Prahové chování neelastických průřezů

- Vyjdeme z Bornovy aproximace. Důkaz, že obsahuje dominantní členy naleznete v Levy & Keller J. Mat. Phys. 1963

lokální (nelokální v Kellman: Topics in atomic collision theory)

$$f_{\alpha\beta} \equiv f(\alpha \vec{k}_\alpha \leftarrow \beta \vec{k}_\beta) \overset{FBA}{\simeq} -\frac{1}{4\pi} \langle \phi_\alpha(\tau) \vec{k}_\alpha | V(\tau, \vec{r}) | \phi_\beta(\tau) \vec{k}_\beta \rangle$$

$$e^{i\vec{k}_\beta \cdot \vec{r}} = 4\pi \sum_{l_\beta = 0}^{\infty} i^{l_\beta} j_{l_\beta}(k_\beta r) \sum_{m_\beta} Y^*_{l_\beta m_\beta}(\hat{k}_\beta) Y_{l_\beta m_\beta}(\hat{r})$$

$$f_{\alpha\beta} = -\frac{1}{4\pi} 4\pi 4\pi \sum_{\substack{l_\beta m_\beta \\ l_\alpha m_\alpha}} i^{l_\alpha - l_\beta} Y_{l_\alpha m_\alpha}(\hat{k}_\alpha) Y^*_{l_\beta m_\beta}(\hat{k}_\beta) \int dr\, r^2 j_{l_\alpha}(k_\alpha r) j_{l_\beta}(k_\beta r) \int d^2\hat{r}$$

$$Y^*_{l_\alpha m_\alpha}(\hat{r}) Y_{l_\beta m_\beta}(\hat{r}) \tilde{V}_{\alpha\beta}(\vec{r}) \quad ; \quad \tilde{V}_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \langle \phi_\alpha(\tau) | V(\tau, \vec{r}) | \phi_\beta(\tau) \rangle$$

$$f_{\alpha\beta} = \frac{2\pi}{(k_\alpha k_\beta)^{1/2}} \sum_{\substack{l_\alpha l_\beta \\ m_\alpha m_\beta}} i^{l_\beta - l_\alpha + 1} Y^*_{l_\beta m_\beta}(\hat{k}_\beta) Y_{l_\alpha m_\alpha}(\hat{k}_\alpha) \underbrace{\left[2i (k_\alpha k_\beta)^{1/2} \int dr\, r^2 j_{l_\alpha}(k_\alpha r) V_{\alpha\beta}(r) j_{l_\beta}(k_\beta r) \right]}_{t_{\alpha\beta}}$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{k_\alpha}{k_\beta}\right) |f|^2} \boxed{\simeq \frac{1}{k_\beta^2} |t_{\alpha\beta}|^2}$$

$t_{\alpha\beta}$ ... ~~parciální~~ $t_{\alpha\beta}$ - operator rozvinutý do parciálních vln.

$$j_{l_\alpha}(k_\alpha r) \to (k_\alpha r)^{l_\alpha}$$

- V Bornově aproximaci máme $T = -iK$

1. Elastický případ $\beta = \alpha$; $k_\alpha = k_\beta$; $l_\alpha \neq l_\beta$

$$t_{\alpha\alpha} = 2i k_\alpha^{l_\alpha + l_\beta + 1} \int_0^\infty dr\, V_{\alpha\beta}(r)\, r^{l_\alpha + l_\beta + 2}$$

1.) Potenciál krátkého dosahu

$$t_{\alpha\alpha} \sim k_\alpha^{l_\alpha + l_\beta + 1} \quad ; \quad K_{\alpha\alpha} \sim k_\alpha^{l_\alpha + l_\beta + 1}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |t_{\alpha\alpha}|^2 \frac{1}{k_\alpha^2} \sim a_0^2$$

(B.) Potenciál Cr^{-s}

$$t_{\alpha\alpha} = 2iCk_\alpha \int_0^\infty dr\, r^{2-s} j_{l_\alpha}(k_\alpha r)\, j_{l_\beta}(k_\beta r)$$

- Integrál je definovaný v počátku pro $2-s+l_\alpha+l_\beta > -1$

$$\boxed{s < l_\alpha+l_\beta+3}$$

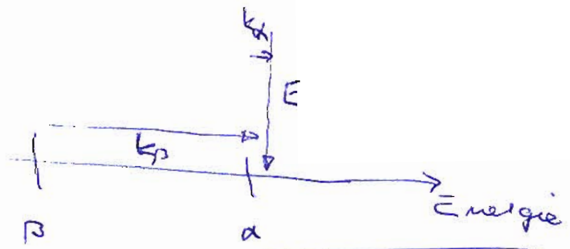
- Dá se ukázat, že $\boxed{t_{\alpha\alpha} \sim k_\alpha^{s-2}}$ Bardsley & Nesbet PRA 1973

- Pro $s > l_\alpha+l_\beta+3$ se v počátku regularizuje a přechází to na případ (A)

- Pro $s = l_\alpha+l_\beta+3$ (vždy nepříjemné) jsem obecný důkaz nenašel. Pro rovibračně elastický Morrison, Feldt, Austin PRA 1984 ukázali případ (B)

2. Neelastický případ

(A) Potenciál krátkého dosahu



$$t_{\alpha\beta} = 2i\, k_\beta^{l_\beta+1/2}\, k_\alpha^{l_\alpha+1/2} \int_0^\infty dr\, V_{\alpha\beta}(r)\, r^{l_\alpha+l_\beta+2} \Rightarrow \boxed{t_{\alpha\beta} \sim k_\alpha^{l_\alpha+1/2}}$$

(B.) Potenciál cr^{-s} (bez důkazu)

$$t_{\alpha\beta} \sim k_\beta^{s-l_\beta-5/2}\, k_\alpha^{l_\alpha+1/2} \Rightarrow \underline{t_{\alpha\beta} \sim k_\alpha^{l_\alpha+1/2}}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{k_\beta^2} k_\alpha^{2l_\alpha+1} \sim E_\alpha^{1/2}$$

anomální chování v elastickém kanálu pro s-vlnu.

Problém adiabatické aproximace; t-matice určená jako elastická v soustavě molekuly, spočtená při energii $k_b^2/2 = E_b$. Udělám transformaci soustav (asymptotickou) do lab. soustavy. ~~$t^{LAB} = U t^{BODY} U$~~.

$$\underline{t^{LAB}(E_\alpha, E_\beta) = U^+ t^{BODY}(E_b)\, U}.$$

$$E_b \stackrel{?}{=} \frac{E_\alpha+E_\beta}{2}$$

$$E_b \stackrel{?}{=} E_\alpha$$

$$E_b \stackrel{?}{=} \frac{k_\alpha k_\beta}{2} \quad \text{(Nesbet)} \qquad k_b = (k_\alpha k_\beta)^{1/2}$$

Zavřené kanály

Obecný multikanálový problém (rozvoj do parciálních vln)

$$\Psi(\vec r,\tau) = A\sum_i u_i(\vec r)\,\phi_i(\tau) = A\frac{1}{2}\sum_{lmi} u_{lmi}(r)\,Y_{lm}(\hat r)\,\phi_i(\tau) \qquad H_\tau\,\phi_i(\tau) = \varepsilon_i\,\phi_i(\tau)$$

$p \equiv (lmi)$.

$$\Big[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \underbrace{\varepsilon_i - E}_{\frac{1}{2}k_i^2}\Big]\,u_{pp_0}(r) = \sum_{p'} V_{pp'}(r)\,u_{p'p_0}(r)$$

$\cancel{\Psi(\vec r,\tau) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_i}$

$$u_{ii_0}(\vec r) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\Big[\delta_{ii_0}\, e^{i(\vec k_0 \vec r)}\,\phi_{i_0}(\tau) + \sum_i \overbrace{\frac{e^{ik_i r}}{r}}^{\text{otevřené}}\, f_{ii_0}\,\phi_i(\tau)\Big]$$

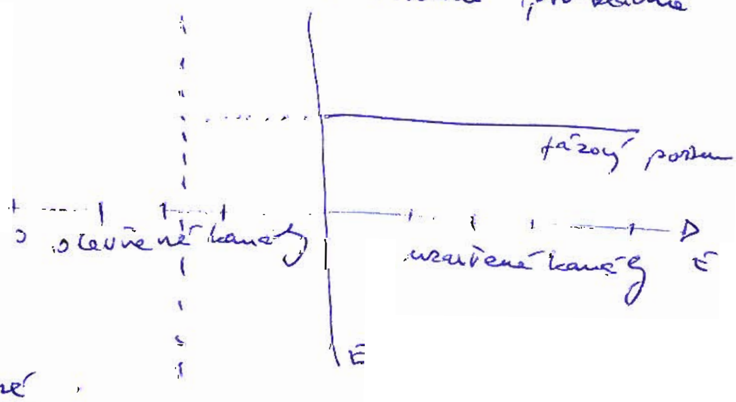
$$u_{pp_0}(r) \xrightarrow{r\to\infty} \delta_{pp_0}\,\hat{j}_{l_0}(k_0 r) + \left(\frac{k_{p_0}}{k_p}\right)^{1/2} K_{pp_0}\,\hat{n}_l(k_p r) \qquad \text{(otevřené)}$$

$$\longrightarrow e^{-|k_p| r} \qquad \text{(zavřené)}$$

3 Typické zdroje problémů s uzavřenými kanály

(fázové posuny)

A.) K-matice nezávisí na energii. To je vhodná vlastnost pro transformaci soustav. Problematické pro neutrální cíle. Přivřené pro kladné ionty.

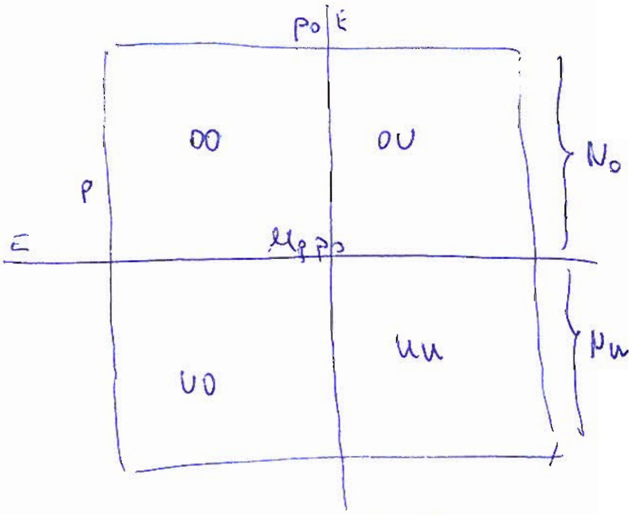


B) ~~Jen~~ Odečítám K-matici v konečné zdálenosti r_0.

C) Řešení v uzavřeném ~~kd~~ kanálu roste exponenciálně

Eliminace uzavřených kanálů (zavření)

- Uspořádejme kanály energeticky



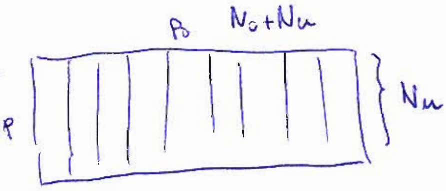
$$u_{pp_0}(r_0) \overset{\text{otevřené}}{=} A_{pp_0}\, j_{l_0}(k_0 r) + B_{pp_0}\, n_{l_0}(k_0 r) \quad \text{(otevř.)}$$

$$\overset{\text{zavřené}}{=} C_{pp_0}\, e^{-|k_p| r} + D_{pp_0}\, e^{|k_p| r} \quad \text{(uzavřené)}$$

hledáme $\tilde{u}_{pp'}(r_0) = \sum_{p_0} u_{pp_0}(r_0)\, \Lambda_{p_0 p'}$

aby $\sum_{p_0} D_{pp_0} \Lambda_{p_0 p'} = 0$

$D_{pp_0} =$



Mám N_o+N_u vektorů v N_u-dimenzionálním prostoru. $\Rightarrow$ Pro N_o vektorů dokážu splnit

Tj. Dokážu vygenerovat N_o vektorů, pro které eliminuji exp. rostoucí část vlnové fce.