Ludwig-Maximilians-Universität München, Department für Physik
Prof. Dr. D. Lüst

4. Übung zur Quantenmechanik II (T5)

(Abgabe 12.11.2007)

13. Aufgabe: Eindimensionale Streuung

Diese Aufgabe dient der Wiederholung der eindimensionalen Streutheorie, die bereits in QM1 besprochen wurde.

a) Die Wronski-Determinante für zwei Funktionen $\phi_1(x)$ und $\phi_2(x)$ ist definiert durch

$$W(\phi_1(x), \phi_2(x)) \equiv \det \begin{pmatrix} \phi_1(x) & \partial_x \phi_1(x) \\ \phi_2(x) & \partial_x \phi_2(x) \end{pmatrix} . \tag{1}$$

Nehmen Sie an, daß die $\phi_i(x)$ ($i \in \{1, 2\}$) Lösungen der Differentialgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) - E_i \right] \phi_i = 0 \tag{2}$$

sind. Zeigen Sie damit, daß $\partial_x W(\phi_1(x), \phi_2(x)) = \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - E_2)\phi_1\phi_2$. Was folgt für $E_1 = E_2$?

b) Betrachten Sie eine einlaufende ebene Welle $\phi_k(x)$ mit Wellenzahl k, die an einem eindimensionalen lokalisierten Potential $V(x)$ gestreut wird. Lokalisiert bedeutet hier, daß das Potential nur in einem endlichen Bereich der x-Achse ($|x| < L$) verschieden von Null ist. Zeigen Sie daß sich Reflexionswahrscheinlichkeit R_k und Transmissionswahrscheinlichkeit T_k zu 1 addieren. (Hinweis: Betrachten Sie $W(\phi_k(x), \phi_k^*(x))$ und verwenden Sie das Ergebnis aus a).)

14. Aufgabe: Lineare Antwort

In der Vorlesung wurde die lineare Antwortfunktion $\chi^n_{A,B}$ hergeleitet.

a) Bestimmen Sie die Fouriertransformierte unter Benutzung von

$$\Theta(t) = -\lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\epsilon} \tag{3}$$

und zeigen Sie, daß das auf die aus der Vorlesung bekannte Formel

$$\chi^n_{A,B}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \lim_{\epsilon \to 0} \sum_m \left[\frac{\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle}{\omega_{mn} - \omega - i\epsilon} - \frac{\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle}{\omega_{nm} - \omega - i\epsilon} \right] \tag{4}$$

führt, wobei $\omega_{mn} = (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})/\hbar$ gilt.

b) Bei der Fouriertransformation von $\langle \delta A \rangle_t^n$ muß man die Konvolution

$$\langle \delta A \rangle_t^n = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \, \chi_{A,B}^n(t - t_1) b(t_1) \tag{5}$$

transformieren. Zeigen Sie generell (d.h. für beliebige Dimension), daß die Fouriertransformation einer Konvolution

$$C \star D(\vec{r}) \equiv \int d^n r' \, C(\vec{r}\,') D(\vec{r} - \vec{r}\,') \tag{6}$$

ein Produkt ergibt.

15. Aufgabe: Polarisierbarkeit

Wir wollen jetzt die Formel (4) auf den Fall der Polarisierbarkeit von Atomen in einem zeitlich veränderlichen elektrischen Feld (in z-Richtung) anwenden. Der Störoperator ist daher

$$\hat{V} = q\hat{z}E(t) \; , \tag{7}$$

wobei der Dipoloperator $D_z = q\hat{z}$ dem Operator B aus der Vorlesung entspricht, während $E(t)$ die zeitlich variierende Stärke der Störung angibt, die im allgemeinen Fall in der Vorlesung mit $b(t)$ bezeichnet wurde. Diese Störung führt zu einem induzierten Dipolmoment $\langle \delta D_z \rangle_t^n(\omega) = \chi_{D_z D_z}^n(\omega) E(\omega)$ (d.h. auch $A = D_z$). Die lineare Antwortfunktion $\chi_{D_z D_z}^n(\omega)$ wird in diesem Fall als Polarisierbarkeit bezeichnet.

a) Zeigen Sie

$$\chi_{D_z D_z}^n(\omega) = \lim_{\epsilon \to 0} \left[\frac{q^2}{m} \sum_{n'} \frac{f_{n'n}}{\omega_{n'n}^2 - (\omega + i\epsilon)^2} \right] \tag{8}$$

mit der Elektronmasse m und den sogenannten Oszillatorstärken

$$f_{n'n} \equiv \frac{2m}{q^2 \hbar} \omega_{n'n} |\langle n' | D_z | n \rangle|^2 \; . \tag{9}$$

b) Betrachten Sie nun die Formel (8) für den Grundzustand ($n = 0$). Sie gilt streng genommen nicht in der Nähe einer Resonanzfrequenz, d.h. für $\omega \sim \omega_{n',0}$. In dem Fall können höhere Energiezustände $|n'\rangle$ angeregt werden, die allerdings eine endliche Lebensdauer $\Gamma_{n'}^{-1}$ haben. Dies kann man berücksichtigen, indem man die Energie $E_{n'}$ formal komplexifiziert, d.h. $E_{n'} \to \tilde{E}_{n'} = E_{n'} - \frac{1}{2} i\hbar\Gamma_{n'}$ (so daß für die Zeitabhängigkeit eines angeregten Zustands $e^{-i\tilde{E}_{n'}t/\hbar} = e^{-iE_{n'}t/\hbar} e^{-\frac{1}{2}\Gamma_{n'}t}$ gilt). Nach Einführung von $\Gamma_{n'}$ in (4) kann man ϵ gegen Null gehen lassen.

Was ergibt sich nun im Fall $\omega \sim \omega_{k,0}$ für die Polarisierbarkeit? (Hinweis: In der Summe in (4) können alle Terme vernachlässigt werden, die nicht in Resonanz sind.)

c) Aus der Elektrodynamik ist bekannt, daß die Polarisierbarkeit die dielektrische Konstante $\mathcal{E}$ bestimmt:

$$\mathcal{E} = 1 + C\chi^0_{DzDz} \ , \tag{10}$$

wobei C eine Konstante ist, die proportional zur Anzahl der Atome pro Volumen ist. Bestimmen und skizzieren Sie Real- und Imaginärteil von $\mathcal{E}$.

Zur *Interpretation*: Die Dielektrizitätskonstante ist über $\mathcal{E} = (\tilde{n} + i\kappa)^2 = \tilde{n}^2 - \kappa^2 + 2i\tilde{n}\kappa$ mit dem Brechungsindex $\tilde{n}$ und dem Absorptionskoeffizienten κ verknüpft. Falls das zeitabhängige elektrische Feld durch eine einfallende ebene Welle $E_z = E_0 e^{i(kx-\omega t)}$ verursacht wird, gilt im Medium $E_z = E_0 e^{-\kappa kx} e^{i(\tilde{n}kx-\omega t)}$, d.h. $\tilde{n}$ bestimmt die Dispersionsrelation und κ die Absorption.

16. Aufgabe: Zweidimensionale Greensche Funktion

Betrachten Sie die Streuung einer einlaufenden ebenen Welle $e^{i(\vec{p}\vec{r}-\omega t)}$ in zwei Dimensionen an einem lokalisierten Potential $V(\vec{r})$. Die ebene Welle ist ein Energieeigenzustand des freien Hamiltonoperators und die Energie $\hbar\omega = \hbar^2 p^2/(2m)$ ändert sich bei einer elastischen Streuung nicht. Daher reduziert sich die Schrödinger Gleichung auf ihre zeitunabhängige Form

$$(\Delta_r + p^2)\,\psi(\vec{r}) = v(\vec{r})\psi(\vec{r}) \ , \quad \text{mit } \ v(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r}) \ . \tag{11}$$

Die Lösung kann durch die zweidimensionale Greensche Funktion $G(\vec{r}-\vec{r}\,')$ gemäß

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \int d^2r' G(\vec{r}-\vec{r}\,')v(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') \ , \tag{12}$$

ausgedrückt werden, wobei $G(\vec{r}-\vec{r}\,')$ die Gleichung

$$(\Delta_r + p^2)\,G(\vec{r}-\vec{r}\,') = \delta^{(2)}(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{13}$$

erfüllt und $\psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\vec{r}}$ gleich der einlaufenden Welle ist. Bis auf einen konstanten Faktor entspricht die Greensche Funktion der in der Vorlesung besprochenen Resolvente. Ihre Fouriertransformierte ist daher auch gegeben durch

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{p^2 - k^2} \ , \quad \text{mit } \ k^2 = k_1^2 + k_2^2 \ . \tag{14}$$

Bestimmen Sie hieraus die Greensche Funktion in Ortsdarstellung durch Fouriertransformation. Diskutieren Sie ihr Verhalten für kleine und große

Werte von $R = |\vec{r} - \vec{r}'|$. (Hinweise: Für die Diskussion des asymptotischen Verhaltens werden Sie Eigenschaften der Besselfunktionen benötigen, die Sie entweder mit Hilfe von `Maple`, einer Formelsammlung (z.B. I. S. Gradshteyn, J. M. Ryzhik: "Table of Integrals, Series, and Products" oder Milton Abramowitz, Irene A. Stegun: "Handbook of Mathematical Functions") oder im Internet finden können. Ansonsten werden Sie noch folgende Formeln brauchen:

$$\begin{aligned} 2\pi J_0(z) &= \int_0^{2\pi} e^{iz\cos\vartheta} d\vartheta \\ K_0(\alpha R) &= \int_0^{\infty} dk \, \frac{J_0(kR)}{k^2+\alpha^2} k \ , \quad \text{und} \ \ K_0(z) = \frac{\pi i}{2} H_0^{(1)}(iz) \ , \end{aligned} \tag{15}$$

wobei J_0 eine Besselfunktion der ersten Art, K_0 eine modifizierte Besselfunktion und $H_0^{(1)}$ eine Hankelfunktion ist (s. z.B. `http://en.wikipedia.org/wiki/Bessel_function` oder eine der anderen oben angegebenen Quellen).)