

Computermethoden der Quantenphysik

Reinhard Alkofer

Institut für Physik, Theoretische Physik, Universität Graz

27. April 2005

Inhaltsverzeichnis

1	Stationäre Schrödingergleichung I	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Sphärische symmetrische Diskretisierung	2
1.3	Entwicklung der zu bestimmenden Lösung	3
1.4	Numerische Methode	4
1.4.1	Bestimmung der Nullstellen der sphärischen Besselfunktionen	4
1.4.2	Numerische Integration	4
1.4.3	Numerische Diagonalisation	5
1.5	Streuquerschnitte	6
1.6	Aufgaben	8
1.7	Literatur	9
2	Stationäre Schrödingergleichung II	11
2.1	Problemstellung	11
2.2	Der radiale Anteil der Schrödingergleichung als Differentialgleichung	11
2.3	Runge-Kutta-Verfahren mit Schrittweiten- steuerung	12
2.3.1	Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung	12
2.3.2	Schrittweitensteuerung	13
2.4	Aufgaben	15
2.5	Literatur	15
3	Lippmann-Schwinger-Gleichung:	17
3.1	Problemstellung	17
3.2	Ableitung der Lippmann-Schwinger-Gleichung	17
3.3	Der Übergangsoperator T	19
3.4	Die Integralgleichung für K	20
3.5	Numerische Methode	22
3.5.1	Numerische Integration	22
3.5.2	Lösung durch Iteration	23
3.5.3	Lösung durch Matrixinversion	23
3.6	Aufgaben	25
3.7	Literatur	26

Kapitel 1

Stationäre Schrödingergleichung I

Entwicklung in ein vollständiges Funktionensystem

1.1 Problemstellung

Viele Phänomene der Physik lassen sich durch die klassische Mechanik und Elektrodynamik nicht erklären. So bildet die Quantenmechanik die Grundlage für die Atomphysik. Aber auch die Physik makroskopischer Körper benötigt die Quantentheorie, um die Struktur und Stabilität von Festkörpern, Flüssigkeiten, Gasen und Plasmen widerspruchsfrei zu erklären. Kern- und Elementarteilchenphysik bedürfen ebenfalls quantentheoretischer Methoden, und die Quantenoptik hat sich in den letzten Jahren von der Fortführung der klassischen Optik zu einem eigenständigen Forschungsgebiet weiterentwickelt. Die einfachsten physikalisch relevanten quantentheoretischen Probleme befassen sich mit stabilen nicht-relativistischen Teilchen in einem zeitunabhängigen Potential. Diese werden durch die stationäre Schrödingergleichung beschrieben.

Eine mögliche Methode zur Lösung der stationären Schrödingergleichung besteht in der Diagonalisation des Hamiltonoperators H . Im Rahmen dieses Projekts sollen nur sphärisch symmetrische Potentiale betrachtet werden. Der Hamiltonoperator wird dann in einer geeigneten Basis des Hilbertraums blockdiagonal. Die diesbezügliche numerische Aufgabe gliedert sich in die Berechnung der Nullstellen von sphärischen Besselfunktionen, der Bestimmung der Matrixelemente des Hamiltonoperators durch numerische Integration und die Diagonalisation der so entstehenden (trunkierten) Hamiltonmatrix. Die letztere liefert neben den Eigenenergien E_α die Eigenzustände $|\alpha\rangle$ und somit die Wellenfunktionen $\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$. Mit diesen können dann alle Observablen berechnet werden.

Sei $|n\rangle$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$ ein vollständiges Orthonormalsystem im Hilbertraum unseres quantenmechanischen Problems. Die Eigenzustände $|\alpha\rangle$ mit $H|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$ können dann durch Einschieben einer Eins dargestellt werden:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n\alpha} |n\rangle. \quad (1.1)$$

Die Wellenfunktionen sind dann durch die Koeffizienten $c_{n\alpha} = \langle n|\alpha \rangle$ bestimmt,

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n\alpha} \langle x|n \rangle. \quad (1.2)$$

Durch Einschieben der gleichen Eins und Linksmultiplikation mit einem Zustand $\langle m|$ erhält man aus der Eigenwertgleichung $H|\alpha \rangle = E_\alpha|\alpha \rangle$ die Beziehung

$$\sum_{n=1}^{\infty} \langle m|H|n \rangle c_{n\alpha} = E_\alpha \langle m|\alpha \rangle \quad (1.3)$$

und somit für festgehaltenes α das (unendlich-dimensionale) Eigenwertproblem für die Matrix $H_{mn} := \langle m|H|n \rangle$

$$\sum_{n=1}^{\infty} H_{mn} c_{n\alpha} = E_\alpha c_{m\alpha}. \quad (1.4)$$

1.2 Sphärische symmetrische Diskretisierung

Ein unendlich-dimensionales Problem kann man natürlich nicht numerisch behandeln. Wie wir sehen werden, besteht eine geeignete Näherung oft darin, sich auf N Basiszustände zu beschränken. Das Eigenwertproblem

$$\sum_{n=1}^N H_{mn} c_{n\alpha} \approx E_\alpha c_{m\alpha} \quad (1.5)$$

für $m = 1, \dots, N$ ist durch Diagonalisation der $N \times N$ -Matrix H_{mn} lösbar.

Wie gross man N wählen muss, hängt vom jeweiligen Hamiltonoperator und dem gewählten Basissystem ab. Im allgemeinen wird man die Symmetrien des zugrundeliegenden Problems ausnutzen, um eine geeignete Wahl des Basissystems zu treffen. Im folgenden werden wir nur sphärisch symmetrische Schrödingergleichungen betrachten. Somit ist es wichtig, beim Abschneiden des Basissystems den Drehimpuls l als gute Quantenzahl zu erhalten. Zur Konstruktion eines geeigneten Basissystems betrachten wir die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen in einer sphärischen Box mit Radius R . Der Winkelanteil der zugehörigen Wellenfunktion ist durch Kugelfunktionen gegeben,

$$\langle x|n = \{ilm\} \rangle \propto Y_l^m(\theta, \phi). \quad (1.6)$$

Für den Radialanteil der Wellenfunktion, $j_l(k_{il}r)$, gilt, dass er am Rand der Box ($r = R$) verschwindet:

$j_l(k_{il}R) = 0.$

(1.7)

Durch diese Bedingung werden die Impulse k_{il} diskret (quantisiert). Weiterhin sind dann die sphärischen Besselfunktionen orthogonal:

$$\int_0^R dr r^2 j_l(k_{il}r) j_l(k_{jl}r) = \delta_{ij} \frac{1}{\alpha_{il}^2} \quad (1.8)$$

mit der Normierung

$$\alpha_{jl} = \begin{cases} j\pi\sqrt{2/R^3} & \text{für } l = 0 \\ (1/j_{l-1}(k_{jl}R))\sqrt{2/R^3} & \text{für } l > 0 \end{cases}. \quad (1.9)$$

Somit sind die

$$f_{ilm}(\vec{x}) = \alpha_{il} j_l(k_{il}r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (1.10)$$

eine Orthonormalbasis in der sphärischen Box:

$$\int_{|\vec{x}| \leq R} d^3x f_{i'l'm'}^*(\vec{x}) f_{ilm}(\vec{x}) = \delta_{ii'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (1.11)$$

Diese Orthonormalbasis ist vollständig für Funktionen, die in dieser Box regulär sind und auf dem Rand verschwinden.

1.3 Entwicklung der zu bestimmenden Lösung

Die Wellenfunktion unseres Systems mit Wechselwirkung soll nun durch Entwicklung in dieser Basis konstruiert werden:

$$\psi_\alpha(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \alpha \rangle = \sum_{ilm} \langle \vec{x} | ilm \rangle \langle ilm | \alpha \rangle = \sum_{n=\{ilm\}} c_{n\alpha} f_n(\vec{x}). \quad (1.12)$$

Hierzu soll die Diagonalisierung der Matrix H_{mn} durch Symmetrien vereinfacht werden. Von den beiden Anteilen der Matrix

$$H_{mn} = \langle m | H | n \rangle = \langle m | T | n \rangle + \langle m | V | n \rangle \quad (1.13)$$

ist die kinetische Energie des Teilchens mit der Masse M , $T = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta$, per Konstruktion bereits diagonal:

$$\langle i'l'm' | T | ilm \rangle = \delta_{ii'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \frac{(\hbar c)^2}{2Mc^2} k_{il}^2. \quad (1.14)$$

Ein sphärisch symmetrisches Potential $V(r)$ führt auf die Matricelemente

$$\begin{aligned} \langle i'l'm' | V | ilm \rangle &= \int d^3x \langle i'l'm' | \vec{x} \rangle V(r) \langle \vec{x} | ilm \rangle = \\ &= \int dr r^2 V(r) \alpha_{i'l'} j_{l'}(k_{i'l'r}) \alpha_{il} j_l(k_{il}r) \int d\Omega Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \\ &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \alpha_{i'l} \alpha_{il} \int dr r^2 V(r) j_l(k_{i'l'r}) j_l(k_{il}r). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Die Matrix $H_{i'l'm' ilm} \propto \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ ist somit blockdiagonal. Dies ist der formale Ausdruck dafür, dass bei sphärischer Symmetrie die verschiedenen Drehimpulszustände nicht koppeln: Der Drehimpuls \vec{L}^2 und L_z ist erhalten.

Somit ist es ausreichend für ein fest vorgegebenes l die Matrix $H_{i' i}$ zu diagonalisieren. Hierbei ist jedoch zu berücksichtigen, dass die Zustände $(2l+1)$ -fach entartet sind, da sie von m unabhängig sind.

1.4 Numerische Methode

Die numerische Behandlung verlangt zwei Abschneideparameter:

1. Einen endlichen Radius R der Box. Dies definiert den kleinstmöglichen Impuls (Infrarot-Cutoff).
2. Die Zahl der betrachteten Zustände N . Dies definiert den größtmöglichen Impuls (Ultraviolett-Cutoff).

Die Impulse sind somit $\hbar k_{il}$ mit $j_l(k_{il}R) = 0$ und $i \leq N$.

1.4.1 Bestimmung der Nullstellen der sphärischen Besselfunktionen

Zur Berechnung der sphärischen Besselfunktionen benutzen wir die Rekursionsrelation

$$j_{l+1}(x) = \frac{2l+1}{x} j_l(x) - j_{l-1}(x), \quad (1.16)$$

in der Form allerdings nur für $x > l$. Mit den Startwerten

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \quad (1.17)$$

liefert diese Aufwärtsrekursion verlässliche Ergebnisse. Für $x < l$ ist diese Rekursionsrichtung jedoch instabil, die Abwärtsrekursion

$$j_{l-1}(x) = \frac{2l+1}{x} j_l(x) - j_{l+1}(x), \quad (1.18)$$

dagegen ist stabil. Dies nützen wir für folgenden Algorithmus: Starte mit $j_M(x) = 0$ und $\text{const.} j_{M-1}(x) = 1$ für $M \gg l$, löse Rekursion bis $j_0(x)$ und bestimme durch den bekannten Wert von $j_0(x)$ die Konstante const. . Berechne damit das benötigte $j_l(x)$.

Die Nullstellen von $j_l(x)$ liegen immer zwischen zwei Nullstellen von $j_{l-1}(x)$. Somit kennen wir vorab die Zahl der Nullstellen. Diese bestimmen wir mit dem Newton-Raphson-Verfahren iterativ, d.h. wiederhole

$$x_{i+1} = x_i - \frac{j_l(x_i)}{j'_l(x_i)} \quad (1.19)$$

bis die Nullstelle genügend genau bekannt ist. Die Ableitung berechnet man aus einer der beiden Relationen

$$j'_l(x) = j_{l-1}(x) - \frac{l+1}{x} j_l(x) = \frac{l}{x} j_l(x) - j_{l+1}(x). \quad (1.20)$$

1.4.2 Numerische Integration

Für die numerische Integration der stark oszillierenden Integranden in den Matrixelementen hat sich die einfache Trapezregel bewährt: Teile das Integrationsintervall $[0, R]$ in N_{int} äquidistante Abschnitte, $r_i = iR/N_{int}$, $i = 0, \dots, N_{int}$ und $\Delta r = R/N_{int}$, und benutze die Näherungsformel

$$\int_0^R dr f(r) = \left(\frac{1}{2} f(r_0) + \sum_{i=1}^{N_{int}-1} f(r_i) + \frac{1}{2} f(r_{N_{int}}) \right) \Delta r. \quad (1.21)$$

1.4.3 Numerische Diagonalisation

Für die numerische Diagonalisation können wir eine Jacobi-Routine benutzen. Vorgegeben ist eine symmetrische Matrix $h_{ij} = H(i, j) = \langle i | H | j \rangle$, wobei der erste Index i die Zeile und der zweite Index j die Spalte bezeichnen soll. Ziel der Diagonalisation ist es, eine orthogonale Transformation auf eine neue Basis, die Basis der Eigenvektoren zu H ,

$$H|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$$

zu finden. Dies bedeutet

$$\langle \beta | H | \alpha \rangle = \delta_{\beta\alpha} E_\alpha = \sum_{i,j} \langle \beta | i \rangle \langle i | H | j \rangle \langle j | \alpha \rangle = A^t h A \quad (1.22)$$

Dabei beinhalten die Spalten der Transformationsmatrix für diese orthogonale Transformation,

$$A_{i\alpha} = \langle i | \alpha \rangle, \quad (1.23)$$

die verschiedenen Entwicklungskoeffizienten zu einem vorgegebenem Eigenvektor α . Aus der Sicht der Matrizenrechnung suchen wir also eine orthogonale Transformationsmatrix A mit $A^t = A^{-1}$ so, dass die transformierte Matrix

$$h' = A^t h A$$

auf allen nichtdiagonalen Plätzen eine "0" aufweist. Betrachten wir als Beispiel die elementare Drehmatrix A^{pq} . Diese Matrix ist im Wesentlichen die Matrix der Identität bis auf die Elemente

$$\begin{aligned} A_{pp}^{pq} &= A_{qq}^{pq} = c = \cos \varphi \\ A_{pq}^{pq} &= -A_{qp}^{pq} = s = \sin \varphi \end{aligned} \quad (1.24)$$

Bilden wir nun

$$h' = (A^{pq})^t h A^{pq} \quad (1.25)$$

so ist $h'_{ij} = h_{ij}$ für alle Elemente bis auf solche aus den Zeilen und Spalten p und q . Für diese Elemente gilt

$$\begin{aligned} h'_{pp} &= c^2 h_{pp} + s^2 h_{qq} - 2sc h_{pq}, \\ h'_{qq} &= c^2 h_{qq} + s^2 h_{pp} + 2sc h_{pq}, \\ h'_{pq} = h'_{qp} &= (c^2 - s^2) h_{qp} + sc (h_{pp} - h_{qq}). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Für die anderen Elementen in diesen Zeilen und Spalten ($i \neq q$ und $i \neq p$) gilt

$$\begin{aligned} h'_{pi} = h'_{ip} &= c h_{ip} - s h_{iq}, \\ h'_{qi} = h'_{iq} &= c h_{iq} + s h_{ip}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Durch eine geeignete Wahl von c und s können wir die außerdiagonalen Elemente $h'_{pq} = h'_{qp}$ in (1.26) zum Verschwinden bringen. Definiert man $t := \tan \varphi = s/c$ so ergibt sich für die Hilfsgröße

$$\Theta = \frac{c^2 - s^2}{2cs} = \frac{h_{qq} - h_{pp}}{2h_{qp}}$$

die Bestimmungsgleichung

$$\begin{aligned} t^2 + 2t\Theta - 1 &= 0, \\ \Rightarrow t &= -\Theta \pm \sqrt{\Theta^2 + 1}. \end{aligned}$$

Die Elemente der Transformationsmatrix (1.24) sind somit durch

$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}}, \quad s = tc,$$

gegeben.

Wenn man nun in einem ersten Schritt das vom Absolutwert größte Nichtdiagonalelement von h durch die Transformation (1.25) zu 0 macht, so kann man leicht zeigen, dass durch diese Transformation keines der nichtdiagonalen Matrixelemente von h' vom Betrag her größer ist als das, welches gerade zu 0 gemacht wurde. Wendet man also dieses Verfahren immer wieder an, so werden die nichtdiagonalen Matrixelemente immer kleiner. Das Verfahren kann gestoppt werden, wenn alle nichtdiagonalen Matrixelemente von h' kleiner als ein vorgegebenes ϵ sind. Die gesamte Transformationsmatrix ergibt sich dann zu

$$A = A^{p_1 q_1} A^{p_2 q_2} \dots A^{p_n q_n}$$

1.5 Streuquerschnitte

Die Berechnung der Eigenenergien und der zugehörigen Wellenfunktionen mittels der Diagonalisation des Hamiltonoperators ist besonders geeignet, wenn man die Eigenschaften von gebundenen Zuständen ($E < 0$) bestimmen möchte. Allerdings lassen sich mit dieser Methode auch die Eigenenergien und Wellenfunktionen von Streuzuständen ($E > 0$) berechnen. Eine charakteristische Größe für diese Zustände ist die Streuphase. In diesem Abschnitt sind einige wesentlichen Formeln der elementaren Streutheorie zusammengefasst.

Für die Streuung an einem (kurzreichweitigen) Zentralpotential läßt sich die Wellenfunktion als Superposition einer einlaufenden ebenen Welle und einer auslaufenden Kugelwelle schreiben:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.28)$$

Hierbei hat die einfallende Welle die Dichte 1 und die Stromdichte $\hbar\vec{k}/M$, die ausfallende Welle die Dichte $|f|^2/r^2$ und die Stromdichte $(\hbar k/M)(|f|^2/r^2)\hat{r}$. Somit ist die Zahl der pro Zeiteinheit in $d\Omega$ gestreuten Teilchen

$$\frac{\hbar k}{M} |f(\Omega)|^2 d\Omega.$$

Dividiert man dies durch den Betrag des einfallenden Stroms erhält man den Streuquerschnitt

$$d\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2 d\Omega. \quad (1.29)$$

Die Richtung des einfallenden Wellenpakets bestimmt eine Symmetrieachse. Man kann das Koordinatensystem somit so legen, dass die Wellenfunktion ψ unabhängig vom Winkel ϕ wird:

$$\psi(r, \theta) = \sum_l \frac{\chi_l(r)}{r} P_l(\cos \theta); \quad f(\theta) = \sum_l f_l P_l(\cos \theta).$$

Der Vergleich von

$$e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l ((2l+1)i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r}) P_l(\cos \theta)$$

mit der asymptotischen Form

$$\chi_l \xrightarrow{r \rightarrow \infty} a_l \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

ergibt:

$$a_l = i^l \frac{(2l+1)}{k} e^{i\delta_l}; \quad f_l = \frac{(2l+1)}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l.$$

Somit gilt:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta). \quad (1.30)$$

Man erhält den differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E) = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (1.31)$$

und nach Integration über den Winkel

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad \text{mit} \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (1.32)$$

Dabei ist für ein attraktives Potential δ_l stets größer als 0.

In der Born'schen Näherung, d.h. in niedrigster Ordnung Störungstheorie, ergibt sich die Streuphase zu

$$\delta_l(E) \approx -\frac{2Mk}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr r^2 V(r) j_l^2(kr). \quad (1.33)$$

Die Streuphasen und somit die Streuquerschnitte lassen sich aus den Eigenwerten und Eigenvektoren der Hamiltonmatrix wie folgt gewinnen: Die Energie der Streulösung E_α ergibt sich aus der Diagonalisierung von H_{mn} als Eigenwert. Die zugehörige Wellenzahl ist

$$k_{\alpha,l} = \frac{\sqrt{2Mc^2 E_{\alpha,l}}}{\hbar c}. \quad (1.34)$$

Die Phasenverschiebung δ_l ergibt sich dann aus der Beziehung

$$j_l(k_{\alpha,l}R + \delta_l) = \phi(R) = 0. \quad (1.35)$$

Falls die Energie der Streulösung der i -te Eigenwert der Diagonalisierung ist, dann folgt für die Streuphase:

$$k_{\alpha,l}R + \delta_l = k_{i,l}R \quad \implies \quad \delta_l = (k_{i,l} - k_{\alpha,l})R. \quad (1.36)$$

Dabei ist für ein attraktives Potential δ_l stets größer als 0.

1.6 Aufgaben

Aufgabe 1.1:

Bestimmen Sie die Nullstellen für die sphärischen Besselfunktionen $j_l(x)$, $l = 0, 1 \dots 100$ im Intervall $[0, 100]$.

Aufgabe 1.2:

Berechnen Sie für $R = 10\text{fm}$ die Wellenzahlen k_{li} (siehe auch Aufgabe 1) und überprüfen Sie die Orthonormalität der normierten Besselfunktionen durch numerische Integration.

Aufgabe 1.3:

Diagonalisieren Sie die symmetrische $N \times N$ -Matrix $A_{ij} = (i + j)/2$ für $N = 3, 10, 100$ unter Benutzung einer Jacobi-Routine, siehe z.B. Kapitel 11.1 in Press et al., "Numerical Recipes".

(Der Quelltext ist auf dem Linux-Pool z.B. in `/home/rea/NMP/jacobi.f90` bzw. `/home/rea/NMP/jacobi.c` zu finden. Sie benötigen auch die Files `nrtype.f90` und `nrutil.f90` bzw. `nrutil.c`.)

Aufgabe 1.4:

Lösen Sie die Schrödingergleichung für die Bewegung eines Nukleons in einem Atomkern. Wählen Sie hierzu als Radius für die Box $R = 10 - 20\text{ fm}$. Die Masse des Nukleons beträgt $939\text{ MeV}/c^2$. (Hinweis: $\hbar c = 197.3\text{ MeV fm}$.)

- Berechnen Sie die Matrixelemente des Hamiltonoperators für das Oszillatorpotential $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ mit $\hbar\omega = 14\text{ MeV}$. Vergleichen Sie die aus der Diagonalisation gewonnenen Eigenwerte mit den exakten Ergebnissen $E_{nl} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega$. Plotten Sie für den Grundzustand die zugehörige Wellenfunktion.
- Betrachten Sie im weiteren das Woods-Saxon-Potential

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-r_0}{a_0}\right)}$$

mit einer Potentialtiefe $V_0 = -40\text{ MeV}$, einem Radius $r_0 = 3\text{ fm}$ und einer Oberflächendicke $a_0 = 0.5\text{ fm}$. Visualisieren Sie den Potentialverlauf. Berechnen Sie die stationären Lösungen. Plotten Sie Lösungen mit Energien $E_{nl} < 0$ und welche mit $E_{nl} > 0$ (d.h. Streulösungen).

Aufgabe 1.5 (weiterführend):

Berechnen Sie die Streuphasen $\delta_l(E)$, $l = 0, 1, 2$, für das Woods-Saxon-Potential mit den Parametern aus Aufgabe 5.4.b in Born'scher Näherung.

Unter Benutzung der in Aufgabe 5.4.b erhaltenen Streulösungen können Sie mittels der Gleichung (1.36) ebenfalls Streuphasen berechnen. Benutzen Sie diese Resultate, um den Gültigkeitsbereich der Born'schen Näherung anzugeben.

1.7 Literatur

Zur Quantenmechanik gibt es naturgemäß sehr viele Lehrbücher. Stellvertretend sei hier

- F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM I)*, Springer-Lehrbuch,

genannt.

Relationen für sphärische Besselfunktionen sind u.a. auch in

- I.N. Bronstein, *Taschenbuch der Mathematik*,
- I. Stegun und M. Abramowitz, *Handbook of Mathematical Functions*,

gegeben.

Alle hier verwendeten numerischen Methoden und Algorithmen werden in

- W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes in C++: The art of scientific computing*,

beschrieben. Von diesem Buch gibt es mehrere Versionen (Fortran, F90, C, C++, usw.).

Kapitel 2

Stationäre Schrödingergleichung II Die Schrödingergleichung als Differentialgleichung

2.1 Problemstellung

Wir haben im vorherigen Projekt festgestellt, dass die Diagonalisation des Hamiltonoperators in einer geeigneten Basis eine sehr effiziente Methode ist, Energien und Wellenfunktionen der Bindungszustände zu berechnen. Zur Bestimmung der Streuzustände braucht man jedoch grosse Basissysteme, so dass die Diagonalisationsmethode sehr schnell an Effizienz verliert. (NB: Ähnliches gilt, wenn keine Symmetrie vorliegt.)

Es erscheint naheliegend, für die Streuzustände die Schrödingergleichung als Differentialgleichung zu lösen. Wir werden sehen, dass dies wegen der Eigenschaften der Lösungen auch seine Grenzen bei hohen Streuenergien findet. Um dennoch gute Lösungen zu erzielen, werden wir aufgrund des oszillierenden Charakters der Wellenfunktionen ein Verfahren mit Schrittweitensteuerung benutzen.

2.2 Der radiale Anteil der Schrödingergleichung als Differentialgleichung

Wir betrachten weiterhin wie in Projekt 1 ein Zentralpotential.¹ Mit der Zerlegung

$$\Psi_{qlm}(r, \theta, \phi) = \psi_{ql}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (2.1)$$

erhält man (siehe z.B. die Vorlesung *Quantenmechanik I*) die Radialgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right) \psi_{ql}(r) = 0. \quad (2.2)$$

Mit den Definitionen $\chi_{ql}(r) = r\psi_{ql}(r)$ und $q(r) = \sqrt{2M(E - V(r))}/\hbar$ folgt für Streuzustände mit $E > V(r)$:

$$\boxed{\chi_{ql}''(r) = \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - q^2(r) \right) \chi_{ql}(r)} \quad (2.3)$$

¹Wir nehmen an, dass $V(r)$ schneller als $1/r$ gegen Null geht: $\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$.

Der asymptotische Wert der Wellenzahl, $\lim_{r \rightarrow \infty} q(r) = \sqrt{2ME}/\hbar =: k$, und die Streuphasen δ_l (siehe Abschnitt 1.5) charakterisieren die Lösung bei grossen r :

$$\chi_{ql}(r) \sim \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l). \quad (2.4)$$

Für ein bei $r = 0$ analytisches Potential besitzt (2.3) die allgemeine Lösung $ar^{l+1} + br^{-l}$ bei sehr kleinen r . Aus der Forderung der Normierbarkeit folgt dann $b = 0$ und somit

$$\chi_{ql}(r) \sim r^{l+1} \quad (2.5)$$

bei sehr kleinen r .

Für $V(r) = 0$ kennen wir die Lösung:

$$\psi_{kl}(r) = A j_l(kr) \quad \text{bzw.} \quad \chi_{kl}(r) = A r j_l(kr).$$

Mit den Anfangswertbedingungen $\chi(r) \rightarrow (q(r)r)^{l+1}$ bei kleinen r und einem entsprechenden $\chi'(r)$ soll die Radialwellenfunktion bis über die Reichweite des Potentials hinaus bestimmt werden. Diese Methode lässt die Normierung unbestimmt. Die Streuphasen können jedoch aus dem Verhältnis

$$\frac{\chi_{ql}(r)}{\chi'_{ql}(r)} \rightarrow \frac{1}{k} \tan(kr - l\pi/2 + \delta_l) \quad (2.6)$$

bei grossen r bestimmt werden.

NB: Bindungszustände berechnet man als Randwertproblem mit Randwerten bei $r = 0$ und grossen r als Aufintegration der Differentialgleichung von innen bis zu einem Anpassungspunkt und von außen bis zu diesem Wert von r . Dort wird über die Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion und ihrer Ableitung ein Gleichungssystem für die Normierungskoeffizienten und somit die Startwerte erzeugt und durch wiederholte Integration der Differentialgleichung gelöst (*Shooting-Verfahren*).

2.3 Runge-Kutta–Verfahren mit Schrittweitensteuerung

2.3.1 Runge-Kutta–Verfahren 4. Ordnung

Die Radialgleichung (2.3) ist eine Differentialgleichung 2. Ordnung der Gestalt $\chi''(r) = f(r)\chi(r)$. In einem ersten Schritt wird diese in zwei Differentialgleichungen 1. Ordnung umgeschrieben:

$$\chi'(r) = \eta(r), \quad (2.7)$$

$$\eta'(r) = f(r)\chi(r) := \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - q^2(r) \right) \chi(r). \quad (2.8)$$

Im zweiten Schritt wird die Radialvariable r diskretisiert. Wir betrachten zunächst ein äquidistantes Gitter mit Abstand h :

$$r_k = kh, k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

Im Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung² erfolgt die Abschätzung der linken Seite der Differentialgleichung in der Intervallmitte. Hierzu definiert man die Hilfsgrößen

$$k_1^{(1)} = h\eta(r_k) \quad k_2^{(1)} = hf(r_k)\chi(r_k) \quad (2.10)$$

$$k_1^{(2)} = h(\eta(r_k) + k_2^{(1)}/2) \quad k_2^{(2)} = hf(r_k)(\chi(r_k) + k_1^{(1)}/2) \quad (2.11)$$

und setzt dann

$$\chi(r_{k+1}) = \chi(r_k) + k_1^{(2)} + \mathcal{O}(h^3), \quad (2.12)$$

$$\eta(r_{k+1}) = \eta(r_k) + k_2^{(2)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (2.13)$$

Diese Symmetrisierung führt zur Aufhebung des Fehlers $\mathcal{O}(h^2)$.

Im Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung werden alle Koeffizienten so bestimmt, dass der Fehler einschliesslich der Ordnung $\mathcal{O}(h^4)$ weggehoben wird. Dies führt auf:

$$\chi(r_{k+1}) = \chi(r_k) + \frac{1}{6}k_1^{(1)} + \frac{1}{3}k_1^{(2)} + \frac{1}{3}k_1^{(3)} + \frac{1}{6}k_1^{(4)} + \mathcal{O}(h^5), \quad (2.14)$$

$$\eta(r_{k+1}) = \eta(r_k) + \frac{1}{6}k_2^{(1)} + \frac{1}{3}k_2^{(2)} + \frac{1}{3}k_2^{(3)} + \frac{1}{6}k_2^{(4)} + \mathcal{O}(h^5), \quad (2.15)$$

mit

$$k_1^{(1)} = h\eta(r_k) \quad k_2^{(1)} = hf(r_k)\chi(r_k) \quad (2.16)$$

$$k_1^{(2)} = h(\eta(r_k) + k_2^{(1)}/2) \quad k_2^{(2)} = hf(r_k)(\chi(r_k) + k_1^{(1)}/2) \quad (2.17)$$

$$k_1^{(3)} = h(\eta(r_k) + k_2^{(2)}/2) \quad k_2^{(3)} = hf(r_k)(\chi(r_k) + k_1^{(2)}/2) \quad (2.18)$$

$$k_1^{(4)} = h(\eta(r_k) + k_2^{(3)}) \quad k_2^{(4)} = hf(r_k)(\chi(r_k) + k_1^{(3)}). \quad (2.19)$$

2.3.2 Schrittweitensteuerung

Je nach Energie E (und Drehimpuls l) wird die Streulösung der Schrödingergleichung verschieden stark oszillieren. Ein guter numerischer Algorithmus sollte den Diskretisierungsabstand h den typischen Oszillationsperioden *lokal* anpassen, so dass h immer genügend klein genug gewählt ist. Somit muss man eine Abschätzung der Genauigkeit eines “Integrationsschritts” um $\delta r = h$ durchführen.

Die diesbezüglich einfachste Technik ist die Schrittweitenverdoppelung. Ein Schritt um $2h$ wird wie gewohnt in zwei Teilschritten um h ausgeführt, jedoch auch einmal um $\delta r = 2h$. Dies braucht dann 11 Funktionsauswertungen anstatt 8 für die beiden “halben” Schritte allein. Dieser Mehraufwand liefert eine Fehlerabschätzung, da die wirkliche Lösung mit den numerischen Lösungen einmal über

$$\chi(r + 2h) = \dots + 2h^5\delta\chi + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.20)$$

$$\eta(r + 2h) = \dots + 2h^5\delta\eta + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.21)$$

²Das aus der naiven linearen Entwicklung, $\chi(r_{k+1}) \approx \chi(r_k) + h\eta(r_k)$ und $\eta(r_{k+1}) \approx \eta(r_k) + h\chi(r_k)$, folgende Eulerverfahren ist numerisch instabil. Eine Illustration hierzu ist die Differentialgleichung $y'(x) = \sqrt{1 - y^2(x)}$, deren Lösung bei der Randbedingung $y(0) = 0$ offensichtlich $y(x) = \sin(x)$ ist. Das Eulerverfahren scheitert hier bereits am Anfang!

und im Doppelschritt über

$$\chi(r+2h) = \dots + (2h)^5 \delta\chi + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.22)$$

$$\eta(r+2h) = \dots + (2h)^5 \delta\eta + \mathcal{O}(h^6) \quad (2.23)$$

zusammenhängt, wenn wir annehmen, dass der Fehler des Verfahrens über $2h$ hinweg im wesentlichen konstant ist.

Für das Beispiel nur einer Differentialgleichung haben wir

$$y(x+2h) = y_1 + (2h)^5 \delta y \quad \text{vs.} \quad y(x+2h) = y_1 + 2h^5 \delta y,$$

wobei $\Delta_h = y_2 - y_1 \sim h^5$ die Fehlerabschätzung liefert. Wollen wir eine gewünschte Genauigkeit Δ_0 erzielen, sollten wir als zugehörige Schrittweite

$$\boxed{h_{\text{neu}} = h \left(\frac{\Delta_0}{\Delta_h} \right)^{1/5}} \quad (2.24)$$

wählen. Die Relation (2.24) dient dazu

- h zu erniedrigen, wenn $\Delta_h > \Delta_0$,
(Wichtig: Schritt nochmals ausführen!)
- h zu erhöhen, wenn $\Delta_h < \Delta_0$.

Für den Fall der Schrödingergleichung sind die Δ_h zweidimensionale Vektoren. In dem Fall verlangen wir, dass beide Einträge in diese Vektoren kleiner sind als eine vorgegebene Schranke. Eine zielführende Wahl ist

$$\Delta_0^\chi = \epsilon \chi_{\max}, \quad \Delta_0^\eta = \epsilon \eta_{\max},$$

wobei ϵ eine kleine Zahl ist (z.B. 10^{-6}), $\chi_{\max} = \max(|\chi(r)|)$ und $\eta_{\max} = \max(|\eta(r)|)$. Die letzteren beiden Größen können mit einem “Probedurchlauf” bei fester Schrittweite abgeschätzt werden.

Dem potentiellen Risiko der globalen Akkumulation von Fehlern kann man entgegenwirken, wenn man $\Delta_0^{\chi,\eta} \sim h$ wählt, d.h. wenn man als Potenz in (2.24) nicht $1/5$ sondern $1/4$ wählt. Eine pragmatische Umsetzung dieser Idee besteht darin, bei Verkleinerung der Schrittweite den größeren und bei Vergrößerung der Schrittweite den kleineren Exponenten zu wählen.

Aufgrund praktischer Erfahrung führt man noch einen Faktor S ein, den man kleiner als eins wählt, z.B. $S = 0.9$.

Die Vorschrift zur Schrittweitenänderung lautet somit:

$$\boxed{h_{\text{neu}} = S h \begin{cases} (\Delta_0/\Delta_h)^{1/5} & \text{für } \Delta_0 \geq \Delta_h \\ (\Delta_0/\Delta_h)^{1/4} & \text{für } \Delta_0 \leq \Delta_h \end{cases}} \quad (2.25)$$

2.4 Aufgaben

Aufgabe 2.1:

Lösen Sie die radiale Schrödingergleichung für $V(r) = 0$ und $k = \sqrt{2ME}/\hbar = 0.1, 1., 10\text{fm}^{-1}$, $l = 0\dots 5$, und vergleichen Sie mit der analytisch bekannten Lösung.

Aufgabe 2.2:

Lösen Sie die radiale Schrödingergleichung für das Woods-Saxon-Potential aus Aufgabe 1.4.b und

- berechnen Sie die Streuphasen $\delta_l(E)$ für $0 < E < 200\text{MeV}$ und $l = 0\dots 5$.
- plotten Sie für $E = 200\text{MeV}$ die Streuphasen als Funktion von l und vergleichen Sie mit deren Born'scher Näherung.
- plotten Sie für $E = 20\text{MeV}$ und $E = 200\text{MeV}$ den differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ als Funktion von $\cos\theta$ und vergleichen Sie mit deren Born'scher Näherung.

2.5 Literatur

Das Runge-Kutta-Verfahren mit Schrittweitenverdoppelung wird in

- W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes in C++: The art of scientific computing*,

beschrieben.

Kapitel 3

Lippmann–Schwinger–Gleichung: Die Schrödinger-Gleichung als Integralgleichung

3.1 Problemstellung

In den vorhergehenden Projekten haben wir uns mit dem zentralen Problem der Quantenmechanik, der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung, befasst. In Projekt 1 erreichten wir dies durch Darstellung des Hamiltonoperators in einem vollständigen Funktionensystem und Diagonalisation der daraus resultierenden Hamiltonmatrix. Diese Methode hat den Vorteil, dass man das ganze Spektrum niederenergetischer Zustände erhält. Insbesondere konnten wir Bindungszustände, und zwar sowohl ihre Energien wie auch ihre Wellenfunktionen, präzise berechnen. Allerdings hat man wenig Kontrolle über den genauen Wert der berechneten Eigenenergien im Kontinuum der Streuzustände. Weiterhin verlangt die Berechnung von Streuzuständen mit grossen Energien einen hohen Rechenaufwand, da dann der Hamiltonoperator durch sehr grosse Matrizen genähert werden muss: Der Ultraviolett-Cutoff im Impulsraum muss sehr viel grösser als der Impuls des zu beschreibenden Zustands gewählt werden, um numerische Fehler klein zu halten.

In Projekt 2 haben wir die Schrödinger-Gleichung direkt als Differentialgleichung gelöst. Es ist jedoch offensichtlich, dass dies bei den stark oszillierenden Streuwellenfunktionen, die zu hohen Energien gehören, eine kleine Schrittweite verlangt und numerisch unvorteilhaft ist.

Für die Berechnung der Streuzustände erweist es sich deswegen als vorteilhaft, die Schrödinger-Gleichung in eine Integralgleichung, die sogenannte Lippmann–Schwinger–Gleichung, umzuschreiben. Diese Umformulierung sowie die Lösung dieser Integralgleichung wird im folgenden beschrieben.

3.2 Ableitung der Lippmann–Schwinger–Gleichung

In diesem Abschnitt fassen wir die Ableitung der Lippmann–Schwinger–Gleichung aus der Schrödinger-Gleichung kurz zusammen. Wie in Projekt 5 nehmen wir ein sphärisch symmetrisches Potential $V(r)$ an, dass für $r \rightarrow \infty$ schneller als $1/r$ gegen Null geht.

Der Hamiltonoperator besitzt also die Form

$$H = H_0 + V(r), \quad (3.1)$$

wobei H_0 in unserem Fall die kinetische Energie des streuenden Teilchens beschreiben soll.¹ Im Projekt 5 hatten wir als Eigenfunktionen zu H_0 Produkte aus sphärischer Besselfunktion und Kugelflächenfunktion gewählt. Allerdings verletzt die einfallende (gerichtete) Streuwelle mit definiertem Impuls die sphärische Symmetrie. Deswegen wählen wir als Streuwellenfunktion bei verschwindendem Potential eine ebene Welle $e^{i\vec{k}\vec{x}}$. Die Lösung zu $V \neq 0$ hat für $r \rightarrow \infty$ dann die allgemeine Form

$$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}) \propto e^{i\vec{k}\vec{x}} + \text{ausl. Welle} = e^{i\vec{k}\vec{x}} + f_{\vec{k}}^*(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (3.2)$$

die die einlaufende ebene Welle und eine auslaufende Kugelwelle beschreibt. Die mögliche andere Lösung der Schrödingergleichung

$$\psi_{\vec{k}}^-(\vec{x}) \propto e^{i\vec{k}\vec{x}} + \text{einl. Welle}$$

ist durch die von uns vorgegebenen Randbedingungen der Streuung ausgeschlossen. Aus der Quantenmechanik, siehe auch Abschnitt 5.5, wissen wir, dass der Streuquerschnitt direkt aus der Streuamplitude berechnet werden kann,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}}^*(\Omega)|^2. \quad (3.3)$$

Die Streuamplitude kann wiederum mittels der Schrödingergleichung aus der Streuwellenfunktion $\psi_{\vec{k}}^+$ und dem Potential bestimmt werden. Es gilt:

$$f_{\vec{k}}^*(\Omega) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{i\vec{k}'\vec{x}'} V(|\vec{x}'|) \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}'), \quad (3.4)$$

wobei $\hbar\vec{k}' = \hbar|\vec{k}|\frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}$ der Impulsvektor mit dem Betrag des Impulses $\hbar\vec{k}$ und der Richtung des Ortsvektors \vec{x} ist. Somit ist der Winkel zwischen \vec{k}' und \vec{k} identisch zum Winkel zwischen \vec{x} und \vec{k} , und beide Vektorpaare sind gleich gut geeignet den Raumwinkel Ω zu definieren.

Wir bezeichnen mit $|\vec{k}'\rangle$ den Eigenzustand zum Impulsoperator mit Eigenwert $\hbar\vec{k}'$. $|\vec{k}'\rangle$ ist auch Eigenzustand zu H_0 . Es gilt somit

$$H_0|\vec{k}'\rangle = E|\vec{k}'\rangle, \quad E = \hbar^2 k'^2/2m = \hbar^2 k^2/2m \quad (3.5)$$

und

$$\langle \vec{k}' | \vec{x} \rangle = e^{i\vec{k}'\vec{x}}. \quad (3.6)$$

¹Die hier beschriebene Methode eignet sich für jeden analytisch bzw. algebraisch lösbaren Hamiltonoperator H_0 . Insbesondere sollte man bei Vorliegen eines Coulomb-Anteils des Potentials, $V_{\text{Coul}}(r) = \text{const.}/r$, diesen Anteil zu H_0 hinzunehmen und den “freien” Anteil der Streuwelle als Coulomb-Streuwellenfunktion (siehe z.B. Anhang B1 in A. Messiah, *Quantenmechanik*) beschreiben.

Die Idee ist nun, aus der Schrödingergleichung

$$(H_0 + V)|\psi_{\vec{k}}\rangle = E|\psi_{\vec{k}}\rangle \quad (3.7)$$

eine Gleichung für den Streuzustand $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ unter Berücksichtigung der Randbedingungen der Streuung abzuleiten. Dazu schreiben wir die Schrödingergleichung in der Form $(E - H_0)|\psi_{\vec{k}}\rangle = V|\psi_{\vec{k}}\rangle$ mit der Absicht, den Operator $E - H_0$ zu invertieren. Hierzu muss man jedoch die homogene Lösung

$$(E - H_0)|\vec{k}\rangle = 0 \quad (3.8)$$

berücksichtigen:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - H_0} V |\psi_{\vec{k}}\rangle \quad (3.9)$$

für alle Eigenwerte von H_0 ungleich E . Da H_0 aber ein kontinuierliches Spektrum besitzt, und somit immer ein Eigenwert den Wert E annehmen kann, ist es notwendig, die Singularität $\frac{1}{E - H_0}$ im mathematischen Sinn eindeutig zu definieren. In der Quantenmechanik wird gezeigt, dass diese Singularität durch die gewählten Randbedingungen eindeutig festgelegt wird. Da die Schrödingergleichung zwei Lösungen zulässt, gibt es rein mathematisch betrachtet zwei wohldefinierte Möglichkeiten:

$$|\psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle = |\vec{k}\rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V |\psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle. \quad (3.10)$$

Im weiteren wollen wir wegen der gegebenen Randbedingungen nur den Zustand $|\psi_{\vec{k}}^+\rangle$ betrachten. Die Gleichung (3.10) ist die Lippmann–Schwinger–Gleichung in Operatorform.

3.3 Der Übergangsoperator T

Um die abstrakte Lippmann–Schwinger–Gleichung (3.10) in eine Integralgleichung umzuformulieren, definieren wir den Übergangsoperator T vom freien Zustand $|\vec{k}\rangle$ in den Streuzustand $|\psi_{\vec{k}}^+\rangle$ mittels der Relation

$$T|\vec{k}\rangle = V|\psi_{\vec{k}}^+\rangle. \quad (3.11)$$

Durch Bilden des Erwartungswerts zwischen Impulseigenfunktionen erhält man hieraus die Übergangsmatrix $T(\vec{k}', \vec{k})$:

$$T(\vec{k}', \vec{k}) := \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k}' | V | \psi_{\vec{k}}^+ \rangle = \int d^3x \langle \vec{k}' | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | V | \psi_{\vec{k}}^+ \rangle = \int d^3x e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}} V(|\vec{x}\rangle) \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}). \quad (3.12)$$

Hierbei haben wir durch Benutzen von Ortseigenzuständen $|\vec{x}\rangle$ die Matrix $T(\vec{k}', \vec{k})$ als Integral ausgedrückt. Aus den Gleichungen (3.3), (3.4) und (3.12) folgt unmittelbar, dass wir den Streuquerschnitt auch durch die Übergangsmatrix ausdrücken können:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |T(\vec{k}', \vec{k})|^2. \quad (3.13)$$

Hieraus ersehen wir, dass die Berechnung der Übergangsmatrix $T(\vec{k}', \vec{k})$ ausreicht, um physikalische Observable zu berechnen.

Multiplizieren wir die Lippmann–Schwinger–Gleichung (3.10) mit V und benutzen die Definition des Übergangsoperators T , $V|\psi_k^+\rangle = T|\vec{k}\rangle$, so erhalten wir

$$T|\vec{k}\rangle = V|\vec{k}\rangle + V \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T|\vec{k}\rangle \quad (3.14)$$

bzw. die Operatorgleichung

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T \quad \text{mit} \quad \epsilon \rightarrow 0^+. \quad (3.15)$$

Durch Erwartungswertbildung mit den Impulseigenzuständen $|\vec{k}\rangle$ erhält man

$$\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle + \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} \langle \vec{k}' | V | \vec{k}'' \rangle \langle \vec{k}'' | \frac{1}{E - \hbar^2 k''^2 / 2m + i\epsilon} T | \vec{k} \rangle, \quad \epsilon \rightarrow 0^+. \quad (3.16)$$

Hierbei ist das Matrixelement $\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$ identisch zur Fourier–Transformierten des Potentials

$$V(\vec{k}' - \vec{k}) = \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \int d^3 x \langle \vec{k}' | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | V | \vec{k} \rangle = \int d^3 x V(|\vec{x}|) e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{x}}. \quad (3.17)$$

Mit dieser Form für das Matrixelement $\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$ sieht man, dass die Gleichung (3.16) eine Integralgleichung für die Übergangsmatrix $T(\vec{k}', \vec{k}) = \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$ ist:

$$T(\vec{k}', \vec{k}) = V(\vec{k}' - \vec{k}) + \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} V(\vec{k}' - \vec{k}'') \frac{1}{E - \hbar^2 k''^2 / 2m + i\epsilon} T(\vec{k}'', \vec{k}), \quad \epsilon \rightarrow 0^+. \quad (3.18)$$

Dies ist unsere gesuchte Integralgleichung, d.h. eine konkrete Form der Lippmann–Schwinger–Gleichung (3.10). Sie hat jedoch noch zwei gravierende Nachteile.

3.4 Die Integralgleichung für K

Erstens, die Gleichung (3.18) berücksichtigt nicht die sphärische Symmetrie des Potentials. In einem Zentralpotential ist folgende Entwicklung der T –Matrix,

$$T(\vec{k}', \vec{k}) = 16\pi^2 \sum_{lm} T_l(k', k) Y_l^{m*}(\Omega_{\vec{k}'}) Y_l^m(\Omega_{\vec{k}}) = 4\pi \sum_l (2l+1) T_l(k', k) P_l(\cos \theta), \quad (3.19)$$

mit $\cos \theta = \vec{k}' \cdot \vec{k} / k' k$ hilfreich. Der Zusammenhang mit den Streuphasen, die durch eine analoge Entwicklung der $f_{\vec{k}}(\Omega)$ definiert sind², ist dann offensichtlich:

$$T_l(k, k) = -\frac{\hbar^2}{2mk} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k). \quad (3.20)$$

²vergleiche Abschnitt 5.5, insbesondere Gleichung (5.30): $f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$

Somit können die Streuphasen z.B. mittels der Beziehung

$$\delta_l(k) = \text{atan} \left(\frac{\text{Im} T_l(k, k)}{\text{Re} T_l(k, k)} \right) \quad (3.21)$$

berechnet werden.

Benutzt man noch

$$V(\vec{k}' - \vec{k}) = 4\pi \sum_l (2l+1) V_l(k', k) P_l(\cos \theta) \quad (3.22)$$

und die Orthonormalität der Kugelfunktionen für die Winkelintegration, so erhält man für jedes l die eindimensionale Integralgleichung

$$T_l(k', k) = V_l(k', k) + \frac{2}{\pi} \int dk'' k''^2 V_l(k', k'') \frac{1}{E - \hbar^2 k''^2 / 2m + i\epsilon} T_l(k'', k), \quad \epsilon \rightarrow 0^+. \quad (3.23)$$

Zweitens, die Übergangsmatrix ist komplex, und zwar ist sowohl Gleichung (3.18) als auch Gleichung (3.23) eine komplexe Gleichung. Eine Zerlegung in Real- und Imaginärteil kann mittels der Formel (\mathcal{P} bedeutet Hauptwert)

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - \hbar^2 k''^2 / 2m + i\epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{E - \hbar^2 k''^2 / 2m} - i\pi \delta(E - \hbar^2 k''^2 / 2m) \quad (3.24)$$

vorgenommen werden. Mit $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ und daraus folgend $\delta(E - \hbar^2 k''^2 / 2m) = (m/(\hbar^2 k)) \delta(k - k'')$ erhält man:

$$\begin{aligned} T_l(k', k) = V_l(k', k) &+ \frac{2}{\pi} \int dk'' k''^2 V_l(k', k'') \mathcal{P} \frac{1}{E - \hbar^2 k''^2 / 2m} T_l(k'', k) \\ &- 2i \frac{mk}{\hbar^2} V_l(k', k) T_l(k, k) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Wir definieren die reelle K -Matrix als die Größe, die die reelle Gleichung

$$K_l(k', k) = V_l(k', k) + \frac{2}{\pi} \int dk'' k''^2 V_l(k', k'') \mathcal{P} \frac{1}{E - \hbar^2 k''^2 / 2m} K_l(k'', k) \quad (3.26)$$

erfüllt. Eine kurze Rechnung zeigt, dass die Diagonalelemente der T -Matrix aus der K -Matrix bestimmt werden können:

$$T_l(k, k) = \frac{K_l(k, k)}{1 + 2imk K_l(k, k) / \hbar^2}. \quad (3.27)$$

Die Streuphase kann damit unter Benutzung des Ausdrucks (3.21) auch direkt aus den Diagonalelementen der K -Matrix berechnet werden:

$$\delta_l(k) = -\text{atan} \left(\frac{2mk}{\hbar^2} K_l(k, k) \right).$$

(3.28)

Mit den Gleichungen (3.26) und (3.28) können wir die Streuphasen bestimmen.

Bei der Lösung der Gleichung (3.26) gibt es jedoch noch ein Problem. Da $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, ist der Integrand bei $k'' = k$ singulär. Benutzt man jedoch

$$\int_0^\infty dk'' \mathcal{P} \frac{1}{\hbar^2 k^2 / 2m - \hbar^2 k''^2 / 2m} = 0$$

kann man durch Subtraktion einer Null in der Gleichung (3.26) die Singularität explizit entfernen:

$$K_l(k', k) = V_l(k', k) + \frac{2}{\pi} \int dk'' \frac{2m/\hbar^2}{k^2 - k''^2} \left(k''^2 V_l(k', k'') K_l(k'', k) - k^2 V_l(k', k) K_l(k, k) \right). \quad (3.29)$$

3.5 Numerische Methode

3.5.1 Numerische Integration

In einem ersten Schritt bilden wir das Integral $\int_0^\infty dk''$ auf ein endliches Intervall durch die Substitution

$$k'' = \tan\left(\frac{\pi}{4}(1+z)\right), \quad \int_0^\infty dk'' \rightarrow \frac{\pi}{4} \int_{-1}^1 \frac{dz}{\cos^2\left(\frac{\pi}{4}(1+z)\right)} \quad (3.30)$$

ab.³ Es ist hierbei nicht nötig, im Programm den Integranden $I(k, k', k'')$ in einen Integranden $\tilde{I}(k, k', z)$ umzuschreiben! Nach der Stützstellenwahl in z benützt man einfach die Zuordnung für $k'' = \tan\left(\frac{\pi}{4}(1+z)\right)$ und beläßt den Integranden in der Form $I(k, k', k'')$.

Numerisch berechnet man ein Integral mittels der Approximation

$$\int_{-1}^1 dz f(z) \approx \sum_{i=1}^N w_i f(z_i) \quad (3.31)$$

mit einer Optimierung von Gewichten w_i und Stützstellen z_i , um mit möglichst kleinen N eine möglichst hohe Genauigkeit zu erzielen. Mit dem **Gauß–Legendre–Verfahren** werden alle Polynome vom Grad $\leq 2N - 1$ exakt auf dem Intervall $[-1, 1]$ integriert. Hierzu wird die Orthogonalität der Legendre–Polynome benutzt. Die Stützstellen z_i ergeben sich aus den Nullstellen des N -ten Legendre–Polynoms,

$$P_N(z_i) = 0, \quad (3.32)$$

die Gewichte w_i aus der Bedingung

$$\sum_i w_i P_l(z_i) = 2\delta_{l0}, \quad (3.33)$$

die durch

$$w_i = \frac{2}{(1 - z_i^2)(P'_N(z_i))^2} \quad (3.34)$$

³Eine andere Möglichkeit wäre z.B. $k'' = \frac{1+z}{1-z}$, $\int_0^\infty dk'' \rightarrow 2 \int_{-1}^1 \frac{dz}{(1-z)^2}$.

gelöst wird.

In einem ersten Schritt berechnet man die Legendre–Polynome $P_N(z)$ mittels der Rekursionsrelation

$$(l+1)P_{l+1}(z) = (2l+1)zP_l(z) - lP_{l-1}(z) \quad (3.35)$$

unter Benutzung von $P_0(z) = 1$ und $P_1(z) = z$. Eine Nullstellensuche ergibt dann die Stützstellen z_i . Die Gleichung

$$(z^2 - 1)P'_N(z) = N(zP_N(z) - P_{N-1}(z)) \quad (3.36)$$

ermöglicht die Berechnung der Gewichte w_i .

3.5.2 Lösung durch Iteration

Die diskrete Stützstellenwahl führt zu einer Diskretisierung der Integralgleichung, sie wird ein algebraisches Gleichungssystem:

$$K_{l,ij} = V_{l,ij} + \frac{m}{\hbar^2} \sum_n w_n \frac{1}{\cos^2\left(\left(\frac{\pi}{4}(1+z_n)\right)\right)} \frac{1}{k_j^2 - k_n^2} (k_n^2 V_{l,in} K_{l,nj} - k_j^2 V_{l,ij} K_{l,jj}). \quad (3.37)$$

Bei $j = n$ ersetze man $\frac{1}{k_j^2 - k_n^2} (k_n^2 V_{l,in} K_{l,nj} - k_j^2 V_{l,ij} K_{l,jj})$ durch $-V_{l,ij} K_{l,jj}$.

Die Iteration der Integralgleichung entspricht der Aufsummation der Bornschen Reihe: Startet man mit $K^{(0)} = 0$ erhält man $K^{(1)} = V$ und hieraus (in symbolischer Schreibweise) $K^{(2)} = V + V \frac{1}{E-E'} K^{(1)} = V + V \frac{1}{E-E'} V$. Damit folgt

$$K^{(3)} = V + V \frac{1}{E-E'} V + V \frac{1}{E-E'} V \frac{1}{E-E'} V \text{ usw.}$$

Dies führt zum richtigen Ergebnis, so lange das betrachtete Potential keinen Bindungszustand besitzt.

Noch eine Bemerkung: Wenn Sie $\delta_l(k)$ bzw. $K_l(k, k)$ an Punkten berechnen wollen, die nicht einer Stützstelle entsprechen, dann benützen Sie die Integralgleichung und nicht eine Interpolation.

3.5.3 Lösung durch Matrixinversion

Für den allgemeinen Fall, d.h. bei Vorliegen eines Bindungszustands, lässt sich die Gleichung (3.37) mittels Matrixinversion lösen (Nystrom–Methode).

Hierzu definieren wir die Matrizen

$$D_{in}^{(jl)} := \frac{m}{\hbar^2} w_n \frac{1}{\cos^2\left(\left(\frac{\pi}{4}(1+z_n)\right)\right)} \frac{1}{k_j^2 - k_n^2} k_n^2 V_{l,in} (1 - \delta_{jn}). \quad (3.38)$$

Die Matrixindizes sind i und n , der Drehimpulsindex l sowie der Index j zum Impuls k'' definieren verschiedene Matrizen D .

Es gelten dann die Matrix-Gleichungen

$$K_{l,ij} = V_{l,ij} + D_{in}^{(jl)} K_{l,nj} \quad (3.39)$$

bzw. für festes j und l

$$\tilde{K}_i^{(jl)} = \tilde{V}_i^{(jl)} + D_{in}^{(jl)} \tilde{K}_n^{(jl)} \quad (3.40)$$

wobei die “Vektoren” \tilde{K} und \tilde{V} in offensichtlicher Weise aus den Matrizen $K_{l,ij}$ und $V_{l,ij}$ hervorgehen. In Matrix-Schreibweise hat man somit

$$(\mathbb{1} - D)\tilde{K} = \tilde{V}, \quad (3.41)$$

und mittels Inversion von $(\mathbb{1} - D)$ kann man die \tilde{K} für gegebenes j und l aus den \tilde{V} berechnen. Wiederholt man dies bei festem l für alle j , so erhält man die vollständige K -Matrix.

3.6 Aufgaben

Aufgabe 3.1:

Berechnen Sie (analytisch) die Fourier-Transformierte des Potentials

$$V(r) = \sum_i V_{0i} \frac{e^{-\mu_i r}}{\mu_i r}.$$

Bestimmen Sie hieraus mittels der Orthogonalität der Legendre-Polynome die Multipolterme $V_l(k', k)$, siehe Gleichung (3.22).

Hinweis:

$V_l(k', k) = \sum_i \frac{V_{0i}}{\mu_i} \frac{1}{2kk'} Q_l\left(\frac{k^2 + k'^2 + \mu_i^2}{2kk'}\right)$ mit den irregulären Legendre-Funktionen $Q_l(\alpha)$.

Für $\alpha > 1$ gilt $Q_0(\alpha) = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\alpha+1}{\alpha-1}\right)$ und $Q_1(\alpha) = \alpha Q_0(\alpha) - 1$ sowie die Rekursion (3.35).

Aufgabe 3.2:

Wieviele Stützstellen brauchen Sie im Gauß-Legendre-Verfahren, um die Integrale

$$\int_0^1 dx \ln^2(1+x) = 2 \ln^2(2) - 4 \ln(2) + 2$$

$$\int_0^1 dx \frac{1}{x} \ln(1-x) = -\zeta(2) = -\frac{\pi^2}{6}$$

mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-6} zu berechnen?

Wieviele Stützstellen wären mit der einfachen Trapezregel notwendig?

Aufgabe 3.3:

Ein Nukleon ($mc^2 = 940 \text{ MeV}$) streue am Potential

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-2\mu r} - e^{-\mu r}}{\mu r}$$

mit $V_0 = 200 \text{ MeV}$ und $\mu = 2.5 \text{ fm}^{-1}$.

Lösen Sie die Lippmann-Schwinger-Gleichung für die K -Matrix (3.29) iterativ für $l = 0$ und $l = 1$, und berechnen Sie die Streuphasen aus Gleichung (3.28).

(Hinweis: $mV_0/\hbar^2 = mc^2 V_0/(\hbar c)^2 = 4.844 \text{ fm}^{-2}$ mit $\hbar c = 197 \text{ MeV fm}$. Berechnen Sie K_l/V_0 in Einheiten fm^{-3} .)

Aufgabe 3.4 (weiterführend):

Ein realistisches Potential für die Nukleon-Nukleon-Streuung ist

$$V(r) = \left(-10.463 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r} - 1650.6 \frac{e^{-4\mu r}}{\mu r} + 6482.2 \frac{e^{-7\mu r}}{\mu r} \right) \text{ MeV}$$

mit $\mu = 0.7 \text{ fm}^{-1}$. Lösen Sie die zugehörige Lippmann-Schwinger-Gleichung für die K -Matrix mit der Nystrom-Methode, und berechnen und diskutieren Sie die Streuphasen für $l = 0, 1$ und $l = 2$.

3.7 Literatur

Eine Einführung in die Streutheorie ist in Kapitel 18 von

- F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM I)*, Springer-Lehrbuch,

gegeben. Etwas ausführlicher ist in Kapitel 19 von

- A. Messiah, *Quantenmechanik*, deGruyter

die Streutheorie dargestellt.

Die Lippmann–Schwinger–Gleichung für die T – und die K –Matrix werden in

- W. Glöckle, *The quantum mechanical few-body problem*, Texts and monographs in physics, Springer 1983.

diskutiert.

Alle hier verwendeten numerischen Methoden und Algorithmen werden in

- W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes in C++: The art of scientific computing*,

beschrieben. Von diesem Buch gibt es mehrere Versionen (Fortran, F90, C, C++, usw.).