Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. C. Jurecka
Dipl.-Phys. F. Heidrich-Meisner

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK WS 2001/2002

7. Übungsblatt

9. **KKR und Streutheorie**

In dieser Aufgabe soll die KKR Eigenwertgleichung

$$\left| A_{lm,l'm'} + k\delta_{ll'}\delta_{mm'}\frac{(n_l L_l - n_l')}{j_l L_l - j_l'} \right| = 0 \tag{1}$$

mit spärischen Besselfunktionen $j_l(x) = (\frac{\pi}{2x})^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(x)$ und sphärischen Hankelfunktionen $n_l(x) = (\frac{\pi}{2x})^{\frac{1}{2}} J_{-l-\frac{1}{2}}(x)$, sowie $j_l'(x) = \frac{dj_l(x)}{dx}$ und $n_l'(x) = \frac{dn_l(x)}{dx}$ im Rahmen der Streutheorie interpretiert werden.

- Die Wellenfunktion eines aus z-Richtung einfallenden Teilchens, das an einem Potential $V(\mathbf{r})$ gestreut wird, ist gegeben durch

$$\psi = e^{ikz} - \frac{1}{2\pi}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \tag{2}$$

Zeigen Sie, daß für $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ die Wellenfunktion ψ als

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{3}$$

geschrieben werden kann. Hier ist θ der Winkel zwischen $\mathbf{k}$ und der z-Achse und

$$f(\theta) = -\frac{1}{2\pi} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \tag{4}$$

- Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ kann nun in sphärischen Harmonischen entwickelt werden

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}(2l+1)i^l c_l R_l(r) P_l(\cos\theta) \tag{5}$$

wobei R_l die Lösungen der radialen Schrödingergleichung sind. Ebene Wellen lassen sich ähnlich darstellen, es gilt

$$e^{ikz} = \sum_l (2l+1)i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta). \tag{6}$$

Zeigen Sie durch einsetzen von (5) und (6) in (3), daß gilt

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)e^{i\eta_l}\sin\eta_l P_l(\cos\theta). \tag{7}$$

Hierbei sollten Sie folgende Entwicklungen für große r verwenden (η_l ist die Streuphase):

$$j_l(kr) \to \frac{1}{kr}\sin(kr - \frac{l\pi}{2}) \tag{8}$$

$$R_l(kr) \to \frac{1}{kr}\sin(kr + \eta_l - \frac{l\pi}{2}). \tag{9}$$

Überlegen Sie sich, in welcher Größe der Einfluß des Potentials steckt.

- Zeigen Sie durch Einsetzen von (5) und (6) in (4) und unter Verwendung der Orthogonalitätsrelation $\int_0^\pi P_l(\cos\theta)P_m(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \delta_{lm}\frac{2}{2l+1}$

$$f(\theta) = -\sum_l (2l+1)e^{i\eta_l}\int_0^\infty j_l(kr)V(r)R_l(r)r^2 dr P_l(\cos\theta). \tag{10}$$

  Bestimmen Sie durch Vergleich mit (7) einen Ausdruck für η_l.

- Zeigen Sie mit

$$n_l(kr) \to -\frac{1}{kr}\cos(kr - \frac{l\pi}{2}) \tag{11}$$

  und dem Additionstheorem $\sin(kr + l\pi/2 + \delta_l) = \cos\delta_l[\sin(kr - l\pi/2) + \tan\delta_l \cos(kr - l\pi/2)$ daß

$$R_l \propto [j_l(kr) - \tan\eta_l n_l(kr)] \tag{12}$$

  und

$$L_l = \frac{R_l'(r)}{R_l(r)} = \frac{j_l'(kr) - \tan\eta_l n_l'(kr)}{j_l(kr) - \tan\eta_l n_l(kr)}, \tag{13}$$

  sowie

$$\tan\eta_l = \frac{L_l j_l(kr) - j'(kr)}{L_l n_l(kr) - n_l'(kr)} \tag{14}$$

  gelten.

- Setzen Sie (14) in die KKR Gleichung (1) ein.