(Wh) Partialwellenmethode:

$$\psi^{(+)}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} + \overset{\text{Streuamplitude}}{f^{(+)}}(k\underline{e}_r, \underline{k}) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Kugelsymmetr. Streupotential $V(\underline{r}) = V(r)$

$$\Rightarrow f^{(+)}(k\underline{e}_r, \underline{k}) = f^{(+)}(\vartheta)$$

Ansatz: $\psi^{(+)}(\underline{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos\vartheta)$

Axialsymmetrie

asymptotisch $(r\to\infty)$: $u_l(r) = \alpha_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$

Streuphasen
diese reflektieren den Einfluß von $V(r)$!!

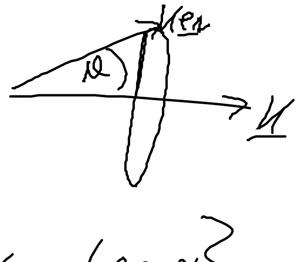
$$V(r) = 0 \Rightarrow \delta_l = 0$$

$\Rightarrow$ Streuamplitude $\boxed{f(\vartheta) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\, e^{i\delta_l} \sin\delta_l\, P_l(\cos\vartheta)}$

Zur Berechnung der Streuphasen muß man die Radialgleichung der zeitunabhängigen Schrödingergl. für das gegebene Streupotential $V(r)$ lösen!

Zusammenhang mit differentiellem Wirkungsquerschnitt

allg.: $\frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2$



totaler Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_{-1}^{1} d(\cos\vartheta)\, |f(\vartheta)|^2$$

Einsetzen des Ausdrucks für $f(\vartheta)$

$$\Rightarrow \sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

mit $\boxed{\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l}$ l-ter partieller Streuquerschnitt

Entkopplung in Beiträge zu verschiedenen l

Streuphasen in Born'scher Näherung

Im Rahmen der Born'schen Näherung gilt für die Streuamplitude

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

mit $\underline{q} = k\underline{e}_r - \underline{k}$

(entspricht einfachster Näherung (1. Iteration) der Lippmann-Schwinger-Gl.)

Speziell für $V(\underline{r}) = V(r)$

$$\Rightarrow f_{Born}(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\, 2\pi \int_0^{\infty} dr\, r^2\, V(r) \underbrace{\int_{-1}^{1} d(\cos\gamma)\, e^{iqr\cos\gamma}}_{2\frac{\sin qr}{qr}}$$

$\gamma = \sphericalangle\, \underline{q}, \underline{r}$

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

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

Ziel: Verbinde dies mit dem Ausdruck für $f(\vartheta)$ aus der Partialwellenanalyse:

(2) $$f(\vartheta) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\, e^{i\delta_l}\sin\delta_l\, P_l(\cos\vartheta)$$

Benutze dazu (ohne Beweis)

$$\frac{\sin qr}{qr} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, j_l^2(kr)\, P_l(\cos\theta)$$

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

Zeigt man, in dem man die beiden ebenen Wellen $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ und $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ in Legendrepolynome entwickelt

Setze das ein in ①

$$\Rightarrow f_{\text{Born}}(q) = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \int_0^{\infty} dr\, r^2 V(r)\, j_l^2(kr)$$

Vergleiche ① und ②

$$(*) \Rightarrow \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr\, r^2 V(r)\, j_l^2(kr)$$

Beachte:

- Bei der Born'sche Näherung hatten wir ein schwaches Streupotential V vorausgesetzt
- Das entspricht der Annahme, dass δ_l klein sind !! (denn die δ_l reflektieren gerade den Einfluss von V !)

$$\Rightarrow e^{i\delta_l} \sin\delta_l = (1 + i\delta_l + O(\delta_l^2))(\delta_l + O(\delta_l^3))$$

$$\approx \delta_l$$

Setze das ein in (*)

$$\Rightarrow \boxed{\delta_{l,\text{Born}}(k) = -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\, r^2 V(r) \left(j_l(kr)\right)^2}$$

IV. Licht und Materie

Ziel: Quantisierung des elektromagnetischen Feldes und Beschreibung seiner Wechselwirkung mit Materie (z.B. Ladungen in Atomen, Molekülen)

IV.1. Gekoppelte Schwingungen, Phononen

Dieses Unterkapitel ist zum großen Teil wiederholend, siehe auch Übung

Ausgangspunkt: Betrachte zunächst klassisch ein System, dessen potentielle Energie geschrieben werden kann als

$$V(\underline{x}) \approx V(\underline{x}_0) + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{f} \left.\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}\right|_{\underline{x}_0} q_i q_j \, .$$

Vektor mit f Einträgen

mit $\underline{q} = \underline{x} - \underline{x}_0$

$\underline{x}_0$: Ruhelage (Gleichgewichtsposition)

(physikalisches Beispiel: Atome im periodisch Gitter, x_0: Ruheposition der Atome)

klass. Lagrangefunktion: $L = \frac{1}{2} \dot{\underline{q}}^T \underline{\underline{I}}(\underline{q}) \dot{\underline{q}} - \frac{1}{2} \underline{q}^T \underline{\underline{V}} \underline{q}$

generalisierte Geschw.

$$\text{mit } \left(\underline{\underline{V}}\right)_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\Big|_{x_0}$$

$\underline{\underline{I}}$: Im einfachsten Fall ist das die Einheitsmatrix

Normalkoordinaten:

$$L \overset{!}{=} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{f} \left(\dot{Q}_i^2 - \lambda_i Q_i^2 \right)$$

Zusammenhang $\underline{q} \Longleftrightarrow \underline{Q}$ Eigenwertproblem!

Normalmode

also Entkopplung des Problems!

Dynamik: $\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial Q_i} = 0$

$$\boxed{\ddot{Q}_i(t) + \lambda_i Q_i(t) = 0} \quad i = 1, \ldots, f$$

BWGL für f entkoppelte Oszillatoren!

$$\Rightarrow Q_i(t) = \alpha_i e^{i\omega_i t} + \beta_i e^{-i\omega_i t}$$

$$\text{mit } \omega_i^2 = \lambda_i$$

Zugehörige Hamiltonfunktion:

$$H = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{1}{2} P_i^2 + \frac{1}{2} \omega_i^2 Q_i^2 \right)$$

Das beschreibt f entkoppelte Oszillatoren!

$$\text{mit } P_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}_i} \quad \text{kanonischer Impuls}$$

(beachte: $\dot{P}_i = \ddot{Q}_i$
d.h. Masse = 1!

Bemerkung:

- Die im Zuge der Entkopplung eingeführten Normalmode $Q_i(t)$ entsprechen <u>kollektiven Schwingungen</u> des Gesamtsystems!

In der Festkörperphysik heißen sie <u>Phononen</u>

Quantisierung:

$$Q_k \longrightarrow \hat{Q}_k \qquad \text{mit } [\hat{Q}_k, \hat{P}_j] = i\hbar\,\delta_{kj}$$
$$P_j \longrightarrow \hat{P}_j$$

(denn Q_k, P_j sind kanonisch konjugierte Variablen mit Poisson-Klammer $\{Q_k, P_j\} = \delta_{kj}$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\left(\hat{P}_i^2 + \omega_i^2 \hat{Q}_i^2\right)}$$

f quantenmechanische Oszillatoren
$\Rightarrow$ Lösung bekannt!

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{f} \hat{H}_i$$

$$\hat{H}_i = \hbar\omega_i\left(\hat{N}_i + \frac{1}{2}\right), \quad \hat{N}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$$

$\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$: Linearkombination aus $\hat{P}_i, \hat{Q}_i$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_k^+] = \delta_{ik}$$

also „bosonische" Vertauschungsrelationen!

$$\text{Eigenzustände}: |n_i\rangle = \frac{(\hat{a}_i^+)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle_i \quad \text{Vakuumzustand}$$

Neue Interpretation:

- Der Eigenzustand $|n_i\rangle$ jedes Oszillators, der ja durch n_i-faches Anwenden vom <u>Erzeuger</u> $\hat{a}_i^+$ auf $|0\rangle_i$ resultiert, heißt n-Phononenzustand

  Wir fassen also den Hilbertraum jedes Oszillators als (bosonischen) Fockraum.

- Die hier vorkommenden Bosonen sind keine echten Teilchen, sondern kollektive Anregungen (Quasiteilchen)

<u>Speziell für Festkörper:</u>

Ersetze $\sum_{i=1}^{f}$ durch Summe über zulässigen Wellenvektoren $\underline{k}$ und den Zweigindex s

$$\hat{H}_{\text{Phonon}} = \sum_{\underline{k},s} \hbar \omega_s(\underline{k}) \left(\hat{N}_{\underline{k},s} + \frac{1}{2} \right)$$

$$= \sum_{\underline{k},s} \hbar \omega_s(\underline{k}) \left(\hat{a}^+_{\underline{k},s} \hat{a}_{\underline{k},s} + \frac{1}{2} \right)$$

Zum Zweigindex:

Es gibt ~~[illegible]~~ akustische Moden ($\lim_{k\to 0} \omega(k) = 0$), d.h. Schallwellen (gleichsinnige Bewegung benachbarter Atome) und ~~[illegible]~~ optische Moden ($\lim_{k\to 0} \omega(k) \neq 0$). Diese treten nur auf, wenn man mehr als 1 Atom pro Einheitszelle hat (gegenphasige Bewegung)

IV.2 Quantisierung des freien elektromagnetischen Feldes

Klass. Beschreibung elektromagnet. Felder: Maxwell-Gl. (SI-Einheiten)

$$\nabla \cdot \underline{E} = \frac{\rho(\underline{r},t)}{\varepsilon_0} \qquad \nabla \times \underline{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\underline{B}$$

$$\nabla \cdot \underline{B} = 0 \qquad \nabla \times \underline{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t}\underline{E} + \mu_0 \underline{j}(\underline{r},t)$$

mit $\underline{E} = E(\underline{r},t)$, $\underline{B} = \underline{B}(\underline{r},t)$, $\mu_0 \varepsilon_0 = \frac{1}{c^2}$

Bemerkungen:

Wir benötigen im folgenden mikroskopische E-Dynamik, also keine makroskopischen (raumgemittelten) Felder $\underline{D}$, $\underline{H}$

$\Leftrightarrow$ keine Polarisationsladungen, keine Magnetisierung

und $\underline{D} = \varepsilon_0 \underline{E}$, $\underline{H} = (\mu_0)^{-1} \underline{B}$

Umschreiben in Potentialgleichungen:

$$\underline{B} = \nabla \times \underline{A}, \quad \underline{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial}{\partial t}\underline{A}$$

Einsetzen

(a) $\Delta\phi + \nabla\cdot\dot{\underline{A}} = -\rho/\varepsilon_0$

$\nabla\cdot(\nabla\times\underline{A}) = 0$ (trivial) div rot ... = 0

$\nabla\times(\underbrace{-\nabla\phi}_{\text{Null (rot grad)}} - \frac{\partial}{\partial t}\underline{A}) = -\frac{\partial}{\partial t}\underline{B}$ trivial

(b) $\nabla\times(\nabla\times\underline{A}) = \frac{1}{c^2}(-\nabla\dot{\phi} - \ddot{\underline{A}}) + \mu_0 \underline{j}$

Entkoppeln durch Eichtransformation:

$\underline{A} \to \underline{A} + \nabla\chi(\underline{r},t)\,,\quad \phi \to \phi - \dot{\chi}$

läßt $\underline{E}, \underline{B}$ invariant

Lorentz-Eichung: $\nabla\cdot\underline{A} + \frac{1}{c^2}\dot{\phi} = 0$

aus (a): $\Delta\phi - \frac{1}{c^2}\ddot{\phi} = -\frac{\rho(\underline{r},t)}{\varepsilon_0}$

aus (b): $\Delta\underline{A} - \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} = -\mu_0 \underline{j}(\underline{r},t)$

nach Umschreiben von (b) in
$-\Delta\underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} + \nabla(\nabla\cdot\underline{A} + \frac{1}{c^2}\dot{\phi}) = \mu_0 \underline{j}$

Dies ist die relativistisch kovariante Eichung! Wir haben sie auch in Kap. I bei der relativist. QM benutzt!

Coulomb-Eichung:

Wähle $\chi(\underline{r},t)$ so, dass $\operatorname{div}\underline{A} = \nabla\cdot\underline{A} = 0$

$\Rightarrow \Delta\phi = -\rho/\varepsilon_0$ wie in der Elektrostatik!

$-\Delta\underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} + \frac{1}{c^2}\nabla\dot{\phi} = \mu_0 \underline{j}(\underline{r},t)$

Wir spezialisieren zunächst auf den Fall, dass $\rho = \underline{j} = 0$ (also verschwindende Ladungs- und Stromdichte)

$\Rightarrow$ Potentialgleichung in Coulomb-Eichung

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta \phi &= 0 \\ -\Delta \underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} &= 0 \end{aligned}}$$

und $\nabla \cdot \underline{A} = 0$

Beachte:
Aufgrund der Coulomb-Eichung ist ϕ für alle Zeiten Null, auch wenn bei $t=0$ noch Ladungen vorhanden waren! Denn: es gibt ~~…~~ (in ϕ) keine Retardierungseffekte, anders als in der Lorentzeichung!)

$\Rightarrow$ Die allein interessierende Gleichung ist also die für das Vektorpotential

$$-\Delta \underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} = 0$$

Lösung: Entwicklung nach Eigenmoden

$$\underline{A}(\underline{r},t) = \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_k \varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(a_{\underline{k}} \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{-i\omega_k t} + a_{\underline{k}}^* \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r}) e^{i\omega_k t}\right)$$