

Prof. Dr. Harald Engel
 Dipl. Phys. Mathias Hayn
 Wassilij Kopylov, M.Sc.
 Jan Tötz, M.Sc.

11. Übungsblatt – Quantenmechanik II

Abgabe: Di. 5. 2. 2013 bis 18:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in 3er-Gruppen erfolgen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummern und das Tutorium an!

Aufgabe 24 (7 Punkte): Beyond Born

Wir betrachten die Streuung einer einfallenden ebenen Welle $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ an einem Potential $U(\vec{r})$. Die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung kann formal als

$$\psi(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G^+(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') \quad (1)$$

geschrieben werden, mit der Green'schen Funktion in 3d: $G^+(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$.

1. Lösen Sie diese Integralgleichung formal bis einschließlich zweiter Ordnung unter Verwendung der Born'schen Näherung. Gehen Sie auch davon aus, dass $r \gg r'$ ist. Bringen Sie Ihr Ergebnis in die Form $\psi(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\exp(ikr)}{r} \cdot f(\vec{r})$ mit

$$f(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' U(r') e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'} - \frac{m^2}{\pi\hbar^4} \int d^3r' e^{-ik\vec{r}'\cdot\vec{e}_r} \cdot U(r') \cdot \int d^3r'' G^+(r', r'') U(r'') \cdot \phi_{\vec{k}}(\vec{r}'') + O(U^3), \quad (2)$$

wobei $\vec{q} = \vec{k} - k\vec{e}_r$.

2. Berechnen Sie für das Yukawa-Potential $U = \frac{\alpha}{r} \cdot e^{-r/R_0}$ die erste Ordnung von $f(\vec{r})$. Zeigen Sie, dass sich daraus für $R_0 \rightarrow \infty$ die Rutherford'sche Streuformel $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2\alpha^2}{4k^4\hbar^4} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$ ergibt. Hinweis: Definieren Sie dazu $\vec{q} = \vec{k} - k\vec{e}_r$ und erläutern Sie mithilfe einer Skizze die Gültigkeit von $q = 2k \sin(\theta/2)$.

Aufgabe 25 (7 Punkte): Green'sche Funktionen im Tight-Binding-Modell

Betrachten Sie in dieser Aufgabe das Tight-Binding-Modell. Der Hamilton-Operator ist durch

$$\hat{H} = -J \sum_{j=1}^N (\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \text{h.c.}) - \mu \sum_{j=1}^N \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \quad (3)$$

gegeben. Summiert wird hier über eine endliche aber große Anzahl N von Gitterplätzen, wobei der $(N+1)$ -te Gitterplatz wieder mit dem ersten Gitterplatz identifiziert wird. Es gilt $J, \mu > 0$ und \hat{c}_i (\hat{c}_i^\dagger) vernichtet (erzeugt) ein Fermion am i -ten Gitterplatz. Der Abstand zweier Gitterplätze sei mit a bezeichnet.

- (a) Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator im Impulsraum diagonal ist, d.h.,

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{d}_k^\dagger \hat{d}_k \quad (4)$$

und dass $\varepsilon_k = \alpha_1 \cos(ka) + \alpha_2$; geben Sie die Konstanten α_1 und α_2 an. Summiert wird hier über die diskreten Impulse $k = \frac{2\pi}{Na} (-\frac{N}{2} + n)$ ($n = 1, 2, \dots, N$). Dabei sind die Operatoren \hat{d}_k wie üblich definiert über $\hat{d}_k = \sum_{j=1}^N \langle k|j \rangle \hat{c}_j$, mit den Ein-Teilchen-Wellenfunktionen (ebene Wellen) $\varphi_{p_k}(x_j) = \langle j|k \rangle = N^{-1/2} e^{ikja}$.

11. Übung TPV WS12/13

(b) Bestimmen Sie nun die Ein-Teilchen-Green'sche-Funktion

$$G^+(i, j; z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \langle 0 | \hat{c}_i \hat{R}_\epsilon^+(z) \hat{c}_j^\dagger | 0 \rangle, \quad \hat{R}_\epsilon^+(z) = \frac{1}{z - \hat{H} + i\epsilon} \quad (5)$$

mit dem Vakuum $|0\rangle$ mit $\hat{c}_j |0\rangle = 0, \forall j$. Sie können sich dabei auf den Parameterbereich $\gamma^2 < 1$, mit $\gamma := \frac{z+\mu}{2J}$ beschränken.

Bonusaufgabe 26 (10 Zusatzpunkte): Streuung am kugelsymmetrischen Potential

Untersuchen Sie in dieser Aufgabe die Streuung an dem kugelsymmetrischen Potential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & : r \leq a \\ 0 & : r > a, \end{cases} \quad (6)$$

mit $V_0 > 0$ und $a > 0$.

Die sphärischen Bessel-Funktionen der ersten (zweiten) Art, $j_\ell(kr)$ ($y_\ell(kr)$), bilden die reguläre (irreguläre) Lösung der freien radialen Schrödinger-Gleichung,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2 \right] R_\ell(r) = 0. \quad (7)$$

Hier ist $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ und die Definition und Eigenschaften der sphärischen Bessel-Funktionen können Sie Kapitel 10 des Buchs ABRAMOWITZ-STEGUN: "Handbook of Mathematical Functions" entnehmen (dieses ist unter <http://people.math.sfu.ca/~cbm/aands/toc.htm> frei verfügbar).

(a) Nehmen Sie

$$R_\ell(r) = \begin{cases} A_\ell j_\ell(qr) & : r \leq a \\ B_\ell [j_\ell(kr) \cos \delta_\ell - y_\ell(kr) \sin \delta_\ell] & : r > a \end{cases} \quad (8)$$

als Ansatz für den radialen Anteil der Wellenfunktion. Dabei ist $\delta_\ell = \delta_\ell(k)$ die Streuphase. Begründen Sie kurz diesen Ansatz, bestimmen Sie q und erklären Sie die Bedeutung von δ_ℓ , indem Sie das Verhalten für große r untersuchen.

(b) Zeigen Sie, dass für die Streuphase

$$\tan \delta_\ell = \frac{ka j_\ell(qa) j'_\ell(ka) - qa j'_\ell(qa) j_\ell(ka)}{ka j_\ell(qa) y'_\ell(ka) - qa j'_\ell(qa) y_\ell(ka)} \quad (9)$$

gilt. Hier ist $j'_\ell(x) = dj_\ell(x)/dx$ und entsprechendes für y_ℓ .

(c) Untersuchen und erklären Sie das Verhalten von δ_ℓ für $E \rightarrow \infty$.

Die Streuphase hängt mit der Streuamplitude $f(k, \theta)$ mittels $f(k, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} P_\ell(\cos \theta)$ zusammen. Hierbei sind $P_\ell(x)$ die Legendre-Polynome.

(d) Beweisen Sie, dass für den Streuquerschnitt $\sigma = \int d\Omega |f(k, \theta)|^2$ gilt:

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (10)$$

(e) Zeigen Sie, dass bei niedriger Energie, $E \rightarrow 0$, der Streuquerschnitt im Allgemeinen durch den Beitrag σ_0 dominiert wird, dass jedoch für bestimmte Werte von $V_0 a^2$ dieser Beitrag verschwindet.

(f) Zeichnen Sie σ_ℓ ($\ell = 0, 1, 2$) als Funktion von ka für verschiedene Potentialtiefen V_0 . Stellen Sie dabei insbesondere das Verhalten aus Aufgabenteil (e) dar.