3.3 Green'sche Funktionen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

3.3 Green'sche Funktionen

- Ziel: Lösen der Schrödinger-Gleichung

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\Big)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_k\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

mit der Randbedingung

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \stackrel{r\to\infty}{\longrightarrow} e^{ikz} + f_k(\theta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \equiv e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}\,',\vec{k})\,\frac{e^{ikr}}{r}$$

3.3 Green'sche Funktionen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Ziel: Lösen der Schrödinger-Gleichung

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\Big)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_k\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \quad \Big(\nabla^2 + k^2\Big)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,V(\vec{r})\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

mit der Randbedingung

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} e^{ikz} + f_k(\theta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \equiv e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}\,',\vec{k})\,\frac{e^{ikr}}{r}$$

3.3 Green'sche Funktionen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Ziel: Lösen der Schrödinger-Gleichung

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\Big)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_k\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \quad \big(\nabla^2 + k^2\big)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{r})\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

mit der Randbedingung

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \stackrel{r\to\infty}{\longrightarrow} e^{ikz} + f_k(\theta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \equiv e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}\,',\vec{k})\,\frac{e^{ikr}}{r}$$

- Green'sche Funktion: $\big(\nabla^2 + k^2\big)G_k(\vec{r},\vec{r}\,') = \delta^3(\vec{r}-\vec{r}\,')$ ($\hat{=}$ Definition von G_k)

3.3 Green'sche Funktionen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Ziel: Lösen der Schrödinger-Gleichung

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec r)\Big)\psi_{\vec k}(\vec r) = E_k\,\psi_{\vec k}(\vec r) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\,\psi_{\vec k}(\vec r)$$

$$\Leftrightarrow \quad \big(\nabla^2 + k^2\big)\psi_{\vec k}(\vec r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,V(\vec r)\,\psi_{\vec k}(\vec r)$$

mit der Randbedingung

$$\psi_{\vec k}(\vec r) \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} e^{ikz} + f_k(\theta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \equiv e^{i\vec k\cdot\vec r} + f(\vec k\,',\vec k)\,\frac{e^{ikr}}{r}$$

- Green'sche Funktion: $\big(\nabla^2 + k^2\big)G_k(\vec r,\vec r\,') = \delta^3(\vec r - \vec r\,')$ ($\hat{=}$ Definition von G_k)

→ allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung (formal):

$$\boxed{\psi_{\vec k}(\vec r) = \varphi_{\vec k}(\vec r) + \int d^3r'\,G_k(\vec r,\vec r\,')\,\frac{2\mu}{\hbar^2}\,V(\vec r\,')\,\psi_{\vec k}(\vec r\,')}$$

$\varphi_{\vec k}(\vec r) = e^{ikz} \equiv e^{i\vec k\cdot\vec r}$: Lösung der homogenen Dgl. $\big(\nabla^2 + k^2\big)\varphi_{\vec k}(\vec r) = 0$
mit der korrekten Randbedingung

Berechnung von G_k

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- Definition: $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,')$

Berechnung von G_k

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Definition: $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,')$
- Fourier-Transformation: $G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') \equiv G_k(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \tilde{G}_k(\vec{q})$

Berechnung von G_k

- Definition: $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,')$
- Fourier-Transformation: $G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') \equiv G_k(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \tilde{G}_k(\vec{q})$
- Integraldarstellung der δ-Funktion: $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

Berechnung von G_k

- Definition: $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,')$

- Fourier-Transformation: $G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') \equiv G_k(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \tilde{G}_k(\vec{q})$

- Integraldarstellung der δ-Funktion: $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

$$\Rightarrow \quad \left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, (\vec{k}^{\,2} - \vec{q}^{\,2})\, \tilde{G}_k(\vec{q}) \stackrel{!}{=} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

Berechnung von G_k

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Definition: $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,')$
- Fourier-Transformation: $G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') \equiv G_k(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \tilde{G}_k(\vec{q})$
- Integraldarstellung der δ-Funktion: $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

$\Rightarrow$ $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, (\vec{k}^{\,2} - \vec{q}^{\,2})\, \tilde{G}_k(\vec{q}) \overset{!}{=} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

$\Rightarrow$ $\tilde{G}_k(\vec{q}) = \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{q}^{\,2}}$

Berechnung von G_k

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Definition: $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,')$
- Fourier-Transformation: $G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') \equiv G_k(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \tilde{G}_k(\vec{q})$
- Integraldarstellung der δ-Funktion: $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

$\Rightarrow$ $\left(\nabla^2 + k^2\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, (\vec{k}^{\,2} - \vec{q}^{\,2})\, \tilde{G}_k(\vec{q}) \stackrel{!}{=} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

$\Rightarrow$ $\tilde{G}_k(\vec{q}) = \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{q}^{\,2}}$ divergiert bei $\vec{q}^{\,2} = \vec{k}^{\,2}$

$\longrightarrow$ Führe infintesimalen imaginären Term ein, um den Pol zu umschiffen:

$\tilde{G}_k^{(\pm)}(\vec{q}) = \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{q}^{\,2} \pm i\varepsilon}$

$$\Rightarrow \quad G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{q}^{\,2} \pm i\varepsilon}$$

$$\Rightarrow \quad G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \frac{1}{\vec{k}^{\,2}-\vec{q}^{\,2}\pm i\varepsilon} \quad , \qquad \vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,') = \vec{q}\cdot\vec{s} = qsu,$$

$$\vec{s} \equiv \vec{r}-\vec{r}\,',\; u = \cos\left(\sphericalangle(\vec{q},\vec{s})\right)$$

$$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \frac{1}{\vec{k}^{\,2}-\vec{q}^{\,2}\pm i\varepsilon} \;, \qquad \vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,') = \vec{q}\cdot\vec{s} = qsu,$$

$$\vec{s} \equiv \vec{r}-\vec{r}\,',\; u = \cos\left(\sphericalangle(\vec{q},\vec{s})\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2\, dq\, \frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} \int_{-1}^{1} du\, e^{iqsu}$$

$$\Rightarrow \quad G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \frac{1}{\vec{k}^{\,2}-\vec{q}^{\,2}\pm i\varepsilon} \quad , \qquad \vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,') = \vec{q}\cdot\vec{s} = qsu,$$

$$\vec{s} \equiv \vec{r}-\vec{r}\,',\ u = \cos\left(\sphericalangle(\vec{q},\vec{s})\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2\, dq\, \frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} \int_{-1}^{1} du\, e^{iqsu}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{is} \int_0^\infty q\, dq\, \frac{e^{iqs}-e^{-iqs}}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

$$\Rightarrow \quad G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \frac{1}{\vec{k}^{\,2}-\vec{q}^{\,2}\pm i\varepsilon} \quad , \qquad \vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,') = \vec{q}\cdot\vec{s} = qsu,$$

$$\vec{s} \equiv \vec{r}-\vec{r}\,',\ u = \cos\left(\sphericalangle(\vec{q},\vec{s})\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2\, dq\, \frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} \int_{-1}^{1} du\, e^{iqsu}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{is} \int_0^\infty q\, dq\, \frac{e^{iqs}-e^{-iqs}}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{is} \int_{-\infty}^\infty q\, dq\, \frac{e^{iqs}}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

$$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, \frac{1}{\vec{k}^{\,2}-\vec{q}^{\,2}\pm i\varepsilon}\;, \qquad \vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,') = \vec{q}\cdot\vec{s} = qsu,$$

$$\vec{s} \equiv \vec{r}-\vec{r}\,',\; u = \cos\left(\sphericalangle(\vec{q},\vec{s})\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int\limits_0^\infty q^2\, dq\, \frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} \int\limits_{-1}^{1} du\, e^{iqsu}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{is} \int\limits_0^\infty q\, dq\, \frac{e^{iqs}-e^{-iqs}}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{is} \int\limits_{-\infty}^\infty q\, dq\, \frac{e^{iqs}}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

$$= -\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{s}\frac{d}{ds} F_k^{(\pm)}(s), \quad \text{mit} \quad F_k^{(\pm)}(s) = \int\limits_{-\infty}^\infty dq\, \frac{e^{iqs}}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

- Vorgehensweise:

  Erweitere den Integrationsweg auf eine geschlossene Kontur $\mathcal{C}$ in der komplexen Ebene,

$$F_k^{(\pm)}(s) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dq\, \frac{e^{iqs}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} = \oint\limits_{\mathcal{C}} dq\, \frac{e^{iqs}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon},$$

  und verwende den Residuensatz.

- Vorgehensweise:

  Erweitere den Integrationsweg auf eine geschlossene Kontur $\mathcal{C}$ in der komplexen Ebene,

  $$F_k^{(\pm)}(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \frac{e^{iqs}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} = \oint_{\mathcal{C}} dq\, \frac{e^{iqs}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon},$$

  und verwende den Residuensatz.

- Anforderung an $\mathcal{C}$:
  - $\mathcal{C}$ muss die reelle Achse enthalten.
  - Der Rest darf nicht zum Integral beitragen.

- Vorgehensweise:

  Erweitere den Integrationsweg auf eine geschlossene Kontur $\mathcal{C}$ in der komplexen Ebene,

$$F_k^{(\pm)}(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \frac{e^{iqs}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} = \oint_{\mathcal{C}} dq \, \frac{e^{iqs}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon},$$

  und verwende den Residuensatz.

- Anforderung an $\mathcal{C}$:
  - $\mathcal{C}$ muss die reelle Achse enthalten.
  - Der Rest darf nicht zum Integral beitragen.

- e^{iqs} verschwindet in der oberen komplexen Halbebene exponentiell mit $|q|$

$$\Rightarrow \quad F_k^{(\pm)}(s) = \oint_{\curvearrowleft} dq \, \frac{e^{iqs}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \qquad \text{(Halbkreis im Unendlichen trägt nicht bei)}$$

- $\frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2 - (k \pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$

- $$\frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-k^2\mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-(k\pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$$
  $$= \frac{-1}{(q-k\mp i\varepsilon')(q+k\pm i\varepsilon')} = -\frac{1}{2k}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

$$\frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-k^2\mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-(k\pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$$

$$= \frac{-1}{(q-k\mp i\varepsilon')(q+k\pm i\varepsilon')} = -\frac{1}{2k}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

$$\Rightarrow \quad G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\oint_{\circlearrowleft} dq\, e^{iqs}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

- $$\frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-k^2\mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-(k\pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$$
$$= \frac{-1}{(q-k\mp i\varepsilon')(q+k\pm i\varepsilon')} = -\frac{1}{2k}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

$$\Rightarrow \quad G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\oint_{\curvearrowleft} dq\, e^{iqs}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

- relevant für den Residuensatz: Pole in der oberen Halbebene

- $\frac{1}{k^2-q^2 \pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-k^2 \mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-(k \pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$

$$= \frac{-1}{(q-k \mp i\varepsilon')(q+k \pm i\varepsilon')} = -\frac{1}{2k}\left(\frac{1}{q-k \mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k \pm i\varepsilon'}\right)$$

$$\Rightarrow G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\oint_{\curvearrowleft} dq\, e^{iqs}\left(\frac{1}{q-k \mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k \pm i\varepsilon'}\right)$$

- relevant für den Residuensatz: Pole in der oberen Halbebene
  - $G_k^{(+)}$: Pol bei $q = k + i\varepsilon'$, Residuum: e^{iks}

$$\frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-k^2\mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-(k\pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$$

$$= \frac{-1}{(q-k\mp i\varepsilon')(q+k\pm i\varepsilon')} = -\frac{1}{2k}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

$$\Rightarrow\ G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\oint_{\curvearrowleft} dq\, e^{iqs}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

- relevant für den Residuensatz: Pole in der oberen Halbebene
  - $G_k^{(+)}$: Pol bei $q = k + i\varepsilon'$, Residuum: e^{iks}
  - $G_k^{(-)}$: Pol bei $q = -k + i\varepsilon'$, Residuum: $-e^{-iks}$

- $\frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-k^2\mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-(k\pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$

$$= \frac{-1}{(q-k\mp i\varepsilon')(q+k\pm i\varepsilon')} = -\frac{1}{2k}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

$$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\oint_{\curvearrowleft} dq\, e^{iqs}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

- relevant für den Residuensatz: Pole in der oberen Halbebene
  - $G_k^{(+)}$: Pol bei $q = k + i\varepsilon'$, Residuum: e^{iks}
  - $G_k^{(-)}$: Pol bei $q = -k + i\varepsilon'$, Residuum: $-e^{-iks}$

$$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \pm\frac{i}{2\pi}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\,e^{\pm iks} = -\frac{1}{4\pi}\frac{1}{s}\,e^{\pm iks}$$

- $\frac{1}{k^2-q^2\pm i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-k^2\mp i\varepsilon} = \frac{-1}{q^2-(k\pm i\varepsilon')^2}, \qquad \varepsilon = 2k\varepsilon'$

$$= \frac{-1}{(q-k\mp i\varepsilon')(q+k\pm i\varepsilon')} = -\frac{1}{2k}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

$$\Rightarrow\ G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\oint dq\, e^{iqs}\left(\frac{1}{q-k\mp i\varepsilon'} - \frac{1}{q+k\pm i\varepsilon'}\right)$$

- relevant für den Residuensatz: Pole in der oberen Halbebene
  - $G_k^{(+)}$: Pol bei $q = k + i\varepsilon'$, Residuum: e^{iks}
  - $G_k^{(-)}$: Pol bei $q = -k + i\varepsilon'$, Residuum: $-e^{-iks}$

$$\Rightarrow\ G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \pm\frac{i}{2\pi}\frac{1}{2ks}\frac{d}{ds}\, e^{\pm iks} = -\frac{1}{4\pi}\frac{1}{s}\, e^{\pm iks}$$

$$\Rightarrow\ \boxed{G_k^{(\pm)}(\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}$$

Verhalten für r $\to \infty$

Verhalten für r $\rightarrow \infty$

- $r \to \infty \quad \Rightarrow \quad r \gg r'$

Verhalten für r $\to \infty$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $r \to \infty \quad \Rightarrow \quad r \gg r'$
- $|\vec{r} - \vec{r}\,'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}\,')^2} = \sqrt{\vec{r}^{\,2} - 2\vec{r} \cdot \vec{r}\,' + \vec{r}\,'^{\,2}} = r\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2} + \frac{r'^{\,2}}{r^2}}$

Verhalten für r $\to \infty$

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- $r \to \infty \quad \Rightarrow \quad r \gg r'$
- $|\vec{r} - \vec{r}\,'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}\,')^2} = \sqrt{\vec{r}^{\,2} - 2\vec{r} \cdot \vec{r}\,' + \vec{r}\,'^{\,2}} = r\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}\,'}{r^2} + \frac{r'^{\,2}}{r^2}}$

$$\xrightarrow{r \gg r'} \; r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}\,' \equiv r - \hat{r} \cdot \vec{r}\,'$$

Verhalten für r $\to \infty$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $r \to \infty \quad \Rightarrow \quad r \gg r'$
- $|\vec{r} - \vec{r}\,'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}\,')^2} = \sqrt{\vec{r}^{\,2} - 2\vec{r} \cdot \vec{r}\,' + \vec{r}\,'^{\,2}} = r\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2} + \frac{r'^{\,2}}{r^2}}$

$$\xrightarrow{r \gg r'} \; r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}\,' \equiv r - \hat{r} \cdot \vec{r}\,'$$

$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') \; \xrightarrow{r \gg r'} \; -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \, e^{\mp ik\hat{r}\cdot\vec{r}\,'} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \, e^{\mp i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}, \qquad \vec{k}\,' \equiv k\hat{r}$

Verhalten für r $\to \infty$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $r \to \infty \quad \Rightarrow \quad r \gg r'$
- $|\vec{r} - \vec{r}\,'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}\,')^2} = \sqrt{\vec{r}^{\,2} - 2\vec{r} \cdot \vec{r}\,' + \vec{r}\,'^{\,2}} = r\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2} + \frac{r'^{\,2}}{r^2}}$

$$\xrightarrow{r \gg r'} \; r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}\,' \equiv r - \hat{r} \cdot \vec{r}\,'$$

$$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') \; \xrightarrow{r \gg r'} \; -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \, e^{\mp ik\hat{r}\cdot\vec{r}\,'} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \, e^{\mp i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}, \qquad \vec{k}\,' \equiv k\hat{r}$$

- $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r' \, G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') \, V(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$

Verhalten für r $\to \infty$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $r \to \infty \quad \Rightarrow \quad r \gg r'$
- $|\vec{r} - \vec{r}\,'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}\,')^2} = \sqrt{\vec{r}^{\,2} - 2\vec{r} \cdot \vec{r}\,' + \vec{r}\,'^{\,2}} = r\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2} + \frac{r'^{\,2}}{r^2}}$

$$\xrightarrow{r \gg r'} r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}\,' \equiv r - \hat{r} \cdot \vec{r}\,'$$

$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') \xrightarrow{r \gg r'} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} e^{\mp ik\hat{r}\cdot\vec{r}\,'} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} e^{\mp i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}, \qquad \vec{k}\,' \equiv k\hat{r}$

- $G_k^{(+)}$: auslaufende Kugelwellen ➞ richtige Asymptotik
- $G_k^{(-)}$: einlaufende Kugelwellen ➞ falsche Asymptotik

- $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r' \, G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') \, V(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$

Verhalten für r $\rightarrow \infty$

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- $r \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad r \gg r'$
- $|\vec{r} - \vec{r}\,'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}\,')^2} = \sqrt{\vec{r}^{\,2} - 2\vec{r} \cdot \vec{r}\,' + \vec{r}\,'^{\,2}} = r\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}\,'}{r^2} + \frac{r'^{\,2}}{r^2}}$

$$\xrightarrow{r \gg r'} \; r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}\,' \equiv r - \hat{r} \cdot \vec{r}\,'$$

$\Rightarrow \; G_k^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}\,') \xrightarrow{r \gg r'} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} e^{\mp ik\hat{r} \cdot \vec{r}\,'} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} e^{\mp i\vec{k}\,' \cdot \vec{r}\,'}, \qquad \vec{k}\,' \equiv k\hat{r}$

  - $G_k^{(+)}$: auslaufende Kugelwellen ➞ richtige Asymptotik
  - $G_k^{(-)}$: einlaufende Kugelwellen ➞ falsche Asymptotik

- $\boxed{\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r' \, G_k^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}\,') \, V(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')}$

- $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r' \, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,') \, V(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$

$$\xrightarrow{r \gg r'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, V(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

- $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r'\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, V(\vec{r}\,')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$

$$\xrightarrow{r \gg r'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

$$\Rightarrow \boxed{f(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')}$$

3.4 Die Born'sche Reihe

3.4 Die Born'sche Reihe

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bisher:

  Schrödinger-Gleichung noch nicht gelöst, sondern nur die Differenzialgleichung in eine Integralgleichung überführt:

  $$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r' \, G_k^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}\,') \, V(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

3.4 Die Born'sche Reihe

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bisher:

  Schrödinger-Gleichung noch nicht gelöst, sondern nur die Differenzialgleichung in eine Integralgleichung überführt:

  $$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3r' \, G_k^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}\,') \, V(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

- Vorteile:
  - Randbedingungen bereits eingearbeitet
  - günstigerer Startpunkt für numerische oder approximative Lösungen:

    Für schwache Potenziale ist das Integral nur eine kleine Korrektur zur einlaufenden Welle. $\rightarrow$ iterative Lösung

- Setze $U(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\, V(\vec{r})$

$$\Rightarrow \quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r'\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

- Setze $U(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})$

$$\Rightarrow \quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r'\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r'\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,') \Big[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} + \int d^3r''\, G_k^{(+)}(\vec{r}\,',\vec{r}\,'')\, U(\vec{r}\,'')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,'') \Big]$$

- Setze $U(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\, V(\vec{r})$

$$\Rightarrow \quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r'\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r'\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,') \Big[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} + \int d^3r''\, G_k^{(+)}(\vec{r}\,',\vec{r}\,'')\, U(\vec{r}\,'')\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,'') \Big]$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r'\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} + \int d^3r' \int d^3r''\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')\, G_k^{(+)}(\vec{r}\,',\vec{r}\,'')\, U(\vec{r}\,'')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''} + \ldots$$

→ Born'sche Reihe:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_{j=1}^{\infty} \int d^3r'\, K_k^{(j)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

mit

$$K_k^{(1)}(\vec{r},\vec{r}\,') = G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')$$

$$K_k^{(j+1)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \int d^3r''\, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,'')\, U(\vec{r}\,'')\, K_k^{(j)}(\vec{r}\,'',\vec{r}\,')$$

→ Born'sche Reihe:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_{j=1}^{\infty} \int d^3r' \, K_k^{(j)}(\vec{r},\vec{r}\,') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

mit

$$K_k^{(1)}(\vec{r},\vec{r}\,') = G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,') \, U(\vec{r}\,')$$

$$K_k^{(j+1)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \int d^3r'' \, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,'') \, U(\vec{r}\,'') \, K_k^{(j)}(\vec{r}\,'',\vec{r}\,')$$

- Streuamplitude: $f(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, U(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$

→ Born'sche Reihe:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_{j=1}^{\infty} \int d^3r' \, K_k^{(j)}(\vec{r},\vec{r}\,') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

mit

$$K_k^{(1)}(\vec{r},\vec{r}\,') = G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,') \, U(\vec{r}\,')$$

$$K_k^{(j+1)}(\vec{r},\vec{r}\,') = \int d^3r'' \, G_k^{(+)}(\vec{r},\vec{r}\,'') \, U(\vec{r}\,'') \, K_k^{(j)}(\vec{r}\,'',\vec{r}\,')$$

- Streuamplitude: $f(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, U(\vec{r}\,') \, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$

$$\Rightarrow \quad f(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \Big\{ \int d^3r' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, U(\vec{r}\,') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

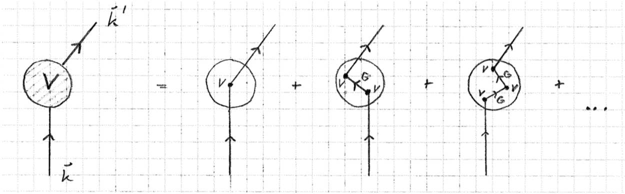
$$+ \int d^3r' \int d^3r'' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, U(\vec{r}\,') \, G_k^{(+)}(\vec{r}\,',\vec{r}\,'') \, U(\vec{r}\,'') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}$$

$$+ \ldots \Big\}$$

- Born'sche Reihe für die Streuamplitude:

$$f(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi}\Big\{ \int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, U(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} + \int d^3r' \int d^3r''\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, U(\vec{r}\,')\, G_k^{(+)}(\vec{r}\,',\vec{r}\,'')\, U(\vec{r}\,'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''} + \ldots \Big\} = \sum_{j=1}^{\infty} f^{(j)}(\vec{k}\,',\vec{k})$$

- Interpretation:



Einfachstreuung + Zweifachstr. + Dreifachstr. + ...

(Erste) Born'sche Näherung

- Berücksichtige nur den ersten Term:

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, U(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

(Erste) Born'sche Näherung

- Berücksichtige nur den ersten Term:

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, U(\vec{r}\,') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \, e^{-i(\vec{k}\,'-\vec{k})\cdot\vec{r}\,'} \, V(\vec{r}\,')$$

(Erste) Born'sche Näherung

- Berücksichtige nur den ersten Term:

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\tfrac{1}{4\pi} \int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, U(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

$$= -\tfrac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r'\, e^{-i(\vec{k}\,'-\vec{k})\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')$$

$\Rightarrow$

$$f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\tfrac{\mu}{2\pi\hbar^2}\, \tilde{V}(\vec{q})$$

$$\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3r'\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')$$ Fouriertransformierte des Potenzials

$$\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$$ „Impulsübertrag"

(Erste) Born'sche Näherung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Berücksichtige nur den ersten Term:

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, U(\vec{r}\,') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \, e^{-i(\vec{k}\,'-\vec{k})\cdot\vec{r}\,'} \, V(\vec{r}\,')$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\begin{array}{ll} f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{q}) & \\ \tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3r' \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}\,'} \, V(\vec{r}\,') & \text{Fouriertransformierte des Potenzials} \\ \vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k} & \text{„Impulsübertrag"} \end{array}}$$

- Zentralpotenzial: $V(\vec{r}) = V(r) \quad \Rightarrow \quad \tilde{V}(\vec{q}) = \tilde{V}(q)$

(Erste) Born'sche Näherung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Berücksichtige nur den ersten Term:

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, U(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r'\, e^{-i(\vec{k}\,'-\vec{k})\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')$$

$\Rightarrow$

$f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\, \tilde{V}(\vec{q})$	
$\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3r'\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')$	Fouriertransformierte des Potenzials
$\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$	„Impulsübertrag”

- Zentralpotenzial: $V(\vec{r}) = V(r) \quad \Rightarrow \quad \tilde{V}(\vec{q}) = \tilde{V}(q)$

$$\vec{q}^{\,2} = (\vec{k}\,' - \vec{k})^2 = \vec{k}\,'^2 + \vec{k}^{\,2} - 2\vec{k}\,'\cdot\vec{k} \overset{k'=k}{=} 2k^2(1-\cos\theta) = 4k^2 \sin^2\frac{\theta}{2}$$

$q = 2k\,\sin\frac{\theta}{2} \;\longrightarrow\; f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) \equiv f_k^{(1)}(\theta)$ hängt nur von k und θ ab
(gilt auch für die höheren Ordnungen).

Zweite Born'sche Näherung

- $f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k})$

Zweite Born'sche Näherung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k})$
- $f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' \int d^3r''\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')\, G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'')\, V(\vec{r}\,'')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}$

Zweite Born'sche Näherung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k})$
- $f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' \int d^3r'' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, V(\vec{r}\,') \, G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'') \, V(\vec{r}\,'') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}$
- $G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'') = \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \, e^{i\vec{k}\,''\cdot(\vec{r}\,'-\vec{r}\,'')} \, \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^2 + i\varepsilon}$

Zweite Born'sche Näherung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k})$
- $f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' \int d^3r''\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')\, G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'')\, V(\vec{r}\,'')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}$
- $G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'') = \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\,''\cdot(\vec{r}\,'-\vec{r}\,'')}\, \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^2 + i\varepsilon}$

$$\Rightarrow\; f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \left(\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\,''\cdot\vec{r}\,'}\right) \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^2 + i\varepsilon}$$
$$\times \left(\int d^3r''\, e^{-i\vec{k}\,''\cdot\vec{r}\,''}\, V(\vec{r}\,'')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}\right)$$

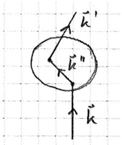
Zweite Born'sche Näherung

- $f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k})$
- $f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) \;=\; -\frac{1}{4\pi}\; \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' \int d^3r''\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\; V(\vec{r}\,')\, G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'')\, V(\vec{r}\,'')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}$
- $G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'') = \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\; e^{i\vec{k}\,''\cdot(\vec{r}\,'-\vec{r}\,'')}\; \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^2 + i\varepsilon}$

$$\Rightarrow\; f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) \;=\; -\frac{1}{4\pi}\; \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \left(\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}\; V(\vec{r}\,')\; e^{i\vec{k}\,''\cdot\vec{r}\,'}\right) \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^2 + i\varepsilon}$$

$$\times \quad \left(\int d^3r''\, e^{-i\vec{k}\,''\cdot\vec{r}\,''}\; V(\vec{r}\,'')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}\right)$$

$$=\; -\frac{1}{4\pi}\; \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\; \tilde{V}(\vec{k}\,' - \vec{k}\,'')\; \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^2 + i\varepsilon}\; \tilde{V}(\vec{k}\,'' - \vec{k})$$



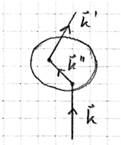
Zweite Born'sche Näherung

- $f(\vec{k}\,', \vec{k}) \approx f^{(1)}(\vec{k}\,', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k})$
- $f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int d^3r' \int d^3r'' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, V(\vec{r}\,') \, G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'') \, V(\vec{r}\,'') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}$
- $G_k^{(+)}(\vec{r}\,', \vec{r}\,'') = \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \, e^{i\vec{k}\,''\cdot(\vec{r}\,'-\vec{r}\,'')} \, \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^{2} + i\varepsilon}$

$$\Rightarrow \quad f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \left(\int d^3r' \, e^{-i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'} \, V(\vec{r}\,') \, e^{i\vec{k}\,''\cdot\vec{r}\,'} \right) \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^{2} + i\varepsilon}$$

$$\times \left(\int d^3r'' \, e^{-i\vec{k}\,''\cdot\vec{r}\,''} \, V(\vec{r}\,'') \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,''} \right)$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \, \tilde{V}(\vec{k}\,' - \vec{k}\,'') \, \frac{1}{\vec{k}^{\,2} - \vec{k}\,''^{2} + i\varepsilon} \, \tilde{V}(\vec{k}\,'' - \vec{k})$$



$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \, \tilde{V}(\vec{k}\,' - \vec{k}\,'') \, \frac{1}{E - E'' + i\varepsilon} \, \tilde{V}(\vec{k}\,'' - \vec{k})$$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ und $E'' = \frac{\hbar^2 k''^2}{2\mu}$

$$\boxed{f^{(2)}(\vec{k}\,',\vec{k}) \;=\; -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\;\int\frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\;\tilde{V}(\vec{k}\,'-\vec{k}\,'')\;\frac{1}{E-E''+i\varepsilon}\;\tilde{V}(\vec{k}\,''-\vec{k})}$$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ und $E'' = \frac{\hbar^2 k''^2}{2\mu}$

$$\boxed{f^{(2)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\, \tilde{V}(\vec{k}\,' - \vec{k}\,'')\, \frac{1}{E - E'' + i\varepsilon}\, \tilde{V}(\vec{k}\,'' - \vec{k})}$$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ und $E'' = \frac{\hbar^2 k''^2}{2\mu}$

- $\int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3}$ ➞ i.A. gilt $E'' \neq E$: virtueller Zwischenzustand („off shell")
- Energienenner: $\frac{1}{E - E'' + i\varepsilon}$ (vgl. 2. Ordnung Störungstheorie)

  ➞ Zwischenzustände mit $E'' \approx E$ tragen am stärksten bei.

$$\boxed{f^{(2)}(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\,\tilde{V}(\vec{k}\,'-\vec{k}\,'')\,\frac{1}{E-E''+i\varepsilon}\,\tilde{V}(\vec{k}\,''-\vec{k})}$$

mit $E = \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}$ und $E'' = \frac{\hbar^2k''^2}{2\mu}$

- $\int\frac{d^3k''}{(2\pi)^3}$ ➞ i.A. gilt $E'' \neq E$: virtueller Zwischenzustand („off shell")
- Energienenner: $\frac{1}{E-E''+i\varepsilon}$ (vgl. 2. Ordnung Störungstheorie)
  ➞ Zwischenzustände mit $E'' \approx E$ tragen am stärksten bei.
- Ausführung des Intergrals mit Hilfe des Residuensatzes:
  Letztendlich tragen doch nur Zustände mit $k'' = k \Leftrightarrow E'' = E$ bei.

- *n*-te Ordnung:

$$\boxed{\begin{aligned} f^{(n)}(\vec{k}\,', \vec{k}) = & -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \dots \frac{d^3k_{n-1}}{(2\pi)^3}\, \tilde{V}(\vec{k}\,' - \vec{k}_{n-1})\, \frac{1}{E-E_{n-1}+i\varepsilon} \\ & \times \quad \tilde{V}(\vec{k}_{n-1} - \vec{k}_{n-2})\, \frac{1}{E-E_{n-2}+i\varepsilon} \dots \frac{1}{E-E_1+i\varepsilon}\, \tilde{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}) \end{aligned}}$$