

Lippmann-Schwinger-Gleichung

WDH: Ausgangspunkt:

$$\hat{H} | \psi_{\underline{k}}^{\pm} \rangle = E | \psi_{\underline{k}}^{\pm} \rangle$$

$$\text{mit } \psi_{\underline{k}}^{\pm} = e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} + \int d\underline{r}' f^{\pm}(\underline{k} \cdot \underline{r}', \underline{k}) \frac{e^{\pm i \underline{k} \cdot \underline{r}'}}{r'}$$

$$\text{und } \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}(\underline{r})$$

$$\text{und } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\text{"Resolvente" } \hat{G}_0(E) = (E - H_0)^{-1}$$

$$\langle \underline{r}' | \psi_{\underline{k}}^{\pm} \rangle = \langle \underline{r}' | \underline{k} \rangle + \int d\underline{r} \langle \underline{r}' | \hat{G}_0(E) | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \hat{U} | \psi_{\underline{k}}^{\pm} \rangle$$

$$\langle \underline{r}' | \hat{G}_0^{\pm}(E) | \underline{r} \rangle = \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{1}{ik} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p e^{i p x}}{E - p^2 \pm i \epsilon} \quad \begin{array}{l} \epsilon \rightarrow 0^+ \\ \epsilon \text{ positiv} \end{array}$$

• Berechnung der Pole in der oberen Halbebene

$$E - p_0^2 \pm i \epsilon = 0 \Leftrightarrow p_0^2 = E \pm i \epsilon$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow p_0 &= \pm \sqrt{E \pm i \epsilon} = \pm \sqrt{E} \sqrt{1 \pm \frac{i \epsilon}{E}} \\ &= \pm \sqrt{E} \left(1 \pm i \frac{1}{2} \frac{\epsilon}{E} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right) \end{aligned}$$

→ Die Pole liegen bei

$$p_0^+ = \sqrt{E} + i \tilde{\epsilon} \quad \text{für } G_0^+$$

$$p_0^- = -(\sqrt{E} - i \tilde{\epsilon}) \quad \text{für } G_0^-$$

beachte außerdem:

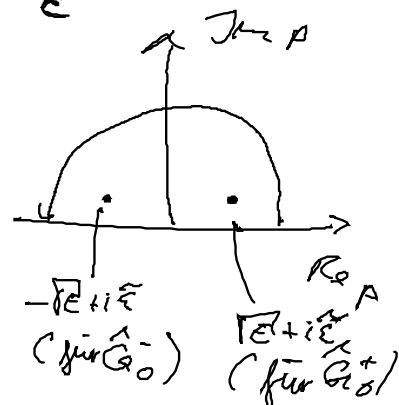
Die Pole sind 1. Ordnung

und

$$(p_0 - p)(p_0 + p) = p_0^2 - p^2 = E - p^2 \pm i \epsilon$$

wie gefordert

Jetzt: Anwendung des Residuensatzes



$$\frac{1}{2\pi i} \oint f(z) dz = \sum_{\alpha=1}^n \text{Res}_{z_\alpha} f(z)$$

Summation über Polstellen

$$\text{mit } \text{Res}_{z_\alpha} f(z) = \lim_{z \rightarrow z_\alpha} [(z - z_\alpha) f(z)]$$

für Pole 1. Ordnung

hier: $f(z) = \frac{p e^{ipx}}{(p_0 - p)(p_0 + p)}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \text{Res}_{p_0} f(z) &= \lim_{p \rightarrow p_0} \frac{p e^{ipx} (p - p_0)}{(p_0 - p)(p_0 + p)} \\ &= - \lim_{p \rightarrow p_0} \frac{p e^{ipx}}{(p_0 + p)} = - \frac{p_0 e^{ip_0 x}}{2p_0} = - \frac{1}{2} e^{ip_0 x} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle \Gamma | \hat{G}_0^\pm(E) | \Gamma' \rangle = \frac{A}{2\pi} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p e^{ipx}}{E - p^2 + i\epsilon} \quad (\text{mit } \epsilon \rightarrow 0)$$

$$= \frac{-A}{4\pi} \frac{e^{\pm i\epsilon x}}{x} \quad \text{Green'sche Funktion}$$

(mit $A = \frac{2m}{\hbar^2}$)

Beachte: Die physikalisch
richtige Lösung \hat{G}_0^+ \Leftrightarrow auslaufende Kugel-
welle

Beachte auch:

$$\sqrt{E} \xrightarrow{\text{Rücksubstitution}} \sqrt{E} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \hbar k$$

Einsetzen in die Gleichung für die Streuzustände:

$$\langle \Gamma | \psi_{\mathbf{k}}^{\pm} \rangle = \langle \Gamma | \psi_{\mathbf{k}} \rangle + \int d\Gamma' \langle \Gamma | \hat{G}_0(E) | \Gamma' \rangle \langle \Gamma' | V | \psi_{\mathbf{k}}^{\pm} \rangle$$

$$\langle \Gamma | \hat{G}_0^{\pm}(E) | \Gamma' \rangle = -\frac{2\mu}{24\hbar^2} \frac{e^{\pm ik|\Gamma-\Gamma'|}}{|\Gamma-\Gamma'|}$$

↑
nach Berücksichtigung
der Vorfaktoren

außerdem:

$$\langle \Gamma | \psi_{\mathbf{k}}^{\pm} \rangle = \psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\Gamma) ; \quad \langle \Gamma | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = e^{ik\Gamma}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\Gamma) = e^{ik\Gamma} - \frac{\mu}{24\hbar^2} \int d\Gamma' \frac{e^{\pm ik|\Gamma-\Gamma'|}}{|\Gamma-\Gamma'|} V(\Gamma') \psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\Gamma')$$

Lippmann-Schwinger-Gl.

Bemerkungen

- Die Lippmann-Schwinger-Gl. ist eine exakte Integralgleichung für die Streuzustände, in der diese auf beiden Seiten der Gleichung auftauchen!
- Sie liefert Ausgangspunkt für wichtige Näherungen, insbesondere die Born'sche Näherung für die Streuamplituden → später
- Die hier eingeführte "Resolvente" $\hat{G}_0^{\pm}(E)$ ist wichtiges Element der formalen Streutheorie → später

- Das Ergebnis ~~ist~~ hätten wir auch etwas einfacher haben können - durch "Rückbesinnung" auf Elektrodynamik!

↳ Gehe nochmal zurück zur (zeitvariablen) Schrödingergl., gleich in Ortsdarstellung, Fokus auf physikalischer Lösung $\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \psi_{\underline{k}}^+(\underline{r})$

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = V(\underline{r}) \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \quad \left| \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \right.$$

$$\Rightarrow (k^2 + \Delta) \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \tilde{V}(\underline{r}) \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \quad \begin{array}{l} \text{mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \text{mit } \tilde{V} = \frac{2m}{\hbar^2} V \end{array}$$

Wir kennen die Lösung zum homogenen Problem ($\tilde{V} = 0$)

$$(k^2 + \Delta) \psi_{\underline{k}}^0(\underline{r}) = 0 \quad \text{Helmholtz-Gl.}$$

Die Struktur ist bekannt aus den homogenen Maxwellgleichungen bzw. der zugehörigen Potentialgleichungen (Lorenzgleichung)

$$\square \phi(\underline{r}, t) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (\Delta + \frac{v^2}{c^2}) \phi(\underline{r}, t) = 0$$

Zur Lösung der inhomogenen Wellengleichung:
Methode der Green'schen Funktion; d.h. Darstellung durch Faltungsintegral:

wiev:

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \psi_{\underline{k}}^0(\underline{r}) + \int d\underline{r}' G(\underline{r}-\underline{r}') \tilde{V}(\underline{r}') \psi_{\underline{k}}(\underline{r}')$$

$$\text{mit } (k^2 + 1) G(\underline{r}-\underline{r}') \stackrel{!}{=} \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

$\Rightarrow G(\underline{r}-\underline{r}')$ ist die Lösung des Streuproblems

für eine fiktive punktförmige Streuquelle bei \underline{r}' !

Beachte: Auch die explizite Form von G

hätte wir bereits bei der Lösung der inhomogenen Maxwellgleichungen berechnet!

III.3. Streuamplitude und Born'sche Näherung

erstes Ziel:

Verbindung des Ausdrucks für $\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r})$ aus der Lippmann-Schwinger-Gl. mit unserem ursprünglichen Ansatz

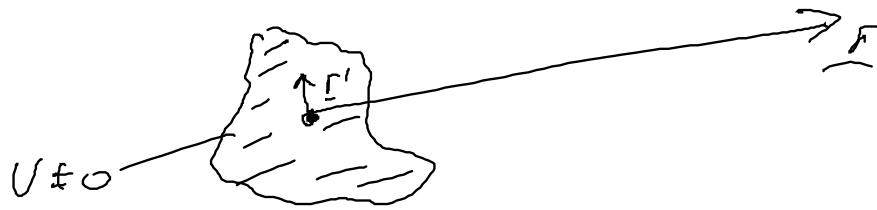
$$\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}} + f^{\pm}(k_{\underline{r}}, k) \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

(mit $^+$ bei der physikalischen Lösung)

betrachte die Lippmann-Schwinger-Gl. für $r \gg r'$

(Annahme dahinter: Streuzentrum im Ursprung idealisiert, betrachte Abstände weit außerhalb

der Ausdehnung des Streupotentials $U(\underline{r}')$)



→ in der Green'schen Funktion $\frac{e^{ik|\Gamma-\Gamma'|}}{|\Gamma-\Gamma'|}$
 können wir Zähler und Nenner $|\Gamma-\Gamma'|$
 approximieren

benutze: $\frac{1}{|\Gamma-\Gamma'|} = \frac{1}{r} + \frac{\Gamma' \cdot \Gamma}{r^3} + \dots \approx \frac{1}{r}$

(wie bei Multipolentwicklung in der E-Dynamik)

im Exponenten:

$$|\Gamma-\Gamma'| = \sqrt{r^2 + \sigma'^2 - 2\Gamma \cdot \Gamma'} = r \sqrt{1 + \left(\frac{\Gamma'}{r}\right)^2 - \frac{2\Gamma \cdot \Gamma'}{r^2}}$$

$$\approx r \sqrt{1 - \frac{2\Gamma \cdot \Gamma'}{r^2}} \quad \text{Wurzel entwickeln}$$

$$\approx r - \frac{\Gamma \cdot \Gamma'}{r} = r - \Gamma' e_r$$

$$\Rightarrow \frac{e^{\pm ik|\Gamma-\Gamma'|}}{|\Gamma-\Gamma'|} \approx \frac{e^{\pm ikr}}{r} e^{\mp ike_r \Gamma'}$$

Einsetzen in die Lippmann-Schwinger-Gl.

(beachte: dort wird über Γ' integriert, Γ -abhängige
 Terme können vorgezogen werden!)

$$\Rightarrow \psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\Gamma) = e^{i\mathbf{k} \cdot \Gamma} - \frac{\mu}{2i\hbar^2} \frac{e^{\pm i\mathbf{k} \cdot \Gamma}}{r} \int d\Gamma' e^{\mp i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_r \Gamma'} V(\Gamma') \psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\Gamma')$$

Vergleiche dies mit unserem Ansatz:

$$\Rightarrow f_{\pm}^{\pm}(k_{\underline{e}_r}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' e^{\mp i \underline{k}_{\underline{e}_r} \underline{r}'} V(\underline{r}') \psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r}')$$

Expliziter Ausdruck für die Streuamplituden!
 ("+" entspricht physikalischer Lösung)

Allerdings bräuhet man zur Auswertung des Integrals immer noch den vollen Streuzustand $\psi_{\underline{k}}^{\pm}$

Nebenbemerkung:

abstrakte Schreibweise als Matrixelement:

$$f_{\pm}^{\pm}(k_{\underline{e}_r}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle k_{\underline{e}_r} | \hat{V} | \psi_{\underline{k}}^{\pm} \rangle$$

Born'sche Näherung: (für die "physikalische" Lösung)

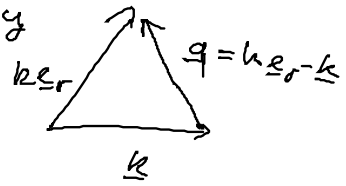
Ersetze den Streuzustand $\psi_{\underline{k}}^{\pm}(\underline{r})$ im Integral durch den angestrenten Zustand, d.h. die ebene Welle

$$\begin{aligned} \Rightarrow f_{\text{Born}}^{\pm}(k_{\underline{e}_r}, \underline{k}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' e^{-i \underline{k}_{\underline{e}_r} \underline{r}'} V(\underline{r}') e^{i \underline{k} \underline{r}'} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' e^{-i(\underline{k}_{\underline{e}_r} - \underline{k}) \underline{r}'} V(\underline{r}') \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{f_{\text{Born}}^{\pm}(k_{\underline{e}_r}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\underline{k}_{\underline{e}_r} - \underline{k})} \quad \otimes$$

Streuamplitude entspricht also (bis auf Vorfaktor) der Fouriertransformierten des Streupotentials!

mit $q = k e_r - k$ Impulsübertrag



Auswertung von ~~der~~ spezielle für
kugelsymmetrisches Potential, also $V(\underline{r}') = V(r')$

$$\int_{\text{Born}}^+ (k e_r, k) = \int_{\text{Born}}^+ (q) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d\underline{r}' e^{iq\underline{r}'} V(r')$$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') \cdot$$

lege Polarachse parallel zu q

q -Integral

$$\int_{-1}^1 d(\cos\vartheta) e^{-iqr' \cos\vartheta}$$

$$\frac{2 \sin qr'}{qr'}$$

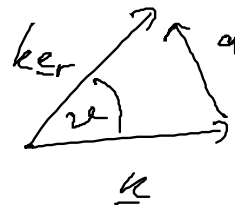
\Rightarrow

$$\int_{\text{Born}}^+ (q) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty dr' r' V(r') \sin(qr')$$

brauche noch

$$q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}$$

$$\Rightarrow \int_{\text{Born}}^+ (q) = \int_{\text{Born}}^+ (\vartheta)$$



Zur Gültigkeit der Born'schen Näherung

Erinnerung: wir hatten (Lippmann-Schwinger)

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

und haben dann $\psi_{\pm}^{\pm}(\underline{r}') = \psi_{\pm}^0(\underline{r}') = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}'}$
 ersetzt. Das entspricht der ersten Iteration
 der Lippmann-Schwinger Gl. !!

(bei Einsetzen der Lösungen in die rechte Seite)

Damit dies Sinn macht, sollte gelten
 (s. Notiz)

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

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\psi_{\pm}^0(\underline{r})}$