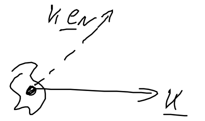
Lippmann-Schwinger (LS) – Gleichung:

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

Grenzfall $r \gg r'$ (weit weg vom Streuzentrum)

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



asymptotisch exakt

⇒ explizite Ausdruck für die Streuamplitude ("+" entspricht physikalische Lösung)

Bem:
Wir können die Streuamplitude auch formal als Matrixelement von $\hat{V}$ schreiben

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

Streuzustand

ebene Welle mit Ausbreitungsrichtung $\underline{e}_r$

Operator zum Streupotential $\hat{V}$

Problem: $f^{(\pm)}$ hängt noch vom vollen Streuzustand ab (i.a. nicht bekannt)

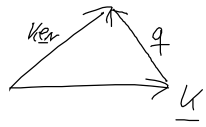
Born'sche Näherung

Ersetze im Integral in $f^{(\pm)}$ den echten Streuzustand $\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}$ durch den ungestreuten Zustand, d.h. die ebene Welle (Fokus auf die "+"-Lösung)

$$\Rightarrow f^{+}_{Born}(k\underline{e}_r,\underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\underline{r}'\, e^{-ik\underline{e}_r\cdot\underline{r}'}\, V(\underline{r}')\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}'}$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\underline{r}'\, e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}'}\, V(\underline{r}')$$

mit $\underline{q} = \underline{k}_{ein} - \underline{k}'$



$$\Rightarrow \boxed{f^{+}_{Born}(\underline{k}_{ein}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\, \underbrace{\tilde{V}(\underline{q})}} \quad (*)$$

Fouriertransformierte des Streupotentials!

(q : „Impulsübertrag")

expliziter Zusammenhang Streuamplitude $\Leftrightarrow$ Streupotential!

Diskussion

- Auswertung von $(*)$ für kugelsymmetr. Potential $V(\underline{r}') = V(r')$

$$f^{+}_{Born}(\underline{k}_{ein}, \underline{k}) = f^{+}_{Born}(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \underbrace{2\pi}_{\text{aus }\varphi\text{ Integral}} \int_0^\infty dr' (r')^2\, V(r') \underbrace{\int_{-1}^{1} d(\cos\vartheta)\, e^{-iqr'\underbrace{\cos\vartheta}_{\sphericalangle(\underline{q},\underline{r}')}}}_{\frac{2\sin(qr')}{qr'}}$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty dr'\, r'\, V(r') \sin(qr')$$

beachte: $q = 2k \sin\frac{\vartheta}{2}$ — Streuwinkel

$$\Rightarrow f^{+}_{Born}(\underline{q}) = f^{+}_{Born}(q) = f^{+}_{Born}(\vartheta)$$

k bleibt konstant (elastische Streuung!)

- Zur Gültigkeit der Born'schen Näherung

Erinnerung: volle LS-Gl.: $(**)$

$$\psi^{(+)}_{\underline{k}}(\underline{r}) = \underbrace{e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}}_{\psi^{(0)}_{\underline{k}}(\underline{r})} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\underline{r}'\, \frac{e^{ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\, V(\underline{r}')\, \psi^{(+)}_{\underline{k}}(\underline{r}')$$

Wir haben im Rahmen der Born'sche Näherung ersetzt: $\psi^{(+)}_{\underline{k}}(\underline{r}') \to e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}'} = \psi^{(0)}_{\underline{k}}(\underline{r}')$ (erster Term in $(**)$)

(und $r \gg r'$)

Also: Born'sche Näherung entspricht der „1. Iteration" der LS-Gleichung!

Damit das Sinn macht, sollte gelten

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

(d.h. 2. Term klein gegen 1. Term) $\Rightarrow$ Bedingung für Gültigkeit der Born'schen Näherung!

Auswertung für kugelsymmetr. Potential

und setze $r=0$ (Begründung: Die Bedingung dann soll für alle r erfüllt sein, bei $r=0$ ist das Streupotential am größten!)

$$\rightarrow \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int d\underline{r}' \frac{1}{r'} e^{ikr' + ikr'\cos\vartheta} V(r') \right| \ll 1$$

$$\boxed{\sin x = \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix})}$$

Kugel Koordinaten

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

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

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

Betrachte 2 Fälle (ausführliche Diskussion: s. Nolting)

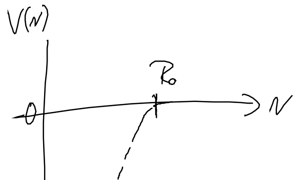
a) <u>Hohe Energien</u>

$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ groß

$$\Rightarrow \int_0^\infty dr' V(r') \underbrace{e^{2ikr'}}_{\cos(2kr') + i\sin(2kr')} \approx 0$$

<u>sehr schnell oszillierend!</u> (für k sehr groß)

Vorstellung



R_0: Ausdehnung des Streupotentials

Aus obiger Bedingung wird: $\left| \int_0^\infty dr'\, V(r') \right| \ll \frac{\hbar^2 k}{m}$

Raumintegral über $V(r')$

$\approx V_0 R_0$

$V_0 R_0 \ll \frac{\hbar^2 k}{m}$ erfüllt falls V_0 klein und/oder R_0 klein

b) Kleine Energien

entwickle Exponentialfunktion

$e^{2ikr'} \approx 1 - 2ikr'$

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

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

Sehr einschränkende Bedingung!

Fazit: Born'sche Näherung tendenziell am besten im Falle hoher Energien (und schwaches Streupotential)

III.4. Formale Streutheorie und Green'sche Funktion

Wir führen eine Verallgemeinerung der Green'schen Funktion $\hat{G}_0(E) = (E - \hat{H}_0)^{-1}$ zum freien Hamiltonian $\hat{H}_0$ ein:

$$\boxed{\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1} \qquad z \in \mathbb{C}}\,, \qquad \hat{H} \text{ voller Hamiltonoperator } \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Hier wurde E gleich durch die komplexe Zahl $z = E \pm i\varepsilon$ ersetzt

Umschreiben von $\hat{G}(z)$ durch ~~als~~ geometrische Reihe $\qquad \boxed{\hat{G}_0(z) = \frac{1}{z - \hat{H}_0}}$

$$\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1} = (z - \hat{H}_0 - \hat{V})^{-1} = \left((\hat{G}_0(z))^{-1} - \hat{V} \right)^{-1}$$

$$= \left(\hat{G}_0^{-1}(z) \left[\hat{1} - \hat{G}_0(z) \hat{V} \right] \right)^{-1} \qquad \boxed{(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1} \hat{A}^{-1}}$$

$$\hat{G}(z) = (\hat{1} - \hat{G}_0(z) \hat{V})^{-1} \hat{G}_0(z)$$

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

hier: $a_0 \to \hat{G}_0(z)$
$q \to \hat{G}_0(z) \hat{V}$

$$\Rightarrow \hat{G}(z) \overset{(*)}{=} \underbrace{\overbrace{\hat{G}_0(z)}^{a_0}}_{k=0} + \underbrace{\overbrace{\hat{G}_0(z)\hat{V}}^{q} \overbrace{\hat{G}_0(z)}^{a_0}}_{k=1} + \underbrace{\overbrace{\hat{G}_0(z)\hat{V} \hat{G}_0(z)\hat{V}}^{q^2} \overbrace{\hat{G}_0(z)}^{a_0}}_{k=2} + \ldots$$

$$= \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\Big(\underbrace{\hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z) + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \dots}_{\text{das ist wieder } \hat{G}(z)\,!}\Big)$$

Also:

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

„Dyson-Gleichung"   Formal exakt!

(hier für ein Einteilchenproblem, denn $\hat{V}$ ist Streupotential für 1 Teilchen!

Die Dyson-Gl. spielt auch zentrale Rolle für wechselwirkende Vielteilchensysteme)

Alternativ können wir (*) auch wie folgt ~~setzen~~ schreiben: (lasse Argumente weg)

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 + \dots$$

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

Definiere

$$\hat{T}(z) = \underset{\text{Streupotential}}{\hat{V}} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \dots \qquad \text{"T-Matrix"}$$

$$= \hat{V} + \big(\underbrace{\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \dots}_{\text{das ist wieder die T-Matrix!}}\big)\hat{G}_0\hat{V}$$

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

(implizit!)
geschlossene Gleichung für die T-Matrix

Kombination der Ausdrücke für $\hat{G}(z)$ (in der Form ⊛) und $\hat{T}(z)$

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

Durch Kenntnis der T-Matrix kann man „sofort" die volle Green'sche Funktion berechnen!

Umschreiben der Lippmann-Schwinger-Gl.

Dirac-Schreibweise (keine Ortsdarstellung)

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

Iteration)

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

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

$$|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle \;\; (**) \;\; = |\underline{k}\rangle + \underbrace{\left(\hat{G}_0^{\pm} + \hat{G}_0^{(\pm)}\hat{V}\,\hat{G}_0^{(\pm)} + \dots\right)}\hat{V}\,|\underline{k}\rangle$$

Das entspricht der Reihenentwicklung der vollen Green'schen Funktion $\hat{G}^{\pm}(z) = (E \pm i\varepsilon - \hat{H})^{-1}$

(basiert auf Dyson-Gl.)

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

explizite Gleichung für $|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle$!

Bei Kenntnis der vollen Green'schen Funktion kann also der Streuzustand sofort berechnet werden!

(offensichtl. Näherung: Nehme zur Berechnung von $\hat{G}$ nur die ersten Iterationen aus der Dyson-Gl.

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0$$

„Abbruch an geeigneter" Stelle ...

multidimensionale Integrale

Auch die Streuamplitude läßt sich jetzt neu darstellen bisher (~~vor~~ vor Born'scher Näherung)

voller Streuzustand!

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

Ersetze $|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle$ durch (**)

$$f^{(\pm)}(k\underline{e}_r, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle k\underline{e}_r | \underbrace{\hat{V} \left(|\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} |\underline{k}\rangle \ldots \right)}_{\left(\hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} \hat{G}_0^{\pm} \hat{V} + \ldots \right) |\underline{k}\rangle}$$

T-Matrix!

$$\Rightarrow \boxed{f^{(\pm)}(k\underline{e}_r, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle k\underline{e}_r | \hat{T}^{\pm}(z) | \underline{k} \rangle} \quad \text{exakt!}$$

Vergleich mit Born'scher Näherung:

$$\hat{T}^{\pm}(z) \longrightarrow \hat{V}$$

(also dem "trivialen" Term in der vollen T-Matrix)