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

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

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

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

   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 $R_0 \to \infty$ die Rutherfordsche 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

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

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.,

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k\,\hat{d}_k^\dagger\,\hat{d}_k \tag{4}$$

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 $k = \frac{2\pi}{Na}(-\frac{N}{2}+n)$ $(n = 1, 2, \ldots, N)$. 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) $\varphi_{p_k}(x_j) = \langle j|k\rangle = N^{-1/2}\mathrm{e}^{ikja}$.

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

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

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

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

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,

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

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

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

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

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

gilt. Hier ist $j'_\ell(x) = \mathrm{d}j_\ell(x)/\mathrm{d}x$ und entsprechendes für y_ℓ.

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

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

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

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

(e) Zeigen Sie, dass bei niedriger Energie, $E \to 0$, 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.