Dr. M. Bier (bier@is.mpg.de)
M.Sc. H. Bartsch

Physik der Flüssigkeiten: Vertiefung **SoSe 2018**

3. Übungsblatt (`http://www.is.mpg.de/dietrich/lehre/PdF`) **10. Juli 2018**

7. *Inelastische Neutronenstreuung*

Betrachten Sie in $d = 3$ Raumdimensionen die Streuung von Neutronen (Masse M) an den Atomkernen einer einfachen Flüssigkeit. Es soll hier vom einfachen Fall spinpolarisierter Neutronen und Atomkerne ausgegangen werden, sodass das räumlich stark lokalisierte Wechselwirkungspotential $V(\mathbf{r}, \mathcal{C})$ zwischen einem Neutron am Ort $\mathbf{r}$ und den Atomkernen durch

$$V(\mathbf{r}, \mathcal{C}) = \frac{2\pi\hbar^2 b}{M} \sum_{j=1}^{N[\mathcal{C}]} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j(\mathcal{C})) = \frac{2\pi\hbar^2 b}{M} \widetilde{\varrho}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathcal{C}) \tag{1}$$

gegeben ist. Die Stärke der Neutron-Atomkern-Wechselwirkung wird durch den Parameter b beschrieben, der die Dimension einer Länge hat und daher *Steulänge* heißt.

Der gesamte Hamilton-Operator der Neutronen $\widehat{H}(t)$ ist in Ortsdarstellung gegeben durch

$$\widehat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, \mathcal{C}(t)), \tag{2}$$

wobei die Zeitabhängigkeit des Mikrozustands $\mathcal{C}(t)$ der Flüssigkeit berücksichtigt wurde.

(a) Zeigen Sie, dass die Koeffizienten $c_{\mathbf{k}}(t)$ der Entwicklung der Neutronenwellenfunktion

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \mathrm{d}^3k\, c_{\mathbf{k}}(t) \exp\left(-i\frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar}t\right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{3}$$

nach ebenen Wellen

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{|\mathcal{V}|}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2M} \tag{4}$$

der Differentialgleichung

$$\dot{c}_{\mathbf{k}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int \mathrm{d}^3k'\, c_{\mathbf{k}'}(t) \exp\left(i\frac{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}}{\hbar}t\right) V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(t) \tag{5}$$

mit

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(t) = \int \mathrm{d}^3r\, \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})^* V(\mathbf{r}, \mathcal{C}(t)) \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \tag{6}$$

genügt.

(b) Zeigen Sie, dass die Koeffizienten $c_{\mathbf{k}}(t)$ in Gl. (3) bei hinreichend schwacher Neutron-Atomkern-Wechselwirkung durch

$$c_{\mathbf{k}}(t) \simeq c_{\mathbf{k}}(0) - \frac{i}{\hbar} \int \mathrm{d}^3k'\, c_{\mathbf{k}'}(0) \int_0^t \mathrm{d}t'\, \exp\left(i\frac{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}}{\hbar}t'\right) V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(t') \tag{7}$$

gegeben sind.

Fortsetzung auf Seite 2

(c) Für ein monochromatisches "einlaufendes" Neutron im Zustand $\phi_{\mathbf{k}_1}$ gilt

$$c_{\mathbf{k}}(0) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1). \tag{8}$$

Bestimmen Sie damit $c_{\mathbf{k}_2}(t)$ für $\mathbf{k}_2 \neq \mathbf{k}_1$.

(d) Zeigen Sie durch Integration von $|c_{\mathbf{k}_2}(t)|^2, \mathbf{k}_2 \neq \mathbf{k}_1$, über die Mikrozustände $\mathcal{C}$ der Flüssigkeit, dass für lange Messzeiten t die Übergangs-Wahrscheinlichkeit $\overline{|c_{\mathbf{k}_2}(t)|^2}$ eines Neutrons von Zustand $\phi_{\mathbf{k}_1}$ in den Zustand $\phi_{\mathbf{k}_2}$ durch

$$\overline{|c_{\mathbf{k}_2}(t)|^2} \approx t\,\frac{(2\pi)^3(\hbar b)^2\varrho}{M^2|\mathcal{V}|}\,S(\mathbf{q},\omega) \tag{9}$$

gegeben ist, wobei ϱ die Einteilchendichte der Flüssigkeit, $S(\mathbf{q},\omega)$ der dynamische Strukturfaktor Gl. (C.1.21), $\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$ der Streuvektor und $\hbar\omega = E_{\mathbf{k}_2} - E_{\mathbf{k}_1}$ der Energieübertrag auf die Neutronen sind.

(e) Zeigen Sie, dass für lange Messzeiten t die Wahrscheinlichkeit $N_D(t)$ eines Neutrons, im Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ um $\mathbf{k}_2/|\mathbf{k}_2|$ und im Energieintervall $\hbar\mathrm{d}\omega$ um $E_{\mathbf{k}_2}$ detektiert zu werden, durch

$$N_D(t) = t\,\frac{\hbar b^2\varrho|\mathbf{k}_2|}{M}\,S(\mathbf{q},\omega)\,\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega \tag{10}$$

gegeben ist.
(Hinweis: Die Zustandsdichte im $\mathbf{k}$-Raum beträgt $|\mathcal{V}|/(2\pi)^3$.)

(f) Drücken Sie den differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} = \frac{\dot{N}_D(t)/(\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega)}{\varrho|\mathcal{V}||\mathbf{j}_1|} \tag{11}$$

durch den dynamischen Strukturfaktor $S(\mathbf{q},\omega)$ aus, wobei $\mathbf{j}_1$ die Stromdichte des "einlaufenden" Neutrons ist.

8. *α- und β-Relaxation*

Betrachten Sie in $d = 3$ Raumdimensionen eine einfache homogene dichte Flüssigkeit im thermodynamischen Gleichgewicht für die die Van-Hove-Selbstkorrelationsfunktion $\mathcal{G}_s(r,t)$, $r = |\mathbf{r}|$, der Diffusionsgleichung (vgl. Gl. (C.1.35))

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_s(r,t) = \frac{D}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\mathcal{G}_s}{\partial r}(r,t)\right) \tag{12}$$

genügen soll.

(a) In der Vorlesung wurde die β-Relaxation in dichten Flüssigkeiten als Diffusion in einem von Nachbarteilchen erzeugten "Käfig" mit Radius R dargestellt.
Bestimmen und diskutieren Sie die intermediäre Selbststreufunktion $F_s^\beta(q,t)$, $q = |\mathbf{q}|$, der β-Relaxation aus der Lösung von Gl. (12) mit den Anfangs- und Randbedingungen

$$\mathcal{G}_s(r,0) = \frac{\delta(r)}{4\pi r^2}, \quad \frac{\partial\mathcal{G}_s}{\partial r}(0,t) = 0, \quad \frac{\partial\mathcal{G}_s}{\partial r}(R,t) = 0. \tag{13}$$

Fortsetzung auf Seite 3

Anleitung:

- Leiten Sie zunächst für $F_s^\beta(q,t)$ die inhomogene lineare gewöhnliche Differentialgleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + Dq^2\right) F_s^\beta(q,t) = 4\pi D \left(\frac{\sin(qR)}{q} - R\cos(qR)\right) \mathcal{G}_s(R,t) \tag{14}$$

  her.

- Zeigen Sie dann mit Hilfe der Greenschen Funktion des Differentialoperators $\partial/\partial t + Dq^2$, dass sich $F_s^\beta(q,t)$ in der Form

$$F_s^\beta(q,t) = \exp(-Dq^2 t)\left(1 + 4\pi D\left(\frac{\sin(qR)}{q} - R\cos(qR)\right)\int_0^t \mathrm{d}t' \, \exp(Dq^2 t')\mathcal{G}_s(R,t')\right) \tag{15}$$

  schreiben lässt.

- Mit Hilfe der Laplace-Transformation lässt sich zeigen, dass für die Lösung von Gln. (12) und (13) bei $r = R$

$$\mathcal{G}_s(R,t') = \frac{3}{4\pi R^3} + \frac{1}{2\pi R^3}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp\left(-\frac{y_n^2 D}{R^2} t'\right)}{\cos(y_n)} \tag{16}$$

  gilt, wobei $y_n \in (n\pi, (n+\frac{1}{2})\pi), n \in \{0,1,2,3,\dots\}$, die positiven Lösungen (also $\neq 0$) der transzendenten Gleichung $y_n = \tan(y_n)$ sind. Verwenden Sie diesen Ausdruck für $\mathcal{G}_s(R,t')$, um $F_s^\beta(q,t)$ zu bestimmen.

(b) Nach Abklingen der β- aber vor Einsetzen der α-Relaxation beschreibt die Van-Hove-Selbstkorrelationsfunktion $\mathcal{G}_s(r,t)$ eine Gleichverteilung in einer Kugel mit Radius R. Bestimmen und diskutieren Sie die intermediäre Selbststreufunktion $F_s^\alpha(q,t)$ der α-Relaxation nach Aufbrechen des "Käfigs" aus der Lösung von Gl. (12) mit den Anfangs- und Randbedingungen

$$\mathcal{G}_s(r,0) = \frac{3}{4\pi R^3}\Theta(R-r), \quad \frac{\partial \mathcal{G}_s}{\partial r}(0,t) = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{G}_s}{\partial r}(\infty,t) = 0. \tag{17}$$