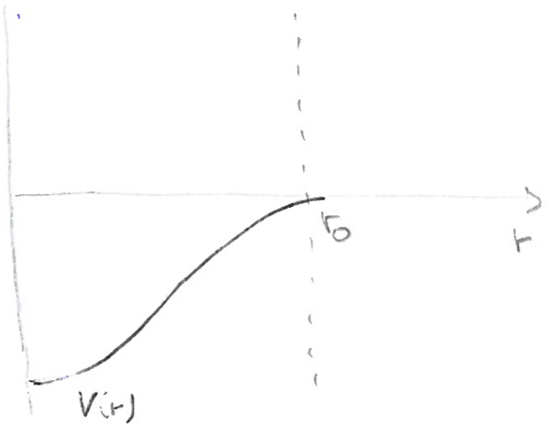
Metoda R-matice

- V rozptylu se snažíme nalézt posun kontinuálního řešení vůči řešení volnému. Mluvíme o fázovém posunutí δ, K-matici ($\operatorname{tg}\delta$), S-matici ($e^{2i\delta}$), T-matici ($e^{i\delta}\sin\delta$)

- Řešíme radiální Schrödingerovu rovnici

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+2V(r)-k^2\right]u_l(r)=0$$



- Nedefinujme asymptotickou změnu pomocí δ ale pomocí R_l:

$$\boxed{u_l(r_0)=R_l\, u_l'(r_0)}$$

- Otázka: je R_l dostatečná informace pro řešení rozptylové úlohy?
- Odpověď: máme 2 možné případy:

1.) $V(r)\sim 0$ pro $r>r_0$: f_l, g_l ... regulární a neregulární volná řešení

$$u_l(r_0)=R_l\, u_l'(r_0) = A_l f_l(r_0) + B_l g_l(r_0)$$
$$= \sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right) - K_l \cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right) \quad \Bigg\}\ K_l=-\frac{B_l}{A_l}$$

$$B_l=\frac{W(f,u_l)}{W(f,g)}$$

$$A_l=\frac{W(g,u_l)}{W(f,g)}$$

$$\Longrightarrow K_l=-\frac{B_l}{A_l}=\frac{W(f,u_l)}{W(g,u_l)}=\frac{f u_l' - f' u_l}{g u_l' - g' u_l}$$

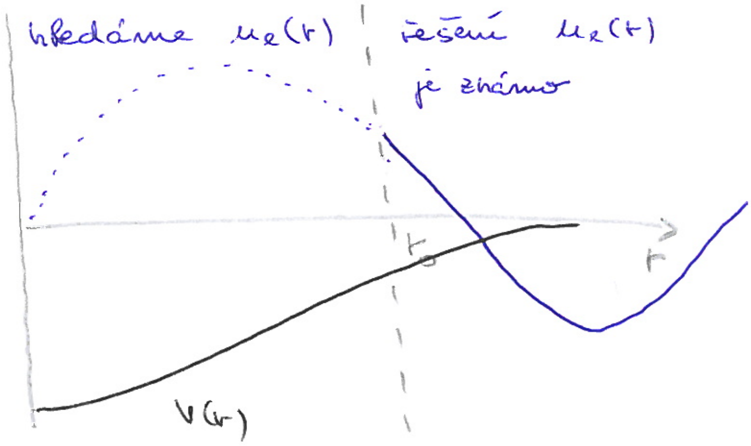
$$\boxed{K_l=\frac{f-f'R}{g-g'R}}$$

2.) $V(r) \neq 0$ pro $r > r_0$:

Pak R-mat definuje derivaci $u_\ell'(r_0)$ vlnové fce při zvolené hodnotě $u_\ell(r_0)$

- Historie – poprvé nevariační odvození Wigner-Eisenbud 1947
  nukleární fyzika, tvar rezonancí. Tzv. sumace přes póly
  – Variační odvození Kohn 1948 ← použijeme

Odvození R-matice (Kohn 1948)



opustíme index "ℓ" parciální vlny

Fcionál

$$I = 2\int_0^\infty dr\, u\,[H-E]\,u$$

$I = 0$ pro $r > r_0$

⇓

$$I = 2\int_0^{r_0} dr\, u\,[H-E]\,u$$

$$\boxed{I = 2\int_0^{r_0} u(r)\,[\bar{H}-E]\,u(r) - \lambda\, u^2(r_0)}$$

kinetický člen

$$-\int_0^{r_0} dr\, u\,u'' = -\left[u(r)\,u'(r)\right]_0^{r_0} + \int_0^{r_0} u'(r)\,u'(r)\,dr =$$

$$= \int_0^{r_0} u'(r)\,u'(r)\,dr - \lambda\, u_\ell^2(r_0)$$

$$\lambda = \frac{u'(r_0)}{u(r_0)} = \frac{1}{R}$$

$$\boxed{\bar{H} = \frac{1}{2}\frac{d}{dr}\rangle\langle\frac{d}{dr}\Big| + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + V(r)} \quad \text{nebo} \quad \boxed{\bar{H} = H + \frac{1}{2}\delta(r-r_0)\frac{d}{dr}}$$

- 2 úhly pohledu na funkcionál I

a) Variační princip pro stacionární E když $u(r) = 0$ pro $r \geq r_0$
→ Rayleigh-Ritz pro vázané stavy

b.) Variační princip pro stacionární λ při zvoleném E
→ kontinuální stavy v rozptylu

Řešení v bázi $\{\varphi_i\}_1^N$

$$u(r) = \sum_i c_i \varphi_i(r)$$

$$I = 2 \sum_{ij} c_i c_j A_{ij} - \lambda \sum_i c_i \varphi_i(r_0)\, u(r_0)$$

$$\boxed{A_{ij} = \int_0^{r_0} dr\, \varphi_i(r) \left[\hat{H} - E\right] \varphi_j(r)}$$

Stacionární stav:

$$\frac{\partial I}{\partial c_i} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\sum_j A_{ij} c_j = \frac{\lambda}{2} \varphi_i(r_0)\, u(r_0)} \qquad \text{(A.)}$$

Po dosazení $u = \sum_i c_i \varphi_i$:
$$\boxed{\sum_j \left[A_{ij} - \frac{\lambda}{2} \varphi_i(r_0) \varphi_j(r_0)\right] c_j = 0} \qquad \text{(B)}$$

- Matematická ovsuvka : Má (B.) řešení? jedno? jednoznačně určené? více řešení jako R-R sekulárním problém?

(B) má netriviální řešení pro nulový determinant:

$$\det\left[A - \frac{\lambda}{2} \varphi_0^T \varphi_0\right] \overset{MDL}{=} \left(1 - \frac{\lambda}{2} \varphi_0^T A^{-1} \varphi_0\right) \det A \qquad \vec{\varphi}_0 = \begin{pmatrix} \varphi_1(r_0) \\ \varphi_2(r_0) \\ \vdots \\ \varphi_N(r_0) \end{pmatrix}$$

Odpověď: Pro A regulární a $\varphi_0 \neq 0$ máme 1 řešení
→ kontrast vůči sekulární úloze pro vázané stavy

Důkaz MDL

Identita:
$$\begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ v^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} + uv^T & u \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ -v^T & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ v^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & u \\ -v^T & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & u \\ 0 & v^T u \end{pmatrix}$$

v determinantech: $\quad 1 \cdot \det(1 + uv^T) \cdot 1 \quad = \quad 1 + v^T u$

$$\Rightarrow \underline{\det(A + uv^T)} = \det A \cdot \det(\mathbb{1} + A^{-1} u v^T) = \underline{(v^T A^{-1} u) \det A}$$

Vracíme se k (A.) a řešíme formálně:

$$c_i = \frac{\lambda}{2} \sum_j (A^{-1})_{ij}\, \varphi_j\, u(r_0)$$

$$u(r_0) = \sum_i c_i \varphi_i(r_0) = \frac{\lambda}{2} \sum_{ij} \varphi_i(r_0)\, (A^{-1})_{ij}\, \varphi_j(r_0)\, u(r_0)$$

$$\boxed{R = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \varphi_i(r_0)\, [A^{-1}]_{ij}\, \varphi_j(r_0)}$$ ← inverze nutná pro každou kolizní energii $E = \frac{k^2}{2}$

$$\boxed{A_{ij} = \bar{H}_{ij} - \frac{k^2}{2} S_{ij}}$$ $S_{ij} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle$

Pólový rozvoj R-matice (formule Wigner-Eisenbuda)

- Princip: Výpočet inverze A^{-1} přes spektrální rozklad
- Motivace: $A = V D_A V^+ \Longrightarrow A^{-1} = V D_A^{-1} V^+$

Mírná komplikace v neortogonální bázi $|b_i\rangle$

$$\bar{H} |V_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |V_\alpha\rangle \qquad |V_\alpha\rangle = \sum_j V_{j\alpha} |b_j\rangle$$

$$\sum_j \langle b_i | \bar{H} | b_j \rangle v_{j\alpha} = \varepsilon_\alpha \sum_j v_{j\alpha} \langle b_i | b_j \rangle$$

$$\boxed{\bar{H} V = S V \varepsilon}$$ ← Rovnice vlast. čísel a vektorů pro hermitovský $\bar{H}$ v ~~ne~~ neortogonální bázi

$$\bar{H} = V \varepsilon V^+ \xleftarrow{\text{ortog. baze}} \boxed{\bar{H} = S V \varepsilon V^+ S}$$

$$\langle V_\alpha | V_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$$

$$\sum_{ij} v_{i\alpha} v_{j\beta} \langle b_i | b_j \rangle = \delta_{\alpha\beta}$$

$$\boxed{V^+ S V = \mathbb{1}}$$

$$A^{-1} = (\bar{H} - ES)^{-1} = [(SV\varepsilon V^+ - E)S]^{-1} = S^{-1}(SV\varepsilon V^+ - \underbrace{E}_{SVV^+})^{-1} =$$

$$= S^{-1}[SV(\varepsilon - E)V^+]^{-1} = S^{-1}\underbrace{V^{+-1}}_{SV} (\varepsilon - E) \underbrace{(SV)^{-1}}_{V^+}$$

$$\boxed{A^{-1} = V(\varepsilon - E\mathbb{1})V^+} \rightarrow \boxed{R = \frac{1}{2} \sum_\alpha \frac{v_\alpha^2(r_0)}{\varepsilon_\alpha - E}}$$

$v_\alpha(r_0)$ ... povrchová amplituda