Kvantové defekty (pokračování)

- Řada B $\varepsilon = -\frac{1}{\varkappa^2}$ i $z = \frac{2\rho}{\varkappa}$

$$\underbrace{y(\varkappa,\lambda,z) = \frac{(\varkappa z)^{\lambda+\frac{1}{2}} e^{-z/2}}{\Gamma(\lambda+\frac{1}{2}+\varkappa)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\lambda+1/2+\varkappa+n)}{\Gamma(2\lambda+1+n)} \frac{z^n}{n!}}$$

je řešení (ověřit přímým dosazením)

absolutně a stejnoměrně konvergentní řada.

⇓

dá se přeuspořádat produkt: $e^{-z/2} \times \sum_{n=0}^{\infty}$ a převézt na formu A)

pak $\frac{(\overbrace{\varkappa z}^{2\rho})^{\lambda+1/2}}{\Gamma(\lambda+1/2+\varkappa)} \frac{\Gamma(\lambda+1/2+\varkappa)}{\Gamma(2\lambda+1)} = a_0 \rho^{\lambda+1/2} \Rightarrow \underbrace{a_0 = \frac{2^{\lambda+1/2}}{\Gamma(2\lambda+1)}}$

Máme regulární řešení $S_\ell(r)$! ⟸ nezávisí na energii pro $r \to 0$!

Protože a_n je polynom v energii $P_{n-1}(\varepsilon)$ a řada A) může být ~~přeorganizována~~ přerovnána

$$F(\varepsilon,\lambda,\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n(\rho,\lambda)\,\varepsilon^n$$

analytické v ε.

Zbývá nám nalézti ~~nereg~~ neregulární řešení $C_\ell(r)$ s podobnou vlastností. ← Problém

$y(\varkappa,-\lambda,z)$ je dobrý kandidát, protože je lineárně nezávislé pro $\lambda \neq \pm(\ell+\frac{1}{2})$

Bohužel ale pro $\lambda = -(\ell+\frac{1}{2})$ dostáváme:

$$y(\varkappa,-\ell-\tfrac{1}{2},z) = \frac{(\varkappa z)^{-\ell} e^{-z/2}}{\Gamma(\varkappa-\ell)} \left[\frac{\Gamma(-\ell+\varkappa+2\ell+1)}{\Gamma(-2\ell+2\ell+1)} \frac{z^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!} + \frac{\Gamma(-\ell+\varkappa+2\ell+2)}{\Gamma(-2\ell+2\ell+2)} \frac{z^{2\ell+2}}{(2\ell+2)!} + \dots\right] =$$

$$= \frac{1}{\varkappa^{2\ell+1}} \frac{\Gamma(\ell+1+\varkappa)}{\Gamma(\varkappa-\ell)} \cdot \frac{(\varkappa z)^{\ell+1} e^{-z/2}}{\Gamma(\ell+1+\varkappa)} \left[\frac{\Gamma(\ell+1+\varkappa)}{\Gamma(2\ell+2)} \cdot \frac{z^0}{0!} + \frac{\Gamma(\ell+\varkappa+2)}{\Gamma(2\ell+3)} \cdot \frac{z^1}{1!} + \dots\right]$$

$$= y(\varkappa,\ell+\tfrac{1}{2},z) \cdot A(\varkappa,\ell), \text{ kde } \underbrace{A(\varkappa,\ell) = \frac{\Gamma(\varkappa+\ell+1)}{\varkappa^{2\ell+1}\Gamma(\varkappa-\ell)} = \prod_{p=0}^{\ell}(1+p^2\varepsilon)}$$

použil jsem $x\Gamma(x) = \Gamma(1+x)$

A tak jsou bohužel $y(x, l+\frac{1}{2}, z)$ a $y(x, -l-\frac{1}{2}, z)$ lineárně závislé!

Jak se tedy hledá druhé (neregulární) řešení?

Nástin: $\eta(x, -l-\frac{1}{2}, z) = \lim_{\lambda \to +l+\frac{1}{2}} \eta(x, \lambda, z)$

$$\eta(x, \lambda, z) = \frac{A(x,\lambda)\cos(2\pi\lambda)\, y(x,\lambda,z) - y(x,-\lambda,z)}{\sin(2\pi\lambda)}$$

lineární kombinace (téměř vždy) nezávislých řešení $y(x,\lambda,z)$ a $y(x,-\lambda,z)$, které se v problematickém bodě $\lambda = -l+\frac{1}{2}$ odečte do nuly. Ve jmenovateli je taky $\emptyset$ a tak zůstane vyšší řád, který je pořád řešení

η je ale neanalytická v ε, oddělíme tuto část G.

$$g = \eta - G$$

... g je analytická ale není pěkná asymptoticky. (obsahuje část $s(r)$)

$$h = -g + A \cdot s(r)$$

... h je hledané $c(r)$ (skoro)

Asymptotická forma pro $\varepsilon > 0$

$\varepsilon = k^2$

$$\xi = k\rho - \frac{l\pi}{2} + \frac{1}{k}(2k\rho) + \arg\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)$$

$s_l(r) \xrightarrow{r\to\infty} \left(\frac{1}{\pi k}\right)^{1/2} \sin\xi$; $c_l(r) \xrightarrow{r\to\infty} \left(\frac{1}{\pi k}\right)^{1/2} \cos\xi$

Asymptotická forma pro $\varepsilon < 0$

$\varepsilon = -\frac{1}{\nu^2}$; $\nu = \frac{i}{k}$

$$s_l(r) \xrightarrow{r\to\infty} (-1)^l \left[\frac{\sin\pi\nu}{(2\nu)^{1/2}\pi k}\, \xi_\nu(\rho) - \cos\pi\nu \left(\frac{\nu^3}{2}\right)^{1/2} k\, \theta_\nu(\rho)\right] \; ; \; \theta_\nu(\rho) = \left(\frac{2\rho}{\nu}\right)^{\nu} e^{-\rho/\nu}$$

$$c_l(r) \xrightarrow{r\to\infty} (-1)^l \left[\frac{\cos\pi\nu}{(2\nu)^{1/2}\pi k}\, \xi_\nu(\rho) - \sin\pi\nu \left(\frac{\nu^3}{2}\right)^{1/2} k\, \theta_\nu(\rho)\right] \; ; \; \xi_\nu(\rho) = \left(\frac{2\rho}{\nu}\right)^{-\nu} e^{\rho/\nu}$$

Návrat k původnímu problému

$\varepsilon \geq 0$:

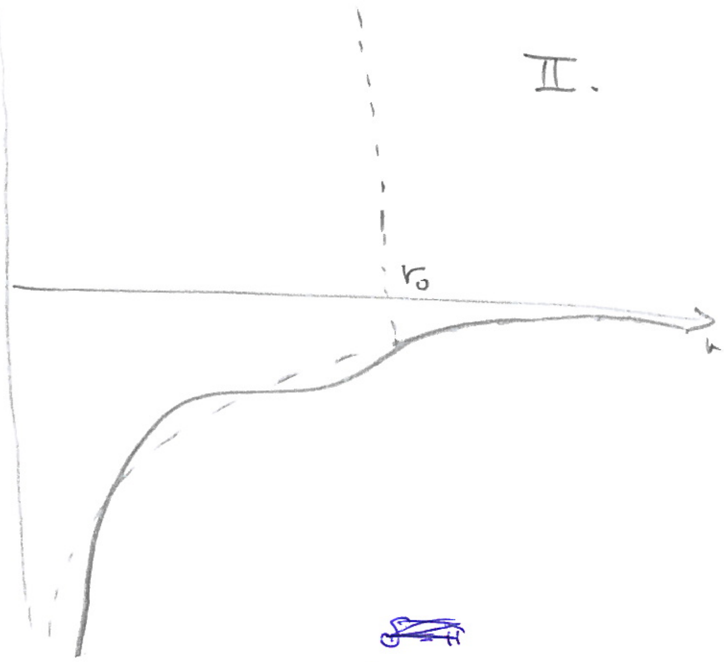
$$F_{II}(\rho,\varepsilon) \xrightarrow{r \to \infty} S + cR$$

definujme $R \equiv \mathrm{tg}\,\delta$

$$F_{II}(\rho,\varepsilon) \longrightarrow \frac{1}{(\pi k)^{1/2}} \left[\sin\xi + R\cos\xi \right]$$

$$F_{II}(\rho,\varepsilon) \longrightarrow \frac{1}{(\pi k)^{1/2}} \frac{1}{\cos\delta} \sin(\xi + \delta)$$

δ ... krátkodosahový fázový posun



$\varepsilon < 0$: $F_{II}(\rho,\varepsilon) \longrightarrow S + cR$

$\delta \equiv \pi\mu$

Exponenciálně rostoucí část : $\dfrac{\xi_\ell(+)\,(-1)^\ell}{\sqrt{2\nu}\,\pi K} \left[\sin\pi\nu + R\cos\pi\nu \right]$

Vázané stavy jsou pro $\sin\pi\nu + R\cos\pi\nu = 0 \Rightarrow \underline{\mathrm{tg}\,\pi\nu + R = 0}$

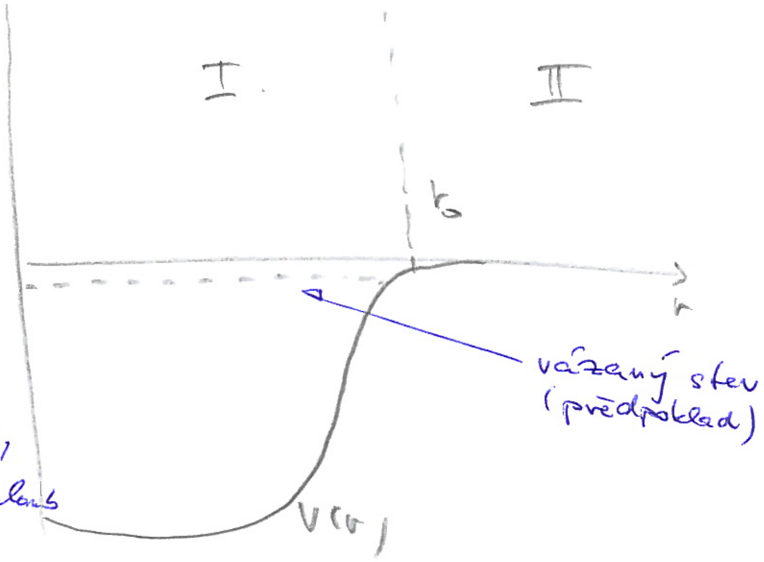
$\mathrm{tg}\,\pi\nu = -\mathrm{tg}\,\pi\mu$; Řešení : $\nu = n - \mu$; $\varepsilon = -\dfrac{1}{\nu^2} = -\dfrac{1}{(n-\mu)^2}$

$\boxed{\delta(E) \text{ je analytické prodloužení } \pi\mu(\varepsilon)}$ ... Seatonův teorém

Krátko-dosahový fázový posun s coulomb. asymptotikou analyticky přechází do kvantového defektu vázaných stavů (přesněji do π-násobku kv. defektu).

Aplikujme postup důkazu Seatonova teorému na příklad s besselovými fcemi

— Analytické řešení:



$$f_\ell^0 \equiv s_\ell = \frac{1}{k^\ell}\hat{j}_\ell(kr)$$

$$g_\ell^0 \equiv c_\ell = k^\ell \hat{n}_\ell(kr)$$

Budu používat f_ℓ^0 a g_ℓ^0 místo s_ℓ a c_ℓ, protože s_ℓ a c_ℓ se většinou používají s coulomb. polem.

Mějme $l=0$ a $\varepsilon \geq 0$

$$f^0 = \frac{1}{k}\hat{j}_0(kr) = \frac{\sin kr}{k} = \frac{1}{2ik}\left[e^{ikr} - e^{-ikr}\right]$$

$$g^0 = \hat{n}_0(kr) = \cos kr = \frac{1}{2}\left[e^{ikr} + e^{-ikr}\right]$$

Analytické řešení: $F^0_{II}(k,r) = f^0 + g^0 R^0$; $R^0 = \mathrm{tg}\,\underbrace{\pi\mu^0}_{\text{analytický fázový posun}}$

Mějme $l=0$ a $\varepsilon \leq 0$ $\quad \varepsilon = -\varkappa^2$; $k = i\varkappa$; $\varkappa > 0$

$$\left.\begin{aligned} f^0 &= -\frac{1}{2\varkappa}\left[e^{-\varkappa r} - e^{\varkappa r}\right] \\ g^0 &= \frac{1}{2}\left[e^{-\varkappa r} + e^{\varkappa r}\right] \end{aligned}\right\} F^0_{II}(k,r) = f^0 + g^0 R^0$$

Pro vázaný stav je exp. rostoucí část $F^0(k,r)$:

$$e^{\varkappa r}\left[\frac{1}{\varkappa} + R^0\right] = 0 \qquad \varepsilon = -\varkappa^2 = -\mathrm{cotg}^2\,\pi\mu^0$$

nebo $\boxed{\varepsilon = \frac{1}{\mathrm{tg}^2\pi\mu^0} = \frac{1}{a_0^2}}$ $\quad \boxed{\mathrm{tg}\,\pi\mu^0 \equiv a_0}$ rozptylová délka

Teorie efektivního dosahu

$\pi\mu^0$ není skutečný (fyzikální) fázový posun. Je to analytický posun δ^0.

Skutečný posun δ je definován v asymp. bes. fcí: $kF^0 = \hat{j} + \underbrace{kR^0}_{\mathrm{tg}\,\delta}\hat{n}$

$$\boxed{\mathrm{tg}\,\delta = k\,\mathrm{tg}\,\delta^0}$$