Lekce III – Časově nezávislá formulace rozptylu

... klíč .. stacionární stavy ... $|p\rangle \to |p+\rangle \equiv \Omega_+ |p\rangle$

... časový vývoj ... e^{iEt} $\xleftrightarrow[\text{fourier}]{}$ místo t-dep. máme E-dep.

cíl: najít rovnice pro $|p+\rangle$ a vyjádřit S matici pomocí $|p+\rangle$

Greenův operátor (G-funkce, fundamentální řešení S.R.)

Def: $\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)\hat{G}(t) = \delta(t)\,\hat{I}$ ... pro $H \to H_0$ def G_0

řešení ... $A_- e^{-iHt}$ pro $t<0$; $A_+ e^{-iHt}$ pro $t>0$ + správně velký skok v $t=0$

$\rightarrow \quad \hat{G}^{(+)}(t) = \begin{cases} -i\,e^{-iHt} & t>0 \\ 0 & t<0 \end{cases} = -i\,\theta(t)\,e^{-iHt}$ ... retardovaný operátor

$\rightarrow \quad \hat{G}^{(-)}(t) = \begin{cases} 0 & t>0 \\ i\,e^{-iHt} & t<0 \end{cases} = i\,\theta(-t)\,e^{-iHt}$ ... advancovaný

význam: • až na $\pm i$ splývá s $U(t)$ $\begin{cases} t>0 \\ t<0 \end{cases}$ pro $\begin{cases} \text{retard.} \\ \text{adv.} \end{cases}$

$e^{-iHt} \equiv U$

• umožňuje konstruovat řešení s nenulovou pravou str:

$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)\psi(t) = \phi(t) \quad \rightarrow \quad \psi(t) = \int G_0(t-t')\,\phi(t')\,dt' + \phi_0(t)$

spec. $\phi = V\psi(t) \quad \rightarrow \quad \psi(t) = \psi_{in}(t) + \int_{-\infty}^{t} G_0^{(+)}(t-t')\,V\,\psi(t')\,dt'$

... konstrukce orbity $\psi(t)$ z in asypt. $\psi_{in}(t)$

... pro $t \to -\infty$ překryv ψ a V zanedb. ... $\psi(t) = \psi_{in}(t)$

• funguje jako fundamentální řešení S.R. pro poč. podm. $\delta(x-x')$

... např. $iG^{(+)}(t \to 0+, x, x') \longrightarrow \delta(x-x')$

tj. linearita $\Rightarrow \psi(t) = i\,G_0^{(+)}(t)\,\psi(t=0) = i\int dx'\,G_0^{(+)}(t,x,x')\,\psi(t=0,x')$

• $\theta(t)$ v def. umožňuje správnou F.T. : $\hat{G}_0^{(\pm)}(t) \longleftrightarrow \hat{G}_0^{(\pm)}(E)$

$$\hat{G}_0^{(\pm)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{iEt}\, G_0^{(\pm)}(t) \qquad \text{.. podobně } \hat{G}(t) \leftrightarrow \hat{G}(E)$$

$$\hat{G}^{(\pm)}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi}\, e^{-iEt}\, G_0^{(\pm)}(E)$$

Rezolventa (bezčasová G-fce, operátor)

<u>def:</u> $\hat{G}(z) \equiv (z - H)^{-1}$; $\hat{G}_0(z) \equiv (z - H_0)^{-1}$

pro Fourier. transf. $\hat{G}_0^{(\pm)}(t)$ platí: $\hat{G}_0^{(\pm)}(E) = \lim\limits_{\varepsilon \to 0+} (E \pm i\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1}$

podobně $\hat{G}^{\pm}(t)$

DK: $$G^{(+)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{iEt} (-i)\,\theta(t) \sum_n |n\rangle\langle n| e^{-iE_n t}$$

$$= \sum_n |n\rangle\langle n| \, (-i) \lim_{\varepsilon \to 0+} \int_0^{\infty} dt\, e^{i(E - E_n + i\varepsilon)t}$$ ← regularizace

$$= \sum_n |n\rangle\langle n| \, (E + i\varepsilon - E_n)^{-1} = (E + i\varepsilon - H)^{-1}$$ c.b.d.

podobně pro $G^{(-)}(E)$ a $G_0^{(\pm)}(E)$

<u>Význam $\pm i\varepsilon$</u> : – přepíná retard./advanced
– dodává význam výrazu $(E-H)^{-1}$ v bodech spektra

<u>rozdíl</u>: $$G^{(+)}(E) - G^{(-)}(E) = \frac{1}{E + i\varepsilon - H} - \frac{1}{E - i\varepsilon - H} = -2\pi i\, \delta(E - H)$$

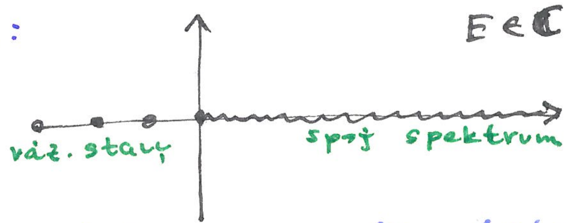
→ souvisí s hustotou stavů:

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = \mathrm{Tr}\, \delta(E - H) = -\frac{\mathrm{Tr}\left(G^{(+)} - G^{(-)}(E)\right)}{2\pi i}$$

$$= -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\left\{\mathrm{Tr}\left(G^{(+)}(E)\right)\right\}$$

<u>$G(z)$ jako funkce $z \in \mathbb{C}$</u>:

holomorfní, kromě bodů spektra H



→ možno analyticky prodlužovat za řez (zhora, či zdola)
... podrobně později

Důležitá vlastnost ... <u>Rezolventní rovnice</u> (L-S rovnice pro G-fci)

$$G(z) = G_0 + G_0 V G(z) \quad \text{a} \quad G(z) = G_0(z) + G(z) V G_0(z)$$

DK: $$G(z) = (z - H_0 - V)^{-1} \cdot \underbrace{(z - H_0 - V + V)}\, (z - H_0)^{-1}$$

$$= (z - H_0)^{-1} + (z - H_0 - V)^{-1} V (z - H_0)^{-1} = G_0 + G V G_0 \quad \checkmark$$

<u>iterace</u>: → Bornova řada

$$G(z) = G_0 \left(1 + G_0 V + (G_0 V)^2 + (G_0 V)^3 + \dots\right)$$

... základ poruch. počtu ve V (nebo $\frac{1}{E}$)

Souvislost s Mølerovými operátory

již dříve jsme odvodili ($\int d\tau \frac{d(U^+U_0)}{d\tau}$), že:

$$|\phi+\rangle \equiv \Omega_+|\phi\rangle \equiv \lim_{t\to-\infty} U^+(t)U^0(t)|\phi\rangle = |\phi\rangle - i\int_{-\infty}^{0} d\tau\, U(\tau)^+ V U_0(\tau)|\phi\rangle$$

vložení rozkladu $I = \int d^3p\, |\vec p\rangle\langle\vec p|$

pozn. $e^{\varepsilon\tau}$ lze vložit už tady

což je košer ... $\int$ konverguje absolutně

$$= |\phi\rangle - i\int d^3p \int_{-\infty}^{0} d\tau\, U^+(\tau) V e^{-iE_p\tau}|\vec p\rangle\langle\vec p|\phi\rangle$$

↪ vede na $\int_{-\infty}^{0} d\tau\, e^{iH\tau - iE_p\tau}$

... nekonverguje → trik ... adiabat. zapínání $V \longrightarrow e^{+\varepsilon|\tau|}V$

(funguje podob. pro Ω_- ... $e^{-\varepsilon\tau}$)

$$= |\phi\rangle - \int d^3p\; i \lim_{\varepsilon\to0+} \int_{-\infty}^{0} d\tau\, e^{-i\tau(E_p - H + i\varepsilon)} V|\vec p\rangle\langle\vec p|\phi\rangle$$

$$= |\phi\rangle + \lim_{\varepsilon\to0+} \int d^3p\, (E_p - H + i\varepsilon)^{-1} V|\vec p\rangle\langle\vec p|\phi\rangle$$

tj. $\boxed{\Omega^{(\pm)} = 1 + \int d^3p\, G(E_p \pm i\varepsilon) V|\vec p\rangle\langle\vec p|}$

pozn: $= \int d^3p\, |\vec p+\rangle\langle\vec p|$

neboli jinak $|\vec p\pm\rangle = |\vec p\rangle + G^{(\pm)}(E_p)V|\vec p\rangle$ .. $E_p = \frac{p^2}{2m}$

T-operátor, Lippmannova-Schwingerova rovnice

def: $T(z) \equiv V + VG(z)V$ — stejný argument $T(z)$, $G_0(z)$

vlastnosti: • $\boxed{T = V + VG_0T}$ ... L-S rovnice pro T

nebo $T = V + TG_0V$

DK: ~~formální~~ rozvoj G do řady: $G = G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + \dots$

$\longrightarrow T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \dots$

• $\boxed{GV = G_0T}$ a $\boxed{VG = TG_0}$ ⇐

• $\boxed{V|p+\rangle = T|p\rangle}$ ... použití $|p+\rangle = (1 + G^{(+)}V)|p\rangle$

↑ $T(E_p + i\varepsilon)$ .... $\langle p|T(E+i\varepsilon) = (T(E-i\varepsilon)|p\rangle)^+ = (V|p-\rangle)^+ = \langle p-|V$

$\Rightarrow GV|p\rangle = GT|p+\rangle = G_0V|p+\rangle \Rightarrow$

• $\boxed{|p\pm\rangle = |p\rangle + G_0^{(\pm)}(E_p)V|p\pm\rangle}$ ... Lippmannova-Schwinger. rovnice

... má ! řešení

Souvislost s S-maticí

pozn: $\langle \chi | S | \phi \rangle = \langle \chi | \Omega_{(-)}^{+} \Omega_{(+)} | \phi \rangle = \langle \chi - | \phi + \rangle$ ← pro $|\phi\rangle = |p\rangle$, $|\chi\rangle = |p'\rangle$ stac. rozpt. stavy

ale dokážeme i lépe:

$$\langle \chi | S | \phi \rangle = \lim_{\substack{t \to +\infty \\ t' \to -\infty}} \langle \chi | e^{iH_0 t} e^{-iHt} e^{iHt'} e^{-iH_0 t'} | \phi \rangle$$

← pokud ∃ lim, nezávisí na měru … spec. $t' = -t$

$$= \lim_{t \to +\infty} \langle \chi | \underbrace{e^{iH_0 t} e^{-2iHt} e^{iH_0 t}} | \phi \rangle$$

$$\to F(0) + \int_0^\infty \frac{d}{dt} F(t) \quad \dots \quad -i \left\{ e^{iH_0 t} V e^{-2iHt} e^{iH_0 t} - e e V e \right\}$$

$$= \langle \chi | \phi \rangle - i \int_0^\infty dt \, e^{-\varepsilon t} \left\{ e^{iH_0 t} V e^{-2iHt} e^{iH_0 t} + e^{iH_0 t} e^{-2iHt} V e^{iH_0 t} \right\}$$

speciálně:

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta_3(p - p') - i \lim_{\varepsilon \to 0+} \int_0^\infty dt \, \langle p' | V e^{i(E_{p'} + E_p + i\varepsilon - 2H)t} + e^{i(E_{p'} + E_p + i\varepsilon - 2H)t} V | p \rangle$$

$$= \delta_3(p - p') + \frac{1}{2} \lim \langle p' | \left\{ \underbrace{V G\left(\frac{E_{p'} + E_p}{2} + i\varepsilon\right)}_{T G_0} + \underbrace{G\left(\frac{E_{p'} + E_p}{2} + i\varepsilon\right) V}_{G_0 T} \right\} | p \rangle$$

$$= \delta_3(p - p') + \frac{1}{2} \langle p' | T\left(\frac{E_p + E_{p'}}{2} + i\varepsilon\right) | p \rangle \left\{ \frac{2}{E_{p'} - E_p + 2i\varepsilon} + \frac{2}{E_p - E_{p'} + 2i\varepsilon} \right\}$$

$$\frac{\pi \cdot P \cdot 2}{E_{p'} - E_p} - 2\pi i \delta(E_{p'} - E_p)$$

tj. $\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') - 2\pi i \, \delta(E_{p'} - E_p) \langle p' | T(E_p + i\varepsilon) | p \rangle$

tj. $\boxed{t_{p' \leftarrow p} \equiv \langle \vec{p}' | T(E_p + i\varepsilon) | \vec{p} \rangle}$ (t) … $E_p = \frac{p^2}{2m} = \frac{p'^2}{2m}$

pozn: $\boxed{\langle p' | T | p \rangle = \langle p' | V | p+ \rangle = \langle p' - | V | p \rangle}$

$\uparrow \cancel{(T(E + i\varepsilon) | p \rangle)^{+}}$

$\cancel{= \langle p | T(E - i\varepsilon) = \langle p - | V}$

…

závěr: stačí řešit L-S rovnici pro $|p+\rangle$ nebo $|p-\rangle$ → S matice a $\frac{d\sigma}{d\Omega}$

pozn: odvození vzorce (t) nezávisí na dimenzi

→ stejné pro 1D, 2D i 3D rozptyl

Souvislost L-S rovnice a Schröding er. rovnice

viděli jsme, že stac. rozptyl. řešení ~~...~~ $|\psi\rangle \equiv \Omega_+|p\rangle$ splňuje:

$$(LS)\quad |\psi\rangle = |p\rangle + G_0^{(+)}(E)\, V|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (SR)$$

DK: $G_0^{(+)}(E) = (E + i\varepsilon - H_0)^{-1}$ ... $i\varepsilon$ řeší probl. s nulou ve jmenovateli

(LS) vynásobíme $(E-H_0)$ (v čitateli netřeba $i\varepsilon$):

$$(E-H_0)|\psi\rangle = \underbrace{(E-H_0)|p\rangle}_{=0} + V|\psi\rangle \qquad \text{c.b.d.}$$

okrajová podmínka:
řešení (LS) je jednoznačné, u (SR) nekonečně řešení
jednoznačnost po upřesnění okraj. podm.

ODBOČKA: $G_0^{(+)}(E)$ v x-reprezentaci: → pozn: tohle je 3D; 2D je odlišné (Besselky) a v 1D: $G_0(z) = \frac{mi}{p_z}\exp(ip_z|x-x'|)$

dá se snadno najít transformací z p-reprezentace $G_0(z) = (z - \underbrace{\tfrac{p^2}{2m}}_{E_p})^{-1}$

platí: $$\langle \vec x | G_0(z)|\vec x'\rangle = -\frac{m}{2\pi}\frac{\exp\{ip_z|\vec x - \vec x'|\}}{|\vec x-\vec x'|} \equiv G_0(z,\vec x,\vec x')$$

kde $p_z = \sqrt{2mz}$ ... volíme tu větev, aby $\mathrm{Im}\, p_z > 0$

DK: $$\langle x|G_0(z)|x'\rangle = \int d^3p\, \langle x|G_0(z)|p\rangle\langle p|x'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3p\, \frac{e^{ip(x-x')}}{z-E_p}$$

pozn: $i\vec p\cdot(\vec x - \vec x') = ip\underbrace{|\vec x-\vec x'|}_{r}\cos\theta = ipr\cos\theta$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dp\, \frac{p^2}{z-E_p}\, 2\pi\int_0^\pi \underbrace{\sin\theta\, d\theta}_{d\mu}\, e^{ipr\cos\theta} = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{p^2dp}{z-E_p}\,\frac{1}{ipr}\left[e^{ipr\mu}\right]_{-1}^{1}$$

... $-\mu=\cos\theta$ ... $d\theta\,|\sin\theta| = d\mu$

$$= \frac{2mi}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} p\, dp\, \frac{1}{r}\,\frac{1}{p^2-2mz}\, e^{ipr} = \frac{2mi}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p}{r}\,\frac{e^{ipr}}{(p-p_z)(p+p_z)}$$

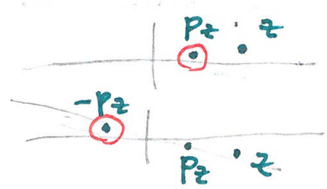
pozn: integrace reziduovou větou .. $r>0$ .. horní polor.; pól $p=p_z$

$$= \frac{2mi}{(2\pi)^2}\, 2\pi i\, \frac{p_z}{r}\cdot\frac{1}{2p_z}\, e^{ip_z r} = -\frac{m}{2\pi}\,\frac{e^{ip_z r}}{r} \qquad \text{c.b.d.}$$

pozn: $G_0^{(+)}(E) \times G_0^{(-)}(E)$ ... pozná se jen volbou p_z:

$z = E+i\varepsilon$ ... $p_z = \sqrt{2mz} = +\sqrt{2mE}$

$z = E-i\varepsilon$ ... $p_z = \sqrt{2mz} = -\sqrt{2mE}$



pozn: volba $\mathrm{Im}\, p_z>0$ znamená, že G_0 je inverzí $(z-\frac{p^2}{2m})$
$G_0^{(+)}(E)$ lze analyt. prodl. přes řez, ale $\mathrm{Im}\, p_z<0$ dá exp. houli rostoucí faktor a takové $G_0^{(+)}(z)$ nebude inverzí def. oborem operátoru. ... Fyzikální list $\mathrm{Im}\, p_z>0$. Nefyzikální $\mathrm{Im}\, p_z<0$

pozn: $G(z) \longleftarrow G(p) \leftarrow$ jednoznačná

↳ dvojznačná … Riemanova plocha $\sqrt{z}$ … Fyz/Nefyz List v energii.

asymptotika $|p+\rangle \equiv |\psi\rangle$ — pokračování: (= okraj. podmínka)

(LS) v x-reprezentaci:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi}\int d^3x' \frac{e^{ip|x-x'|}}{|x-x'|} V(x')\psi(x')$$

rozvoje pro $|\vec{x}| \to \infty$ … Gen. $r = |x|$ … $\vec{x} = r\cdot\vec{n}$

$$|x-x'| = \sqrt{(rn-x')^2} \simeq r\sqrt{1-2n_r\cdot\frac{x'}{r}} \simeq r - \vec{n}\cdot\vec{x}' = 0.\text{ř} + 1.\text{řád}$$

+ dosazení do $\frac{1}{|x-x'|}$ (do 0. ř.) a do $e^{ip|x-x'|}$ (do 1. ř.)

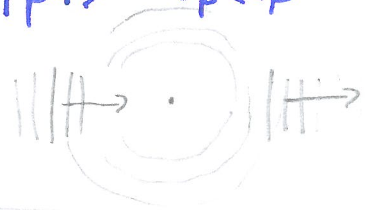
$$\psi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi}\frac{1}{r}e^{ipr}\int d^3x' e^{-ip\vec{n}\cdot\vec{x}'} V(x')\psi(x')$$

def: $\vec{p}' = p\vec{n}$ … radiálně ven směr. p

$$= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\Big[e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} \underbrace{- m(2\pi)^2}_{\text{správ. konst; předtím } t \to f} \underbrace{\int d^3x' \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{x}'} V(x')\psi(x')}_{\langle \vec{p}'|V|\vec{p}+\rangle = t_{p'\leftarrow p}} \cdot \frac{e^{ipr}}{r}\Big]$$

tj

$$\boxed{\psi(x) \xrightarrow[|x|\to\infty]{} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}\Big[e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} + f(p',p)\frac{e^{ipr}}{r}\Big]}$$



$\equiv \langle x|p\rangle$

pozn: okraj podm. ↑ poměrně nepraktická

jednodušší na implementaci … $\psi_{scatt} \equiv \psi(x) - \phi_p(x)$

+ def ~~radiální~~ fci $f(x) = r\,\psi_{scatt}(\vec{x})$ … $f'(r) = ipf(r)$ pro $r \to \infty$

obec. okraj podmínka Newton. typu Siegertova okraj. podm.

… implementace → ℂ potenciál — absobce

Jakou rovnici splňuje ψ_{scatt}?

$$\boxed{(E-H)\,\psi_{scatt} = (H_0+V-E)|p\rangle = V|p\rangle}$$ … (nehomogenní SR)

pozn: účinný průřez z asymptotiky: (z podílu toků) →

vycházející tok (normovaný na $1\,d\Omega$) $= \frac{d\sigma}{d\Omega}\cdot$ přicházející tok (norm. na 1 plochu)

tok pravděpodobnosti: $\vec{j} = \frac{i}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$ (na 1 plochu) → $\vec{j} = \frac{i}{2m}(-i\vec{p}-i\vec{p}) = \frac{\vec{p}}{m}$

radiální tok

$D(f(r)) = f'(r)\vec{e}_r \to D\left(f\frac{e^{ipr}}{r}\right) = \left[\frac{ip}{r} - \cancel{\frac{1}{r^2}}\right]e^{ipr}\vec{e}_r f$

↳ ubývá moc rychle

$\to j\,r^2 = \frac{i}{2m}\left[-\frac{ip}{r^2} - \frac{ip}{r^2}\right]r^2 = \frac{p}{m}\vec{e}_r|f|^2$

↳ normování na úhel

$$\longrightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2\cdot\frac{p}{m}\Big/\frac{p}{m} = |f|^2$$