Vorrechnen des Übungsblattes: Freitag, 02.12. und Montag 05.12.2011

15. Wahrscheinlichkeitsamplitude für die quantenmechanische Zweiteilchen-Streuung

In dieser Aufgabe wollen wir einen störungstheoretischen Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $w_{\mathrm{f\,i}}$ der Zweiteilchenstreuung in einem kurzreichweitigen Wechselwirkungspotential $V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$ angeben. Der Gesamthamiltonian $H = H_0 + V$ beinhaltet neben dem Wechselwirkungspotential auch den Hamiltonian $H_0 = \frac{1}{2m}(\vec{p}_1^{\,2} + \vec{p}_2^{\,2})$ der freien Zeitentwicklung der beiden Teilchen. Wir nehmen an, dass der Anfangszustand der beiden Teilchen zur Zeit $t_0 = -T$ der Impulseigenzustand $|\psi(-T)\rangle = |\psi_{\mathrm{i}}\rangle = |\vec{p}_1, \vec{p}_2\rangle$ ist und interessieren uns dafür, mit welcher Wahrscheinlichkeit die beiden Teilchen nach der Streuung zur Zeit $t = T$ im Impulseigenzustand $|\psi(T)\rangle = |\psi_{\mathrm{f}}\rangle = |\vec{p}_1^{\,\prime}, \vec{p}_2^{\,\prime}\rangle$ zu finden sind. Dabei gilt $H_0|\psi_{\mathrm{i,f}}\rangle = E_{\mathrm{i,f}}|\psi_{\mathrm{i,f}}\rangle$, wobei $E_{\mathrm{i}} = \frac{1}{2m}(\vec{p}_1^{\,2} + \vec{p}_2^{\,2})$ und $E_{\mathrm{f}} = \frac{1}{2m}(\vec{p}_1^{\,\prime 2} + \vec{p}_2^{\,\prime 2})$ die zugehörigen Energieeigenwerte des freien Hamiltonians sind. Ferner seien mit $|\psi_k\rangle$ die übrigen Energieeigenfunktionen zu H_0 bezeichnet, für die die Vollständigkeitsrelation $\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \mathbb{1}$ gilt.

Bezeichnen wir mit $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$ den Zeitentwicklungsoperator der gesamten Dynamik, so lautet die Wahrscheinlichkeitsamplitude dieses Streuprozesses

$$w_{\mathrm{f\,i}}(T) = \langle\psi_{\mathrm{f}}|\, U(T, -T)\, |\psi_{\mathrm{i}}\rangle = \left\langle \vec{p}_1^{\,\prime}, \vec{p}_2^{\,\prime} \right| U(T, -T) \left| \vec{p}_1, \vec{p}_2 \right\rangle . \tag{1}$$

Im Folgenden wollen wir die beiden führenden Terme dieser Wahrscheinlichkeitsamplitude in Störungstheorie bestimmen und zeigen, dass im Grenzfall $T \to \infty$ die Energieerhaltung $E_{\mathrm{f}} = E_{\mathrm{i}}$ folgt.

(a) Zunächst ist es sinnvoll die triviale, freie Zeitentwicklung abzuspalten, indem man das Problem im sogenannten Wechselwirkungsbild betrachtet. Dazu definieren wir die Wellenfunktion $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ im Wechselwirkungsbild über $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\tilde{\psi}(t)\rangle$. Leiten Sie hieraus die Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{V}(t)\,|\tilde{\psi}(t)\rangle \tag{2}$$

ab, wobei $\tilde{V}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\, V\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$.

(1 Punkt)

(b) Verifizieren Sie, dass $|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{U}(t, t_0)|\tilde{\psi}(t_0)\rangle$ mit $\tilde{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{U}^{(n)}(t, t_0)$ und

$$\tilde{U}^{(n)}(t, t_0) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, \tilde{V}(t_1)\, \tilde{V}(t_2) \ldots \tilde{V}(t_n) \tag{3}$$

eine formale Lösung der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild, Glg. (2) (für beliebige Anfangswellenfunktionen $|\tilde{\psi}(t_0)\rangle$) ist.

(2 Punkte)

(c) Zeigen Sie, dass die sogenannte „diffraction function" (Beugungsfunktion, sinc-Funktion)

$$\delta_{(\alpha)}(x) = \frac{\sin(\alpha x)}{\pi x}$$

in der Form $\delta_{(\alpha)}(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\alpha}^{\alpha} e^{ix\tau}\, d\tau$ geschrieben werden kann und somit im Grenzfall $\alpha \to \infty$ gegen die δ-Funktion strebt.

(1 Punkt)

(d) Für kurze Wechselwirkungszeiten genügt es, die Terme $\tilde{U}^{(1)}(t, t_0)$ und $\tilde{U}^{(2)}(t, t_0)$ in der formalen Lösung der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild zu berücksichtigen und alle höheren Ordnungen zu vernachlässigen. Leiten Sie unter dieser Annahme mit $\langle\psi_{\mathrm{f}}|\psi_{\mathrm{i}}\rangle = \delta_{\mathrm{fi}}$ den Ausdruck

$$w_{\mathrm{f\,i}}(T) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}})T}\left[\delta_{\mathrm{fi}} + \langle\psi_{\mathrm{f}}|\, \tilde{U}^{(1)}(T, -T)\, |\psi_{\mathrm{i}}\rangle + \langle\psi_{\mathrm{f}}|\, \tilde{U}^{(2)}(T, -T)\, |\psi_{\mathrm{i}}\rangle\right] ,$$

für die Wahrscheinlichkeitsamplitude (1) ab, und zeigen Sie, dass

$$\langle\psi_{\mathrm{f}}|\, \tilde{U}^{(1)}(T, -T)\, |\psi_{\mathrm{i}}\rangle = -2\pi i\, V_{\mathrm{fi}}\, \delta_{(T/\hbar)}(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}}) ,$$

wobei wir die Matrixelemente des Wechselwirkungspotentials mit $V_{\mathrm{fi}} = \langle\psi_{\mathrm{f}}|\, V\, |\psi_{\mathrm{i}}\rangle$ abgekürzt haben.

(2 Punkte)

(e) Zeigen Sie entsprechend für $T \gg 1$, dass

$$\langle\psi_{\mathrm{f}}|\, \tilde{U}^{(2)}(T, -T)\, |\psi_{\mathrm{i}}\rangle \approx -2\pi i \left[\lim_{\varepsilon\to 0+} \sum_k \frac{V_{\mathrm{fk}}\, V_{\mathrm{ki}}}{E_{\mathrm{i}} - E_{\mathrm{k}} + i\varepsilon}\right] \delta_{(T/\hbar)}(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}})$$

indem Sie die folgende Relation verwenden

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_k(t_1 - t_2)}\, \Theta(t_1 - t_2) = -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\varepsilon\to 0+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E(t_1 - t_2)}}{E - E_k + i\varepsilon}\, dE .$$

(3 Punkte)

(f) Schließlich definieren wir die Übergangsmatrix $\mathcal{T}_{\mathrm{f\,i}}$ über den Zusammenhang

$$w_{\mathrm{f\,i}}(T) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}})T}\left[\delta_{\mathrm{fi}} - 2\pi i\, \mathcal{T}_{\mathrm{f\,i}}\, \delta_{(T/\hbar)}(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}})\right] .$$

Leiten Sie mit Hilfe der obigen Resultate ($T \gg 1$) und unter Verwendung der formalen Schreibweise

$$(E \cdot \mathbb{1} - \hat{H}_0 + i\varepsilon \cdot \mathbb{1})^{-1} = \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}$$

den folgenden Ausdruck für die Übergangsmatrix ab

$$\mathcal{T}_{\mathrm{f\,i}} = \lim_{\varepsilon\to 0+} \langle\psi_{\mathrm{f}}|\, V + V\, \frac{1}{E_{\mathrm{i}} - H_0 + i\varepsilon}\, V\, |\psi_{\mathrm{i}}\rangle .$$

Begründen Sie kurz, warum im Grenzfall $T \to \infty$ die Energieerhaltung $E_{\mathrm{f}} = E_{\mathrm{i}}$ erfüllt ist.

(2 Punkte)

16. Stationäre Lösung und Erhaltungssätze der Boltzmann-Gleichung

Die aus der Vorlesung bekannte Boltzmann-Gleichung für geschwindigkeitsunabhängige, äußere Kräfte $\vec{F}(\vec{x})$ lautet

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{p_{1,i}}{m}\frac{\partial f_1}{\partial x_i} + F_i\,\frac{\partial f_1}{\partial p_{1,i}}\right] = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_2 \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_1' \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_2'\, W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')\,(f_1'\,f_2' - f_1\,f_2)\ ,$$

wobei wir für die Verteilungsfunktion die Abkürzungen $f_j = f(\vec{x},\vec{p}_j,t)$, und $f_j' = f(\vec{x},\vec{p}_j{}',t)$ mit $j\in\{1,2\}$ eingeführt haben. Die Übergangswahrscheinlichkeit $W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')$ ist dabei proportional zum differentiellen Streuquerschnitt $\sigma(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')$ und ergibt sich laut Vorlesung gemäß

$$W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}') = |\mathcal{T}_{\mathrm{fi}}|^2\cdot\delta^{(3)}(\vec{p}_1+\vec{p}_2-\vec{p}_1{}'-\vec{p}_2{}')\cdot\delta\left(\tfrac{1}{2m}\left(\vec{p}_1^{\,2}+\vec{p}_2^{\,2}-\vec{p}_1{}'^{\,2}-\vec{p}_2{}'^{\,2}\right)\right)\ .$$

Sie erfüllt die folgenden Symmetrieeigenschaften:

(i) Vertauschbarkeit der Teilchen: $W(\vec{p}_2,\vec{p}_1|\vec{p}_2{}',\vec{p}_1{}') = W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')$

(ii) Inversionssymmetrie: $W(-\vec{p}_1,-\vec{p}_2|-\vec{p}_1{}',-\vec{p}_2{}') = W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')$

(iii) Zeitumkehrinvarianz: $W(-\vec{p}_1{}',-\vec{p}_2{}'|-\vec{p}_1,-\vec{p}_2) = W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')$.

(a) Zeigen Sie durch explizites Einsetzen in die Boltzmann-Gleichung, dass für eine konservative Kraft $\vec{F}(\vec{x}) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}}V(\vec{x})$ der Ausdruck

$$f(\vec{x},\vec{p}_1) = f_0\cdot\left(\frac{1}{2\pi\,m\,kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{kT}\left(\frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m}+V(\vec{x})\right)}$$

eine Lösung der stationären Boltzmann-Gleichung ($\partial f_1/\partial t = 0$) ist. Bestimmen Sie die zugehörige Verteilungsfunktion $f(\vec{x},\vec{p}_1)$ mit Normierungskonstante f_0 für das spezielle Potential

$$V(\vec{x}) = V(x,y,z) = \begin{cases} g\,z + \frac{m}{2}\omega^2(x^2+y^2) & \forall\quad z>0 \\ \infty & \forall\quad z<0 \end{cases}$$

wobei $g>0$, und $\omega>0$.

(2 Punkte)

(b) Sei $\alpha = \alpha(\vec{p})$ eine beliebige Funktion des Impulses. Beweisen Sie mit Hilfe der Symmetrieeigenschaften (i) bis (iii), dass

$$\begin{aligned}&\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_1\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_2\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_1'\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_2'\; W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')\cdot(f_1'\,f_2'-f_1\,f_2)\cdot\alpha_1 \\ &= \frac{1}{4}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_1\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_2\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_1'\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p_2'\; W(\vec{p}_1,\vec{p}_2|\vec{p}_1{}',\vec{p}_2{}')\cdot(f_1'\,f_2'-f_1\,f_2)\cdot(\alpha_1+\alpha_2-\alpha_1'-\alpha_2')\ ,\end{aligned}$$

wobei wir die Abkürzungen $\alpha_j = \alpha(\vec{p}_j)$ und $\alpha_j' = \alpha(\vec{p}_j{}')$ mit $j\in\{1,2\}$ verwendet haben.

(2 Punkte)

(c) Leiten Sie ausgehend von $\alpha(\vec{p}) = 1$ und der Boltzmann-Gleichung die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \vec{\nabla}_{\vec{x}}(\varrho\,\vec{u}) = 0$$

ab. Dabei ist die Massendichte durch $\varrho(\vec{x},t) = m\int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p$ und die mittlere, lokale Geschwindigkeit durch

$$\vec{u}(\vec{x},t) = \left\langle\frac{\vec{p}}{m}\right\rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{\vec{p}}{m}\right)f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p}{\int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p}$$

definiert. Beweisen Sie damit, dass die Normierung der Verteilungsfunktion

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\; f(\vec{x},\vec{p},t) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\; f(\vec{x},\vec{p},0) = N$$

eine Erhaltungsgröße der Boltzmann-Gleichung ist.

(3 Punkte)

(d) Leiten Sie entsprechend für $\alpha_{(i)}(\vec{p}) = p_i$ mit $i\in\{1,2,3\}$ die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\big(\varrho\,u_i\big) + \sum_{k=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_k}\big(P_{ik}+\varrho\,u_iu_k\big) = \frac{\varrho}{m}F_i \qquad (4)$$

her, wobei wir den sogenannten (lokalen) Drucktensor

$$P_{ik}(\vec{x},t) = \varrho\,\langle\left(\tfrac{p_i}{m}-u_i\right)\left(\tfrac{p_k}{m}-u_k\right)\rangle = m\int_{\mathbb{R}^3}\left(\tfrac{p_i}{m}-u_i\right)\left(\tfrac{p_k}{m}-u_k\right)f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p$$

eingeführt haben. Zeigen Sie damit, dass die Gesamtimpuls $\vec{P}(t) = \int_{\mathbb{R}^3}\varrho(\vec{x},t)\,\vec{u}(\vec{x},t)\,d^3x$ eine Erhaltungsgröße ist, sofern die äußeren Kräfte $\vec{F}(\vec{x})$ verschwinden. Bringen Sie desweiteren Glg. (4) in die äquivalente Form

$$\varrho\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{k=1}^{3}u_k\,\frac{\partial}{\partial x_k}\right)u_i = -\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial P_{ik}}{\partial x_k}+\frac{\varrho}{m}F_i\ .$$

Bemerkung: Für den Fall eines isotropen Drucktensors $P_{ik} = p\,\delta_{ik}$ und einer verschwindenden äußeren Kraft $\vec{F}(\vec{x})$ erhalten wir hieraus die aus der Hydrodynamik bekannte *Euler-Gleichung*.

(3 Punkte)

(e) Schließlich führen wir noch die Energiedichte

$$E(\vec{x},t) = \frac{\varrho}{m}\left\langle\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\right)f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p$$

ein. Zeigen Sie, das sich diese gemäß $E(\vec{x},t) = \frac{\varrho}{2}\,\vec{u}^{\,2}(\vec{x},t) + \frac{\varrho}{m}\,\varepsilon(\vec{x},t)$ zerlegen läßt, wobei $\frac{\varrho}{2}\,\vec{u}^{\,2}(\vec{x},t)$ die kinetische Energie der lokalen konvektiven Strömung ist, und

$$\varepsilon(\vec{x},t) = \left\langle\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{p}}{m}-\vec{u}\right)^2\right\rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^3}\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{p}}{m}-\vec{u}\right)^2 f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p}{\int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p}$$

die innere Energie pro Teilchen (mittlere thermische Energie) in dem mit der Geschwindigkeit $\vec{u}(\vec{x},t)$ mitgeführten lokalen Bezugssystem beschreibt.

(1 Punkt)

(f) Leiten Sie nun ausgehend von $\alpha(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ die Relation

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_k}\big(E\,u_k + \sum_{i=1}^{3} P_{ki}\,u_i + J_k\big) = \frac{\varrho}{m}\sum_{k=1}^{3} u_k\,F_k$$

für die zeitliche Änderung der Energiedichte $E(\vec{x},t)$ her. Hierbei bezeichnet

$$\vec{J}(\vec{x},t) = \frac{\varrho}{m}\left\langle \left(\frac{\vec{p}}{m} - \vec{u}\right)\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{p}}{m} - \vec{u}\right)^2 \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\vec{p}}{m} - \vec{u}\right)\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{p}}{m} - \vec{u}\right)^2 f(\vec{x},\vec{p},t)\,d^3p$$

die sogenannte Wärmestromdichte. Unter welchen Umständen folgt, dass die Energiedichte während der Zeitentwicklung der Verteilungsfunktion entsprechend der Boltzmann-Gleichung eine Erhaltungsgröße ist?

(3 Punkte)