pm}(\underline{k}_{\text{ein}}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' e^{-i\underline{k}_{\text{ein}}\cdot\underline{r}'} V(\underline{r}') e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}'}$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\underline{k}_{\text{ein}} - \underline{k})$$

Fouriertransformierte des Streupotentials!

(Erinnere:

der Streuquerschnitt $d\sigma \sim |f^{\pm}|^2 d\Omega$

direkte Verbindung zum Streupotential!

Zur Gültigkeit der Born'schen Näherung

Erinnere: Born'sche Näherung $\hat{=}$ 1. Iteration der Lippmann-Schwinger-Gl.

Damit das Sinn macht, sollte folgendes gelten

$$\left| -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' \frac{e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}-\underline{r}'}}{|\underline{r}-\underline{r}'|} V(\underline{r}') e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}'} \right| \ll \left| \psi_{\underline{k}}^0(\underline{r}) \right| = 1$$

$\psi_{\underline{k}}^0(\underline{r}')$
Lösung für das ungestörte Problem

in Worten: zweite Term auf der rechten Seite der Lippmann-Schwinger-Gl. ^{geringer}
klein gegen den ersten Term

Annahme für kugelsymmetrisches Streupotential, lokalisiert im Ursprung
 $V(r') = V(r')$

Und betrachte den Fall $l=0$ ("Schau direkt ins Streuzentrum")

(hier sollte der Wellenvektor am größten sein)

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int dr' \frac{1}{r'} e^{ikr'} e^{ikr' \cos \theta} V(r') \right| \ll 1$$

Annahme in Kugelkoordinaten

$\neq f(k, r')$

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| 2\pi \int_0^\infty dr' r'^2 \frac{1}{r'} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) e^{ikr' + ikr' \cos \theta} V(r') \right| \ll 1$$

$$\frac{m}{\hbar^2} \left| \frac{1}{ik} \int_0^\infty dr' V(r') e^{ikr'} (e^{ikr'} - e^{-ikr'}) \right| \ll 1$$

$$\Leftrightarrow \left(\neq \right) \left| \int_0^\infty dr' V(r') (e^{2ikr'} - 1) \right| \ll \frac{\hbar^2 k}{2m}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Betrachte 2 Fälle (s.o. Vorlesung)

a) Hohe Energie

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ groß} \Leftrightarrow kR_0 \gg 1$$

$$\int_0^\infty dr' V(r') e^{2ikr'} \approx 0$$

sehr rasch
oszillierend im
Abstand

(effektiver) Radius, also die Reichweite, des Potentials endlich!

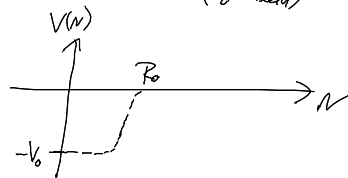
aus (*) : $\left| \int_0^\infty dr' V(r') \right| \ll \frac{\hbar^2 k}{2m}$

Raumintegral
über $V(r')$

Erfüllt, falls das ~~de~~ Streupotential wenig ausgedehnt ist und Betrag nicht zu klein
(R_0 klein) (V_0 klein)

$$\int_0^\infty dr V(r) \approx V_0 R_0$$

(Typische) Radius



b) Welle Energie

$$k \text{ klein, } kR_0 \text{ klein}$$

in (*) $e^{2ikr} \approx 1 - 2ikr + \dots$ Taylor

aus (*) : $\left| 2k \int_0^\infty dr' r' V(r') \right| \ll \frac{\hbar^2 k}{2m}$

$$\left| \int_0^\infty dr' r' V(r') \right| \ll \frac{\hbar^2}{2m}$$

Sehr einschränkend !!

Streupotential wird im Integral mit r' gewichtet.

De facto muß das Streupotential sehr viel kleiner als im Fall a) sein!

Fazit: Born'sche Näherung typischerweise besser im Falle hoher Energien
(und schwache Streupotential)

III.5. Formale Streutheorie, Green'sche Funktionen

Zunächst: Verallgemeinerung der Green'schen Funktionen ("Resolvente")

Zum freien Hamiltonian, $\vec{G}_0(E) = (E - \hat{H}_0)^{-1}$

\Rightarrow nun soll der volle Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ vorkommen! — Streupotential

Definiere: $\vec{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1}$, $z \in \mathbb{C}$

hier wurde die Energie E gleich. durch eine komplexe Zahl ersetzt, um Fälle wie $z = E \pm i\epsilon$ einzuschließen

Umschreiben von (*) mit Hilfe der geometrischen Reihe

$$\begin{aligned} \vec{G}(z) &= (z - \hat{H})^{-1} \stackrel{\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}}{=} (z - \hat{H}_0 - \hat{V})^{-1} \stackrel{\text{bekannt Def. von } \vec{G}_0(z) = \frac{1}{z - \hat{H}_0}}{=} (\vec{G}_0^{-1}(z) - \hat{V})^{-1} \\ &= (\vec{G}_0^{-1}(z) [\mathbb{1} - \vec{G}_0(z) \hat{V}])^{-1} \\ &= (\mathbb{1} - \vec{G}_0(z) \hat{V})^{-1} \vec{G}_0(z) \end{aligned}$$

benutze $(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$

benutze: $\sum_{k=0}^{\infty} a_0 q^k = \frac{a_0}{1-q}$ für $|q| < 1$

hier: $a_0 \rightarrow \vec{G}_0(z)$, $q = \vec{G}_0(z) \hat{V}$

(**) $\Rightarrow \vec{G}(z) = \underbrace{\vec{G}_0(z)}_{k=0} + \underbrace{\vec{G}_0(z) \hat{V} \vec{G}_0(z)}_{k=1} + \underbrace{\vec{G}_0(z) \hat{V} \vec{G}_0(z) \hat{V} \vec{G}_0(z)}_{k=2} + \dots$

Eine Möglichkeit (***) umzuschreiben:

$$\vec{G}(z) = \vec{G}_0(z) + \vec{G}_0(z) \vec{V} \left(\vec{G}_0(z) + \vec{G}_0(z) \vec{V} \vec{G}_0(z) + \dots \right)$$

Das ist wieder $\vec{G}(z)$!

Also :

$$\boxed{\vec{G}(z) = \vec{G}_0(z) + \vec{G}_0(z) \vec{V} \vec{G}(z)}$$

erhält !

Das ist die sogenannte „Dyson-Gleichung“

Hier: Eindeutigkeitsproblem (\vec{V} ist hier Störpotential für 1 Teilchen !)

Die Dyson-Gleichung spielt in der Theorie komplexer Vielteilchensysteme eine zentrale Rolle !

Beachte auch: Dyson-Gl. ist implizite Gleichung für $\vec{G}(z)$

Äquivalent kann man ~~xxx~~ auch wie folgt ans schreiben:

$$\begin{aligned} \vec{G}(z) &= \vec{G}_0 + \vec{G}_0 \vec{V} \vec{G}_0 + \vec{G}_0 \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} \vec{G}_0 + \dots \\ &= \vec{G}_0 + \vec{G}_0 \left(\vec{V} + \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} + \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} \right) \vec{G}_0 \end{aligned}$$

(Klasse Argumente \approx hier weg)

Definiere: $\vec{T}(z) = \vec{V} + \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} + \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} + \dots$ „T-Matrix“

$$= \vec{V} + \left(\vec{V} + \vec{V} \vec{G}_0 \vec{V} + \dots \right) \vec{G}_0 \vec{V}$$

das ist wieder T

$$\Rightarrow \boxed{\vec{T}(z) = \vec{V} + \vec{T}(z) \vec{G}_0(z) \vec{V}}$$

erhält

Verbindet zum Störpotential \vec{V} !

Kombi:

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z) \hat{T}(z) \hat{G}_0(z)$$

Durch Kenntnis der T-Matrix kann also die „volle Green'sche Funktion“ direkt berechnet werden!

Ortsdarstellung der Dyson-Gleichung, Verbindung zu Lippmann-Schwinger

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z) \hat{V} \hat{G}(z)$$

$$\langle N | \hat{G}(z) | N' \rangle = \langle N | \hat{G}_0(z) | N' \rangle + \langle N | \hat{G}_0(z) \hat{V} \hat{G}(z) | N' \rangle$$

bekannt aus Heitler
Lippmann-Schwinger!

Einschub von 'Einsetzen'
in Ortsdarstellung

$$= \langle N | \hat{G}_0(z) | N' \rangle + \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \langle N | \hat{G}_0(z) | N_1 \rangle \langle N_1 | \hat{V} | N_2 \rangle \langle N_2 | \hat{G}(z) | N' \rangle$$

beachte: \hat{V} ist das Streupotential, hängt nur von 1 Koordinate ab!

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle N_1 | \hat{V} | N_2 \rangle &= \hat{V}(r_2) \langle N_1 | N_2 \rangle \\ &= \hat{V}(r_2) \delta(N_1 - N_2) \\ &= \hat{V}(r_1) \delta(N_1 - N_2) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle N | \hat{G}(z) | N' \rangle = \langle N | \hat{G}_0(z) | N' \rangle + \int d\mathbf{r}_1 \langle N | \hat{G}_0(z) | N_1 \rangle \hat{V}(r_1) \langle N_1 | \hat{G}(z) | N' \rangle$$

Ortsdarstellung der Dyson-Gl.

$\hat{=}$ Integralgleichung für die Green'sche Funktion $\hat{G}(z)$

Zusammenhang mit Lippmann-Schwinger-Gl. (Dirac-Schreibweise)

$$\hookrightarrow |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{\pm}(E) \hat{V} |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle$$

Streuzustand
elast. Wellen

Iteration. ^{in 2. Term} Setze auf der rechten Seite für $|\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle$ wieder die rechte Seite ein

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle &= |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{\pm}(E) \hat{V} |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{\pm}(E) \hat{V} \hat{G}_0^{\pm}(E) \hat{V} |\underline{k}\rangle + \dots \\ &= |\underline{k}\rangle + \underbrace{(\hat{G}_0^{\pm}(E) + \hat{G}_0^{\pm}(E) \hat{V} \hat{G}_0^{\pm}(E) + \dots)}_{\text{entspricht der vollen Green'schen Funktion!}} \hat{V} |\underline{k}\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = |\underline{k}\rangle + \hat{G}^{\pm}(E) \hat{V} |\underline{k}\rangle$$

volle Green'sche Funktion

$$\hat{G}^{\pm}(E) = (E \pm i\epsilon - \hat{H})^{-1}$$

exakt!

Vorteil: Auf der rechten Seite taucht nur noch $|\underline{k}\rangle$ als Zustand auf (und nicht $|\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle$ wie bei der Original-Lippmann-Schwinger-Gl.)

"Nachteil": Man braucht die volle Green'sche Funktion!

Auch die Streuamplitude lässt sich nun eleganter darstellen

Wir hatten vorher:

$$\text{(im Falle } n \rightarrow n') \quad f^{\pm}(k_{en}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' e^{-i\underline{k}_{en} \cdot \underline{r}'} V(\underline{r}') \psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}')$$

$$\text{Kompakte Notation:} \quad f^{\pm}(k_{en}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \underline{k}_{en} | \hat{V} | \psi_{\underline{k}}^{\pm} \rangle$$

Einsetzen der Gleichung $|k_{\pm}\rangle = |k\rangle + \hat{G}^{\pm}(E) \hat{V} |k\rangle$

$$= |k\rangle + \left(\hat{G}_0^{\pm} + \left(\hat{G}_0^{\pm} \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} + \dots \right) \right) \hat{V} |k\rangle$$

$$f^{\pm}(k_{\text{er}}, k) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \left(\langle k_{\text{er}} | \hat{V} |k\rangle + \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} |k\rangle + \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} |k\rangle + \dots \right)$$

$$= \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \langle k_{\text{er}} | \underbrace{\hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} + \dots}_{\text{T-Matrix}} |k\rangle$$

$$f^{\pm}(k_{\text{er}}, k) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \langle k_{\text{er}} | \hat{T}^{\pm}(E) |k\rangle$$

erhaltene Gleichung für die Streuamplitude

Aus der vollen T-Matrix lässt sich also sofort die Streuamplitude berechnen!

Die Born'sche Näherung entspricht der Ersetzung der T-Matrix durch das Streupotential \hat{V} (erstes Glied zu T)