

Übungsserie 6 - Musterlösung

Wintersemester 18/19
Besprechung am 14.01.2018

Andrey Surzhykov
Robert Müller

Aufgabe 1 (*Relativistische Compton-Streuung*)

- a) Zeichnen Sie die Feynman-Diagramme der Compton-Streuung und nutzen Sie die Feynman-Regeln um die zugehörigen Matrixelemente aufzuschreiben.
- b) Nutzen Sie Energie- und Impulserhaltung, um die Wellenlängen-Änderung der Photons nach der Streuung in Abhängigkeit vom Streuwinkel auszudrücken. Dabei kann das Elektron vor dem Stoß als Ruhend angenommen werden (Ruheenergie mc^2) und besitzt nach dem Stoß eine relativistische Gesamtenergie und Impuls.

Lösung:

- a) Die Feynman-Diagramme sind trivial. Die zugehörigen Matrixelemente lauten:

$$M_{dir} = u(p_i, s_i) [-ie\gamma_\mu \epsilon^\mu(k_i, \lambda_i)] \frac{i(\gamma_\nu p^\nu + m_e)}{p^2 - m_e^2 + i\epsilon} [-ie\gamma_\rho \epsilon^\rho(k_f, \lambda_f)] \bar{u}(p_f, s_f)$$

$$M_{ex} = u(p_i, s_i) [-ie\gamma_\mu \epsilon^\mu(k_f, \lambda_f)] \frac{i(\gamma_\nu p^\nu + m_e)}{p^2 - m_e^2 + i\epsilon} [-ie\gamma_\rho \epsilon^\rho(k_i, \lambda_i)] \bar{u}(p_f, s_f)$$

- b) Betrachten wir zunächst Energie und Impuls des Photons und des Elektrons vor und nach der Streuung:

$$\begin{array}{ll} E_\gamma = \hbar\omega & E'_\gamma = \hbar\omega' \\ \mathbf{p}_\gamma = \hbar\mathbf{k} & \mathbf{p}'_\gamma = \hbar\mathbf{k}' \\ E_e = m_e c^2 & E'_e = \gamma m_e c^2 \\ \mathbf{p}_e = \mathbf{0} & |\mathbf{p}'_e| = \gamma\beta m_e c, \end{array}$$

wobei $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$ und $\beta = v/c$. Die Energieerhaltung gibt uns:

$$\begin{aligned} E_\gamma + E_e &= E'_\gamma + E'_e \\ \hbar(\omega - \omega') &= \gamma m_e c^2 - m_e c^2. \end{aligned}$$

und mit $\hbar\omega = h\nu = hc/\lambda$ bekommen wir:

$$\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} = (\gamma - 1) \frac{m_e c}{h} \tag{1}$$

Schauen wir nun, was wir aus der Impulserhaltung lernen können:

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_\gamma + \mathbf{p}_e &= \mathbf{p}'_\gamma + \mathbf{p}'_e \\ \frac{1}{2\pi}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \frac{1}{h}\mathbf{p}'_e.\end{aligned}$$

Da wir nur den Betrag des Elektronenimpulses nach der Streuung kennen, quadrieren wir die obige Gleichung und setzen den Ausdruck für p_e ein:

$$\frac{1}{(2\pi)^2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 = \gamma^2\beta^2 \left(\frac{mc}{h}\right)^2.$$

mit $\mathbf{k}\mathbf{k}' = kk' \cos \theta$ und $k = 2\pi/\lambda$ ergibt sich:

$$\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda'^2} - \frac{2}{\lambda\lambda'} \cos \theta = \gamma^2\beta^2 \left(\frac{mc}{h}\right)^2. \quad (2)$$

Der Rest ist kluges Umformen der Gleichung (1) und (2).

Wir quadrieren (1):

$$\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda'^2} - \frac{2}{\lambda\lambda'} = (\gamma - 1)^2 \left(\frac{m_e c}{h}\right)^2.$$

Nun können wir (1)² von (2) subtrahieren:

$$\begin{aligned}\frac{2}{\lambda\lambda'}(1 - \cos \theta) &= \left(\frac{m_e c}{h}\right)^2 [\gamma^2\beta^2 - (1 - \gamma)^2] \\ \frac{h}{m_e c}(1 - \cos \theta) &= \frac{1}{2} [\gamma^2\beta^2 - (1 - \gamma)^2] \lambda\lambda' \frac{m_e c}{h},\end{aligned}$$

worin wir $\lambda\lambda'$ mit (1) $\cdot \lambda\lambda' \rightarrow \lambda' - \lambda = (\gamma - 1)\lambda\lambda' m_e c/h$ ersetzen können:

$$\frac{h}{m_e c}(1 - \cos \theta) = \underbrace{\frac{(1 - \gamma)^2 - \gamma^2\beta^2}{2(1 - \gamma)}}_{=1(\text{Nebenrechnung})}(\lambda - \lambda').$$

Damit erhalten wir die wohlbekannte Formel für die Compton-Streuung:

$$\lambda - \lambda' = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos \theta) \quad (3)$$

Aufgabe 2 (Näherungsverfahren - Ein Vergleich)

Betrachten Sie zwei identische Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen in einem eindimensionalen harmonischen Potential, die mittels eines weiteren harmonischen Potentials miteinander wechselwirken:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (\hat{p}_i^2 + \hat{x}_i^2) + \frac{\lambda}{2} (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2,$$

wobei wir der Übersichtlichkeit halber ausnahmsweise annehmen wollen, dass $\hbar = m = \omega = 1$.

- a) Entkoppeln Sie die beiden Oszillatoren mit Hilfe der Schwerpunktskoordinaten $R = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2)$ und $r = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$.
- b) Bestimmen Sie die Grundzustandsenergie E_0 und die entsprechende Wellenfunktion $\psi_0(x_1, x_2)$ einschließlich des Spin-Anteils.
- c) Zum Vergleich wollen wir dasselbe Problem nun mit der Hartree-Fock Methode lösen. Wählen Sie hierfür als Ansatz die Slater-Determinante $\psi_{SD}(x_1, x_2) = \phi(x_1)\phi(x_2)\chi$. Welche Form hat χ für den Grundzustand? Zeigen Sie durch Variation des Energieerwartungswerts $E_{HF}[\phi] = \langle \psi_{SD} | H | \psi_{SD} \rangle$, dass sich die Hartree-Fock-Gleichungen reduzieren lassen auf:

$$\left(-\partial_x^2 + x^2 + \lambda \int dy (x-y)^2 |\phi(y)|^2 \right) \phi(x) = \varepsilon \phi(x)$$

- d) Lösen Sie diese Gleichung durch iterative Näherungen: Starten Sie in der ersten Näherung mit der normierten Grundzustandswellenfunktion $\phi^{(1)}(x)$ für $\lambda = 0$. Berechnen Sie damit obiges Integral und lösen Sie die resultierende lineare Gleichung

$$\left(-\partial_x^2 + x^2 + \lambda \int dy (x-y)^2 |\phi^{(n-1)}(y)|^2 \right) \phi^{(n)}(x) = \varepsilon^{(n)} \phi^{(n)}(x)$$

für die zweite Approximation $\phi^{(2)}$. Fahren Sie mit der nächsten Iteration in gleicher Weise fort, bis die Iteration konvergiert. Wie lautet das Resultat für ψ^∞ und $\varepsilon^{(\infty)}$?

- e) Berechnen Sie die entsprechende Hartree-Fock-Energie E_{HF} und vergleichen Sie diese mit dem exakten Resultat aus Aufgabe b).
- f) Berechnen Sie den Überlapp $|\langle \psi_{SD} | \psi_0 \rangle|^2$ der exakten und der Hartree-Fock-Wellenfunktion. Was geschieht für $\lambda \rightarrow \infty$?

Lösung:

- a) Der Hamiltonian des zweiteilchensystems lautet:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (\hat{p}_i^2 + \hat{x}_i^2) + \frac{\lambda}{2} (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2,$$

mit der Koordinatentransformation:

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2) & x_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(R + r) \\ r &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) & x_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(R - r) \end{aligned}$$

ergibt sich

$$x_1^2 + x_2^2 = R^2 + r^2 \partial_1^2 + \partial_2^2 = \partial_R^2 + \partial_r^2$$

und somit für den Hamiltonian:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(-\partial_R^2 + R^2) + \frac{1}{2}[-\partial_r^2 + (1 + 2\lambda)r^2].$$

Dieser Hamiltonian beschreibt zwei voneinander unabhängige harmonische Oszillatoren mit den Eigenfrequenzen:

$$\omega_R = 1 \qquad \omega_r = \sqrt{1 + 2\lambda},$$

b) und der zugehörigen Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{1}{2}(\omega_R + \omega_r) = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 2\lambda})$$

Die Wellenfunktion ist ein Produktzustand aus zwei Harmonischen Oszillatoren:

$$\psi(R, r) = \left(\frac{\sqrt{1 + 2\lambda}}{\pi^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{R^2}{2}} e^{-\frac{\sqrt{1+2\lambda}r^2}{2}}.$$

c) Wir wählen den naiven Ansatz:

$$\psi(x_1, x_2) |\chi\rangle = \phi(x_1)\phi(x_2) |\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi(x_1)\phi(x_2)(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle),$$

wobei für den Grundzustand intuitiv die Ortswellenfunktion symmetrisch und die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein muss. Das Energiefunktional ist dann:

$$\begin{aligned} E_{HF}[\phi, \phi^*] &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \\ &\quad \times \phi^*(x_1)\phi^*(x_2) \left[\frac{1}{2}(-\partial_1^2 + x_1^2) + \frac{1}{2}(-\partial_2^2 + x_2^2) + \frac{\lambda}{2}(x_1 - x_2)^2 \right] \phi(x_2)\phi(x_1) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x)(-\partial_x^2 + x^2)\phi(x) + \frac{\lambda}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \phi^*(x)\phi^*(y)(x - y)^2 \phi(y)\phi(x). \end{aligned}$$

Dieses Funktional variieren wir nun unter der Nebenbedingung, dass die Einteilchen-Wellenfunktionen normiert sind, also $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi(x)|^2 = 1$:

$$\begin{aligned} &\frac{\delta}{\delta \phi^*} \left[E[\phi, \phi^*] - \varepsilon \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x)\phi(x) - 1 \right) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta \phi^*(x) \left[-\partial_x^2 + x^2 + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dy \phi^*(y)(x - y)^2 \phi(y) - \varepsilon \right] \phi(x). \end{aligned}$$

Diese Variation muss nun für alle $\delta \phi^*$ verschwinden, somit erhalten wir die Hartree-Fock-Gleichung:

$$\left[-\partial_x^2 + x^2 + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dy |\phi(y)|^2 (x - y)^2 \right] \phi(x) = \varepsilon \phi(x).$$

d) 1. Iteration $\lambda = 0$

$$(-\partial_x^2 + x^2)\phi^{(1)}(x) = \varepsilon^{(1)}\phi^{(1)}(x) \Rightarrow \phi^{(1)}(x) = \pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad \varepsilon^{(1)} = 1$$

Das y -Integral ist dann:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy(x-y)^2|\phi^{(1)}(y)|^2 &= \pi^{-\frac{1}{2}}x^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} + \pi^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-y^2} \\ &= x^2 + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

2. Iteration

$$\left[-\partial_x^2 + x^2 + \lambda \left(x^2 + \frac{1}{2} \right) \right] \phi^{(2)}(x) = \varepsilon^{(2)}\phi^{(2)}(x)$$

Wellenfunktion und Energie sind dann:

$$\begin{aligned} \phi^{(2)}(x) &= \pi^{-\frac{1}{4}}(1+\lambda)^{\frac{1}{8}}e^{-\frac{\sqrt{1+\lambda}}{2}x^2}, \\ \varepsilon^{(2)} &= \sqrt{1+\lambda} + \frac{\lambda}{2} \end{aligned}$$

und das y -Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy(x-y)^2|\phi^{(2)}(y)|^2 = x^2 + \frac{1}{2}(1+\lambda)^{-\frac{1}{2}}$$

3. Iteration

$$\left[-\partial_x^2 + x^2(1+\lambda) \right] \phi^{(3)}(x) = \left(\varepsilon^{(3)} - \frac{\lambda}{2\sqrt{1+\lambda}} \right) \phi^{(3)}(x)$$

Womit wir feststellen, dass

$$\phi^{(3)}(x) = \phi^{(2)}(x),$$

und somit auch

$$\phi^{(3)}(x) = \phi^{(\infty)}(x).$$

Damit ist die Energie der dritten Iteration

$$\varepsilon^{(3)} = \sqrt{1+\lambda} + \frac{\lambda}{2\sqrt{1+\lambda}}$$

ebenfalls konvergiert, also $\varepsilon^{(3)} = \varepsilon^{(\infty)}$. Die Hartree-Fock Gleichung wird also gelöst durch die Wellenfunktion

$$\psi(x_1, x_2) |\chi\rangle = \pi^{-\frac{1}{2}}(1+\lambda)^{\frac{1}{4}}e^{-\sqrt{\frac{1+\lambda}{2}}(x_1^2+x_2^2)} |\chi\rangle$$

mit der zugehörigen Hartree-Fock-Energie:

$$E_{HF} = \sqrt{1+\lambda}$$

- e) Berechnen wir den relativen Fehler der Hartree-Fock Lösung im Vergleich zum exakten Resultat:

$$\frac{E_{HF} - E_0}{E_0} = \frac{2\sqrt{1+\lambda}}{1 + \sqrt{1+2\lambda}}.$$

Für $\lambda = 1$ ergibt sich ein Fehler von etwa 3.5%, für den Limes $\lambda \rightarrow \infty$ beträgt der Fehler bereits 41%.

Der Überlapp der Wellenfunktionen ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi_0 \rangle &= \pi^{-1} (1+2\lambda)^{\frac{1}{8}} (1+\lambda)^{\frac{1}{4}} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dR \int_{-\infty}^{\infty} dr \exp\left(-\frac{1}{2}R^2 - \frac{1}{2}\sqrt{1+2\lambda}r^2 - \frac{1}{2}\sqrt{1+\lambda}R^2 - \frac{1}{2}\sqrt{1+\lambda}r^2\right) \\ &= \frac{2(1+2\lambda)^{\frac{1}{8}}(1+\lambda)^{\frac{1}{4}}}{(1+\sqrt{1+\lambda})^{\frac{1}{2}}(\sqrt{1+2\lambda}+\sqrt{1+\lambda})^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

und das Betragsquadrat:

$$|\langle \psi | \psi_0 \rangle|^2 = 4 \frac{(1+2\lambda)^{\frac{1}{4}} \sqrt{1+\lambda}}{(1+\sqrt{1+\lambda})(\sqrt{1+2\lambda}+\sqrt{1+\lambda})} \xrightarrow{\lambda \rightarrow \infty} 0$$

Für eine starke Kopplung beider Oszillatoren sind die Wellenfunktionen also orthogonal!