Ανάλυση σε μερικά κύματα (Αναντιρραλαίωση)

Εξίσωση Schrödinger $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$

με λύσεις $\psi_{E}(\vec{r}) = \sum_{\ell m} C_{\ell m} R_{E\ell}(r) Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$\quad {}_{,k}$

για το $R_{E\ell}(r)$ ή $R_{k\ell}(r)$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) u_{k\ell}(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)\, u_{k\ell}(r) \quad (1)$$

$$u_{k\ell}(r) = r R_{k\ell}(r)$$

Με λύσεις με αζιμουθιακή συμμετρία, στα

κεντρικά δυναμικά $Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \xrightarrow[m=0]{} P_\ell(\cos\theta)$

$$\psi_E(\vec{r}) \xrightarrow[m=0]{} \psi(r,\theta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\ell a_\ell R_{k\ell}(r) P_\ell(\cos\theta) \qquad (2)$$

$\nexists$ φ-εξάρτηση

δε

Επίσης γνωρίζουμε

$r \to \infty$

$$\psi(r,\theta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(r,\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \qquad (3)$$

$$(3) \xrightarrow[r\to\infty]{} \psi(r,\theta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Big\{ -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{\ell} i^{2\ell}(2\ell+1) P_\ell(\cos\theta)$$

$$+ \frac{e^{ikr}}{r}\Big[f(k,\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_{\ell} i(-i)^{\ell}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\Big]\Big\} \qquad (4)$$

$$\Delta E\ (1) \xrightarrow[r\to\infty]{} \left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) R_{k\ell}(r) + k^2 R_{k\ell}(r) = 0$$

Εξίσωση 3D-Schrödinger, $\rho = kr$, $u = \rho R(r)$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}u + u = 0$$ (Spherical Bessel) με λύσεις

$$R_{kl}(r) = A_l \, j_l(\rho) + B_l \, n_l(\rho)$$

Για $r \to \infty$

$$R_{kl}(r) \to A_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - B_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr}$$

ορίζω

$$\left.\begin{aligned} A_l &\equiv C_l \cos\delta_l \\ B_l &\equiv -C_l \sin\delta_l \end{aligned}\right\} \to \begin{aligned} C_l^2 &= A_l^2 + B_l^2 \\ \tan\delta_l &= -B_l/A_l \end{aligned}$$

Έτσι

$$R_{kl}(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{C_l}{kr}\left[\cos\delta_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \sin\delta_l \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right]$$

$$= \frac{C_l}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (*)$$

Η λύση της (1) για $r \to \infty$

μετατόπιση φάσης

(2) $\psi(r,\vartheta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\ell a_\ell R_{kr}(r) P_\ell(\cos\vartheta)$

$\xrightarrow[r\to\infty]{(7)} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\ell a_\ell P_\ell(\cos\vartheta) \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)}{kr}$

$\frac{e^x - e^{-x}}{2i}$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_\ell a_\ell i^\ell e^{-i\delta_\ell} P_\ell(\cos\vartheta) + \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_\ell a_\ell (-i)^\ell e^{i\delta_\ell} P_\ell(\cos\vartheta) \right\} \quad (5)$$

Από (5) & (4) ισχύει

Συντελ. $\frac{e^{-ikr}}{r} \Rightarrow a_\ell = (2\ell+1)\, i^\ell\, e^{i\delta_\ell}$

Συντελ. $\frac{e^{ikr}}{r} \Rightarrow \boxed{f(k,\theta) = \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) \sin\delta_\ell\, e^{i\delta_\ell}}$

ορίζοντας $f_\ell(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_\ell} \sin\delta_\ell$ ← μερικά πλάτη

$$\Rightarrow f(k,\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell(k) P_\ell(\cos\theta)$$

$\delta_\ell = 0 \to f_\ell(k) = 0$

$\downarrow$

$f(k,\theta) = 0$

$$V(r) \longrightarrow \delta_\ell \rightsquigarrow f(k,\theta) \rightarrow \sigma$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k,\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell,\ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1)\, e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})} \cdot$$
$$\cdot \sin\delta_\ell \sin\delta_{\ell'} P_\ell P_{\ell'}$$

$$\sigma = \int |f(k,\theta)|^2 d\Omega = \int |f(k,\theta)| \, d\varphi \, d\cos\theta$$

και επειδή $\displaystyle\int_{-1}^{1} d\cos\theta \, P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta) = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'}$

$$\Rightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_\ell (2\ell+1)\sin^2\delta_\ell = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell, \quad \sigma_\ell \equiv \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell$$

Unitarity limit (bound)

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \quad , \quad \sin^2\delta_\ell \leq 1$$

$$\boxed{\sigma_\ell^{max} = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)}$$

Οπτικό θεώρημα

$$f(k,\theta) = \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1)\, P_\ell(\cos\theta)\, \sin\delta_\ell \; e^{i\delta_\ell}$$

↓ μιγαδι. αριθμός

για $\theta = 0$ $\xrightarrow{k}$ $\theta = 0$

$$f(k,\theta=0) = f(0) = \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1)\, \overset{1}{P_\ell(1)}\, \sin\delta_\ell \; e^{i\delta_\ell}$$

$$= \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1)\left(\sin\delta_\ell \cos\delta_\ell + i\, \underline{\sin^2\delta_\ell}\right)$$

αλλά $$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_\ell (2\ell+1)\sin^2\delta_\ell$$

Άρα

$$\boxed{\frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} f(0) = \sigma = \frac{4\pi}{k}\sum_\ell (2\ell+1)\sin\delta_\ell}$$

Regge Poles

S-matrix

$$f_\ell(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_\ell}-1\right) \equiv \frac{1}{2ik}\left(S_\ell(k)-1\right)$$

όπου

$$\boxed{\underbrace{S_\ell(k)}_{\text{S-matrix}} \equiv 1 + 2ik \underbrace{f_\ell(k)}_{\text{μερικά πλάτη}}} \rightarrow \boxed{S_\ell(k) \equiv e^{\overbrace{2i\delta_\ell}^{\text{μετατοπίσεις φάσης}}}}$$

o S-matrix είναι Unitary

δηλ. $S^\dagger S = \mathbb{1}$, επειδή $\delta_\ell \in \mathbb{R}$

$$S_\ell^*(k)\, S_\ell(k) = 1$$

$$S_\ell(k) = 2ik f_\ell(k) + 1$$

$$S_\ell^*(k)\, S_\ell(k) = 1 \;\longrightarrow\; \frac{1}{k}\,\mathrm{Im}\, f_\ell(k) = |f_\ell(k)|^2$$

Θα δείξουμε $f_\ell(k) = \frac{1}{2ik}\left(S_\ell(k) - 1\right) \equiv -\frac{\pi m}{\hbar^2}\, T_\ell(k)$

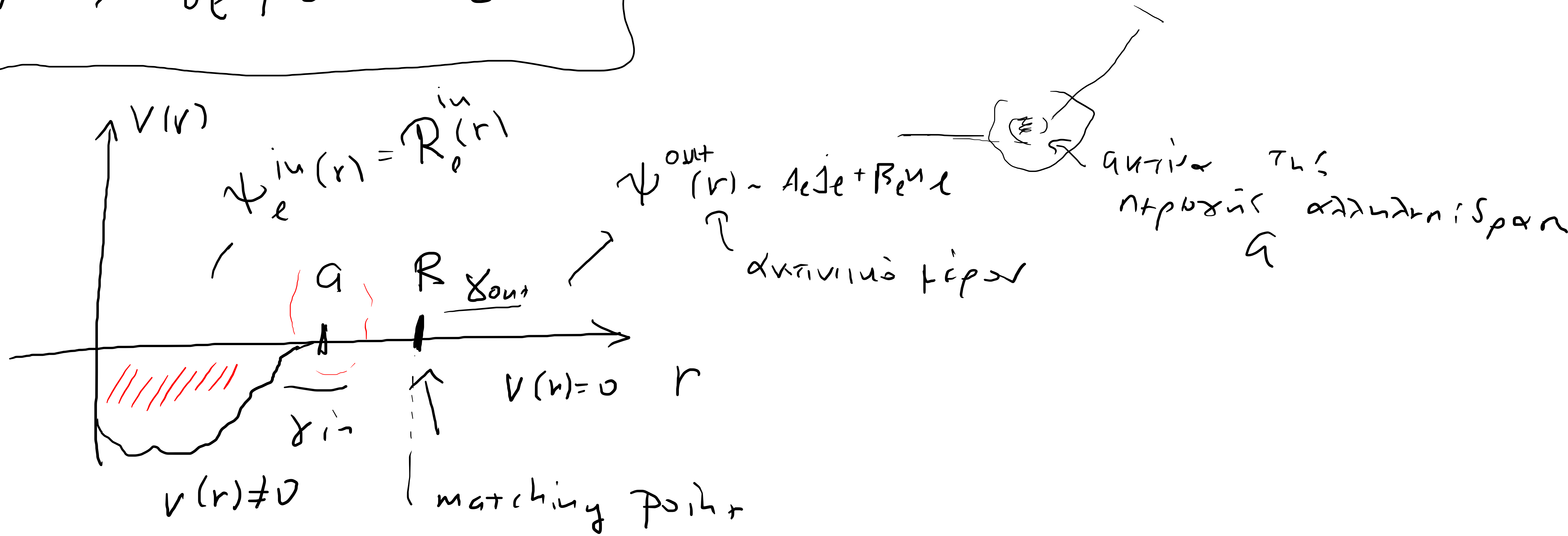
μ_+ $$f(k,\theta) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$$

$$\boxed{S_\ell(k) = 1 - 2i\pi \frac{km}{\hbar^2} T_\ell(k)}$$

$$\boxed{S = 1 - 2i\pi\, T\, \delta(E - H_0)}$$

Προσδιορισμός των δ_ℓ

$$\boxed{V \to \delta_\ell \neq 0 \to \sigma}$$



Θέλουμε η $\psi(r)$ και $\frac{d\psi}{dr}$ να είναι συνεχείς στο R.

$$\frac{d\ln\psi(r)}{dr} = \frac{1}{\psi(r)}\frac{d\psi(r)}{dr} \equiv \gamma \quad (\text{Schiff})$$

Που είναι ισοδύναμη με την συνέχεια στο R

της $\frac{d\ln\psi(r)}{dr}$

ή $$\frac{d\ln\psi}{d\ln r} = \frac{r}{\psi}\frac{d\psi}{dr} \equiv \beta \quad (\text{Sakurai})$$

Άρα $\underline{\gamma_{in}} = \frac{d}{dr} \underline{\ln \psi_\ell^{in}(r)}\Big|_R = \gamma_{out} = \frac{d}{dr} \ln \psi_\ell^{out}(r)$

$$= \frac{1}{\psi_\ell^{out}} \frac{d\psi_\ell^{out}}{dr}$$

$$\psi_\ell^{out}(r) = C_\ell \left(\cos\delta_\ell \, j_\ell(kr) - \sin\delta_\ell \, n_\ell(kr) \right).$$

$$\frac{d\psi_\ell^{out}}{dr} = k C_\ell \left(\cos\delta_\ell \, j_\ell'(kr) - \sin\delta_\ell \, n_\ell'(kr) \right), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\gamma_{out} = \frac{1}{\psi_\ell^{out}} \frac{d\psi_\ell^{out}}{dr}$$

$$\gamma_{out} = \gamma_{in} = k\,\frac{j_\ell'(kR) - \tan\delta_\ell\, n_\ell'(kR)}{j_\ell(kR) - \tan\delta_\ell\, n_\ell(kR)} \quad (*)$$

γ

Που θα έρθει από την λύση της Schrödinger με $V \neq 0$ για $r \leq a$

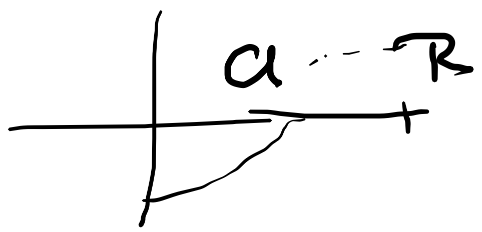
$(*) \rightsquigarrow$
$$\boxed{\tan\delta_\ell = \frac{k\,j_\ell'(kR) - \gamma\, j_\ell(kR)}{k\,n_\ell'(kR) - \gamma\, n_\ell(kR)}}$$

με δεδομένο γ $\Rightarrow \delta_\ell$

$$\gamma = \gamma_{in} = \frac{1}{\psi_{in}} \left.\frac{d\psi_{in}}{dr}\right|_{r=R}$$

Σχόλιο: δ εξαρτάται από το R.

Μπορούμε να μελετήσουμε την συμπεριφορά της σ μέσω των δ_ℓ, στην περιοχή χαμηλών ενεργειών



$$\underbrace{kR}_{} \ll \ell$$

$$j_\ell(kR) \xrightarrow[kR \ll \ell]{} \frac{kR}{(2\ell+1)!!} \quad , \quad n_\ell(kR) \xrightarrow[kR \ll \ell]{} \frac{(2\ell-1)!!}{(kR)^{2\ell+1}}$$

$$j'_\ell(kR) \xrightarrow[kR \ll 1]{} -\frac{\ell\,(kR)^{\ell-1}}{(2\ell+1)!!} \quad , \quad --$$

$$\sim \tan\delta_\ell \xrightarrow[kR \ll \ell]{} \frac{(kR)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!!\,(2\ell-1)!!} \frac{\ell-\gamma R}{\ell+1+\gamma R)}$$

Δηλαδή $\tan\delta_\ell \propto k^{2\ell+1} \sim \sin\delta_\ell$ για $kR \ll \ell$.

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_\ell (2\ell+1) \sin^2\delta_\ell \xrightarrow[kR \ll \ell]{} (\text{const})\, k^{4\ell}$$

Στο όριο $k \to 0$

$$\boxed{\sigma_\ell = \begin{cases} \text{cond.}, & \ell = 0 \\ 0, & \ell \neq 0 \end{cases}}$$

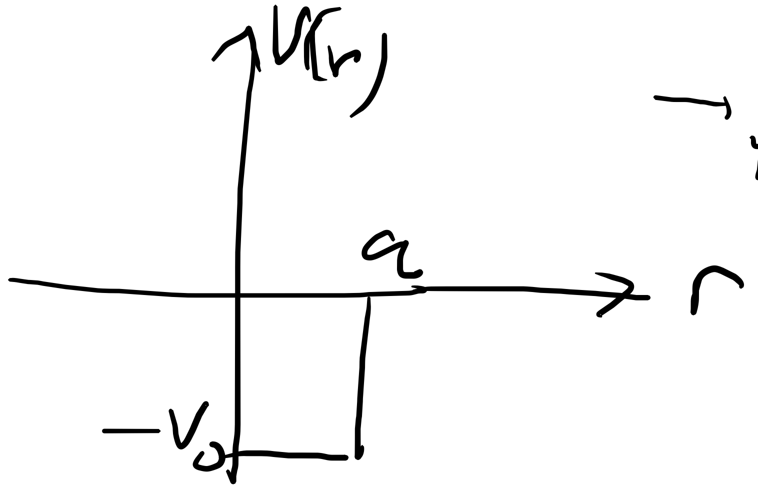
Κρατώντας μόνο τον όρο $l=0$ (s-wave)

έχουμε την κυρίαρχη συνεισφορά για $k \to 0$

<u>Παραδείγματα</u>

1) Σκληρή σφαίρα $\quad V = \begin{cases} \infty, & r<a \\ 0, & r>a \end{cases}$

2) <u>Τετραγωνικό πηγάδι</u>



→ σύγκριση με πριν

Κοιτάξτε Zettili, QM Concepts & Applications

Ch 11.