

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Dávid Hvizdoš

Řešení integrálních rovnic pro separabilní interakce

Ústav teoretické fyziky MFF UK

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2014

Chcel by som poďakovať vedúcemu práce prof. RNDr. Jiřímu Horáčkovi, DrSc. za všetku pomoc a odborné rady pri tvorení tejto práce.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne

Dávid Hvizdoš

Název práce: Řešení integrálních rovnic pro separabilní interakce

Autor: Dávid Hvizdoš

Katedra: Ústav teoretické fyziky MFF UK

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc., Ústav teoretické fyziky MFF UK

Abstrakt: V této práci jsou nejprve ukázány nejzákladnější typy integrálních rovnic (Fredholmovy a Volterrové). Uvádí se jejich výskyt v kvantové mechanice a postup, který vede k tzv. regulárnímu a Jostovu řešení. Dále se studuje jejich řešení v případě separabilních interakcí. Hledá se analytické řešení na modelových separabilních potenciálech. Dále se provádí analytické prodloužení těchto řešení do roviny komplexních energií a studují se vlastnosti těchto funkcí. Uvádí se metoda analytického prodloužení ve vazbové konstantě založená na prodloužení vazbové konstanty λ jako funkce κ . Pro několik příkladů separabilního potenciálu se počítají Taylorovy rozvoje funkcí $\lambda(\kappa)$ a z nich inverzní řady $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$. Ty se používají k určení rezonančních parametrů daného potenciálu a diskutuje se přesnost těchto výpočtů.

Klíčová slova: integrální rovnice, teorie rozptylu, rezonance, separabilní potenciál

Title: Solution of integral equations for separable interactions

Author: Dávid Hvizdoš

Department: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc., Institute of Theoretical Physics

Abstract: This work deals with the most fundamental types of integral equations (Fredholm and Volterra). Their occurrence in quantum mechanics is illustrated and the process that leads to the so-called regular and Jost solution is presented. Further their solutions in the case of separable interactions are studied. Analytical solutions on model separable potentials are sought. Analytical extensions of these solutions to the complex energy plane are provided and the properties of these functions are examined. The method of analytical continuation in the coupling constant based on the extension of the coupling constant λ as a function of κ is introduced. For some examples of separable potentials the Taylor expansion of the function $\lambda(\kappa)$ and from it the inverse series $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$ are calculated. These series are then used to determine the resonance parameters of the potential and the accuracy of these calculations is discussed.

Key words: integral equations, scattering theory, resonances, separable potential

Názov práce: Řešení integrálních rovnic pro separabilní interakce

Autor: Dávid Hvizdoš

Katedra: Ústav teoretické fyziky MFF UK

Vedúci bakalárskej práce: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc., Ústav teoretické fyziky MFF UK

Abstrakt: V tejto práci sa najprv ukážu najzákladanejšie typy integrálnych rovníc (Fredholmove a Volterrove). Uvádza sa ich výskyt v kvantovej mechanike a postup, ktorý vedie k tzv. regulárnemu a Jostovmu riešeniu. Ďalej sa študuje ich riešenie v prípade separabilných interakcií. Hľadá sa analytické riešenie na modelových separabilných potenciáloch. Ďalej sa vykonáva analytické predĺženie týchto riešení do roviny komplexných energií a študujú sa vlastnosti týchto funkcií. Uvádza sa metóda analytického predĺženia vo väzbovej konštante založená na predlžovaní väzbovej konštanty λ ako funkcie κ . Pre niekoľko príkladov separabilného potenciálu sa počítajú Taylorove rozvoje funkcií $\lambda(\kappa)$ a z nich inverzné rady $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$. Tie sa používajú na určenie rezonančných parametrov daného potenciálu a diskutuje sa presnosť týchto výpočtov.

Klíčové slová: integrálne rovnice, teória rozptylu, rezonancie, separabilný potenciál

Obsah

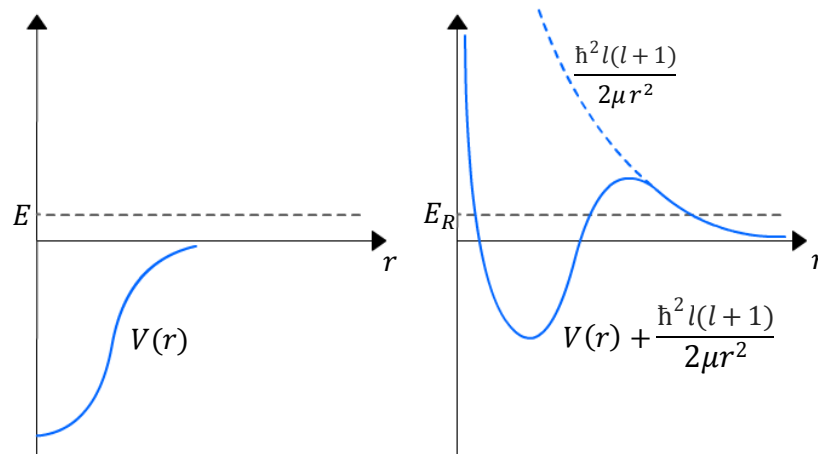
Úvod	1
1. Integrálne rovnice	4
1.1. Fredholmova a Volterrova integrálne rovnice	4
1.2. Schrödingerova rovnica	5
1.2.1. Regulárne riešenie.....	6
1.2.2. Jostovo riešenie	7
2. Výpočet väzbovej konštanty	8
2.1. Separabilný potenciál v momentovej reprezentácii	8
2.2. Väzbová konštantá pre konkrétne jednoduché separabilné potenciály.....	9
2.3. Separabilný potenciál 2. ranku	12
2.4. Analytické predĺženie väzbovej konštanty	17
Záver	23
Použitá literatúra	24
Príloha – programy v Mathematice	25

Úvod

V kvantovej mechanike sa často stretávame s tzv. dlho-žijúcimi (kvázistacionárnymi) stavmi. Tieto stavy sa dajú klasifikovať podľa singularít matice rozptylu, podľa mechanizmu ich vzniku alebo podľa modelu, ktorý ich popisuje. Najprv sa teda zoznámime s najznámejšími druhmi dlho-žijúcich stavov:

(1) *Jednočasticové tvarové rezonancie*: najjednoduchší druh dlho-žijúceho stavu, ktorý vzniká v prípade potenciálového rozptylu častice na neexcitovanom terči alebo v potenciálovom poli s bariérou. Energia častice je rovná alebo menšia ako výška bariéry (obr. 0.1.). Častica sa tunelovaním zachytí v oblasti silnej príťažlivosti, kde vytvorí dlho-žijúci stav a znova tunelovaním túto oblasť opustí.

Obrázok 0.1. Vznik potenciálovej bariéry spojením krátkodosahového príťažlivého potenciálu a odstredivého potenciálu pre časticu s nenulovým momentom hybnosti.

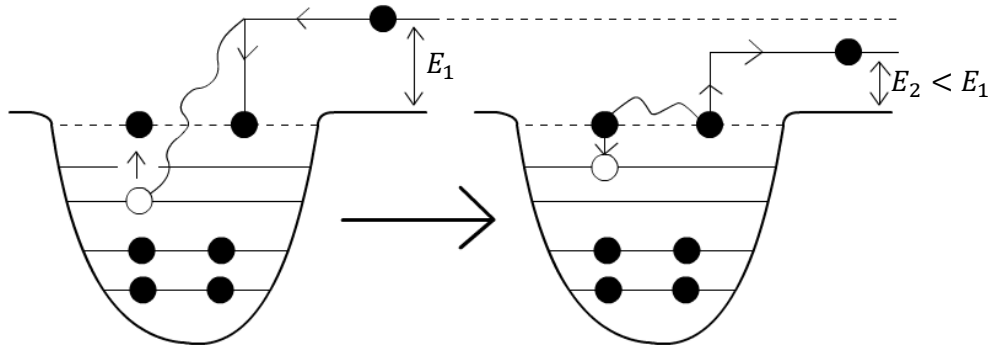


(2) *Jednočasticové virtuálne stavy*: Podobné, ako jednočasticové tvarové rezonancie, no v tomto prípade nemusí byť prítomná bariéra ale interakčný potenciál musí mať ostrý skok na rozhraní interakčnej oblasti. Pre nízke energie je de Broglieho vlnová dĺžka vo vnútri tejto oblasti mnohokrát menšia ako mimo túto oblasť.

V potenciálovej jame vzniká stojatá vlna, ktorá s malou pravdepodobnosťou preniká mimo potenciálovej jamy.

(3) *Feshbachove rezonancie*: Tieto stavy vznikajú, keď prichádzajúca častica excituje jednu alebo viacero častíc v terči, a samotná častica je zachytená v dlho-žijúcom stave. Dlhá doba života tohto stavu vyplýva z faktu, že kanály priameho rozpadu stavu sú zatvorené a rozpad Feshbachovej rezonancie spôsobuje následná de-excitácia terča a vyžiarenie zachytenej častice do pôvodného stavu (pružný rezonančný rozptyl) alebo do stavu s nižšou kladnou energiou (nepružný rezonančný rozptyl). Počiatočný a konečný stav je schématicky znázornený na obrázku 0.2.

Obrázok 0.2. Schématické znázornenie vzniku a zániku typickej Feschbachovej rezonancie



(4) *Zložené stavy a QBSEC (quasi-bound states embedded in a continuum)*: V jadrovej fyzike je interakcia medzi nukleónmi silná a disipácia energie prichádzajúcej častice nekončí hneď po prvom kroku ako v obrázku 0.2. Pokračuje, až dokým sa dosiahne komplikovaná kombinácia excitovaných konfigurácií, v ktorej má každá častica malý zlomok celkovej energie systému. Keďže počet možných konfigurácií tohto druhu je veľký, systém v tomto excitovanom stave dokáže žiť dlho.

Existuje množstvo kníh o teórii rozptylu rozoberajúcich parametrizáciu matice rozptylu a amplitúdy rozptylu v okolí rezonancie. Dnes je ale častým problémom výpočet parametrov (teda energie a šírky) rezonancie. Znalosť rezonančných parametrov sa často využíva v molekulárnej, atómovej a jadrovej fyzike (popis atómových zrážok, prenos energie medzi molekulami a elektrónmi a pod.). Pri výpočte týchto parametrov sa ale často stretávame s problémom vlnovej funkcie rezonančného stavu, ktorá nie je kvadraticky integrabilná.

Metóda riešenia takéhoto problému je nasledujúca: ku skúmanému potenciálu pridávame príťažlivý potenciál pre násobený parametrom λ a potom určujeme energiu viazaného stavu pre takto upravenú Schrödingerovu rovnicu. Postupnou zmenou parametru λ sa mení energia rezonancie a pre isté hodnoty (keď je pridaný potenciál dostatočne príťažlivý) sa z rezonancie stane viazaný stav, ktorého energia sa dá spočítať už bez väčších problémov. Je teda potrebné získať závislosť energie $E = -\kappa^2$ viazaného stavu na väzbovej konštante λ na nejakom obore hodnôt λ . Funkcia $\kappa(\lambda)$ sa potom analyticky predĺži do hodnoty $\lambda = 0$, z čoho sa získa energia rezonancie. Tento postup sa nazýva metóda analytického predĺženia vo väzbovej konštante (skratka ACCC). V mnohých prípadoch sa ale nedá jednoznačne spočítať $\kappa(\lambda)$, keďže pre jednu hodnotu λ obecné existuje viacero stavov s rôznymi energiami. Ak je ale pridaný príťažlivý potenciál separabilný potenciál ranku 1,

vieme jednoznačne spočítať závislosť $\lambda(\kappa)$. Jej analytickým predĺžením a riešením $\lambda(\kappa) = 0$ vieme potom spočítať parametre rezonancie (zobecnená metóda ACCC).

Cieľom tejto práce je sa najprv zoznámiť s najčastejšími druhmi integrálnych rovníc a s ich výskytom a riešením v kvantovej fyzike. Následne výpočet závislostí $\lambda(\kappa)$ pre vybrané separabilné potenciály ranku 1 resp. 2. Ďalej aplikujeme zobecnú metódu ACCC a graficky budeme riešiť rovnicu $\lambda(\kappa) = 0$ pre spočítané závislosti $\lambda(\kappa)$. Nakoniec sa pokúsime rozvinúť závislosti $\lambda(\kappa)$ do rád a z nich získať inverzné rady $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$, pomocou ktorých spočítame parametre rezonancie pre zvolené potenciály.

1. Integrálne rovnice

1.1. Fredholmova a Volterrova integrálne rovnice

Pre začiatok sa trochu venujme riešeniu integrálnych rovníc, s ktorými sa častokrát stretávame pri analytickom riešení problémov kvantovej fyziky. Najzákladnejší typ integrálnej rovnice je Fredholmova rovnica prvého druhu:

$$g(x) = \int_a^b K(x, y)f(y)dy, \quad (1.1)$$

kde $f(x)$ je neznáma funkcia, $g(x)$ je známa funkcia a $K(x, y)$ je jadro.

Ak je jedna hranica integrálu v rovnici (1.1) premenná, nazývame túto rovnicu Volterrovou integrálnou rovnicou prvého druhu. Má teda tvar:

$$g(x) = \int_a^x K(x, y)f(y)dy. \quad (1.2)$$

Ak je neznáma funkcia zároveň v integráli aj mimo neho, nazveme rovnicu Fredholmovou resp. Volterrovou rovnicou druhého druhu:

$$f(x) = g(x) + \Lambda \int_a^b K(x, y)f(y)dy, \quad (1.3)$$

$$f(x) = g(x) + \Lambda \int_a^x K(x, y)f(y)dy. \quad (1.4)$$

My sa teraz zameriame na Fredholmovu rovnicu druhého druhu. Rovnicu (1.3) môžeme alternatívne zapísať v operátorovom tvare:

$$(1 - \Lambda K)f = g, \quad (1.5)$$

kde f, g sú teraz vektory a K operátor v Banachovom priestore.

Pre kompaktné operátory K (zobrazuje obmedzené podmnožiny Banachovho priestoru na kompaktné podmnožiny) vieme nájsť riešenie Fredholmovej rovnice. Obecné riešenie sa robí pomocou Liouville-Neumannovej série. Definujeme:

$$K_1(x, z) = K(x, z),$$

$$K_n(x, z) = \iint \dots \int K(x, y_1)K(y_1, y_2) \dots K(y_{n-1}, z) dy_1 dy_2 \dots dy_{n-1},$$

$$\varphi_0(x) = g(x),$$

$$\varphi_n(x) = \int K_n(x, z)g(z)dz,$$

výsledné jadro:

$$K(x, z, \Lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^n K_{n+1}(x, z).$$

Posledný výraz má obecné konečný polomer konvergence pre Λ pri fixnom x . Za predpokladu, že zvolíme hodnoty, pre ktoré konverguje, je riešenie rovnice:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^n \varphi_n(x) = \int K(x, z, \Lambda) g(z) dz,$$

pričom všetky tieto integrály majú hranice a, b .

Špeciálnym prípadom kompaktného operátora je separabilný potenciál, pre ktorý sa jadro integrálu dá rozložiť:

$$K(x, y) = \sum_{i=1}^n M_i(x) N_i(y),$$

s konečným n .

Po dosadení tohto jadra do rovnice (1.3) dostávame:

$$f(x) = g(x) + \Lambda \sum_{i=1}^n M_i(x) c_i, \quad (1.6)$$

kde

$$c_i = \int_a^b N_i(y) f(y) dy.$$

Prenásobením rovnice (1.6) $N_j(x)$ a integráciou cez x dostávame:

$$c_j = b_j + \Lambda \sum_{i=1}^n a_{ji} c_i,$$

kde

$$b_j = \int_a^b N_j(x) g(x) dx,$$

$$a_{ji} = \int_a^b N_j(x) M_i(x) dx,$$

čo vieme zapísať pomocou matíc a vektorov:

$$\mathbf{c} = \mathbf{b} + \Lambda \mathbf{A} \mathbf{c},$$

$$\mathbf{c} = (1 - \Lambda \mathbf{A})^{-1} \mathbf{b}.$$

Vypočítané c_i potom dosadíme do rovnice (1.6) a dostaneme $f(x)$.

Špeciálnym prípadom separabilného potenciálu je

$$K(x, y) = M(x) N(y),$$

pre ktorý sa nám riešenie zjednoduší na:

$$f(x) = g(x) + \Lambda M(x) \frac{\int_a^b N(x) g(x) dx}{1 - \Lambda \int_a^b M(x) N(x) dx}. \quad (1.7)$$

1.2. Schrödingerova rovnica

Následne sa pokúsime stanovením okrajových podmienok a niekoľkými úpravami dostať integrálnu rovnicu zo Schrödingerovej vlnovej rovnice v tvare:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{x^2} - V(x) \right] \psi(x) = 0, \quad (1.8)$$

teda je to rovnica častice s energiou k^2 v sféricky symetrickom potenciáli. Pre potenciál $V(x)$ určíme okrem vymiznutia v nekonečne nasledujúce obmedzenia (tieto obmedzenia máme z [1]):

- a) $V(x)$ je skoro všade spojité,
- b) $\int_c^\infty |V(x)|dx = M(c) < \infty$,
- c) $\int_0^{c'} x|V(x)|dx = N(c') < \infty$,

Pre nejaké kladné c, c' .

1.2.1. Regulárne riešenie

Najprv použijeme substitúciu $\lambda = l + 1/2$, ktorá nám rovnicu (1.8) zmení na:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - 1/4}{x^2} - V(x) \right] \psi(x) = 0. \quad (1.9)$$

Pre malé hodnoty x preváži v rovnici (1.9) odstredivý člen nad členom $k^2 - V(x)$.

Napišme skrátenu rovnicu:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{\lambda^2 - 1/4}{x^2} \psi(x) = 0, \quad (1.10)$$

ktorá má obecné riešenie v tvare:

$$\psi(x) = \alpha x^{\lambda+1/2} + \beta x^{-\lambda+1/2}. \quad (1.11)$$

Variáciou konštánt hľadáme riešenie rovnice (1.9) v tvare:

$$\varphi(\lambda, k, x) = \alpha(x)x^{\lambda+1/2} + \beta(x)x^{-\lambda+1/2}, \quad (1.12)$$

pričom si navyše dáme podmienku:

$$\alpha'(x)x^{\lambda+1/2} + \beta'(x)x^{-\lambda+1/2} = 0, \quad (1.13)$$

aby

$$\begin{aligned} \varphi'(\lambda, k, x) &= \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\alpha(x)x^{\lambda-1/2} - \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\beta(x)x^{-\lambda-1/2}, \\ \varphi''(\lambda, k, x) &= \frac{1}{x^2}\left(\lambda^2 - \frac{1}{4}\right)\varphi(\lambda, k, x) + \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\alpha'(x)x^{\lambda-1/2} - \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\beta'(x)x^{-\lambda-1/2}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Dosadením (1.14) do rovnice (1.9) dostávame rovnicu, ktorá spolu s (1.13) tvorí systém v neznámych funkciách $\alpha'(x)$ a $\beta'(x)$ s riešením:

$$\alpha'(x) = \frac{1}{2\lambda} [V(x) - k^2] \varphi(\lambda, k, x) x^{-\lambda+1/2}, \quad (1.15)$$

$$\beta'(x) = \frac{1}{2\lambda} [k^2 - V(x)] \varphi(\lambda, k, x) x^{\lambda+1/2}.$$

Z (1.12) je zrejmé, že:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \alpha(x) = 1, \quad (1.16)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \beta(x) = 0.$$

Z rovníc (1.15), (1.16):

$$\alpha(x) = 1 + \frac{1}{2\lambda} \int_0^x [V(y) - k^2] \varphi(\lambda, k, y) y^{-\lambda + \frac{1}{2}} dy, \quad (1.17)$$

$$\beta(x) = -\frac{1}{2\lambda} \int_0^x [V(y) - k^2] \varphi(\lambda, k, y) y^{\lambda + \frac{1}{2}} dy.$$

Použitím rovníc (1.17) a (1.12) dostaneme:

$$\varphi(\lambda, k, y) = x^{\lambda + \frac{1}{2}} + \frac{1}{2\lambda} \int_0^x \left[\left(\frac{y}{x} \right)^\lambda - \left(\frac{y}{x} \right)^{-\lambda} \right] [k^2 - V(y)] \sqrt{xy} \varphi(\lambda, k, y) dy. \quad (1.18)$$

Riešenie tejto integrálnej rovnice (typu Volterra) sa nazýva regulárne riešenie a je analytické pre $k^2 < \infty$ a $\text{Re } \lambda > 0$ (za istých podmienok pre potenciál sa dá ešte rozšíriť v λ).

1.2.2. Jostovo riešenie

Pre veľké hodnoty x použijeme skrátenu rovnicu:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0, \quad (1.19)$$

ktorej riešenia sú v tvare

$$\psi(x) = \alpha e^{-ikx} + \beta e^{ikx}.$$

Analogicky s predchádzajúcim postupom sa hľadajú riešenia $f(\lambda, k, x)$ rovnice (1.9). Musí pre ne platiť:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(\lambda, k, x) = 1. \quad (1.20)$$

Postupne sa dá dostať k integrálnej rovnici v tvare:

$$f(\lambda, k, x) = f_0(\lambda, k, x) + \int_x^\infty B(\lambda, k, x, y) V(y) f(\lambda, k, y) dy, \quad (1.21)$$

kde

$$f_0(\lambda, k, x) = [f(\lambda, k, x)]_{V(x)=0} = \left(\frac{1}{2} \pi k x \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} i \pi (\lambda + \frac{1}{2})} H_\lambda^{(2)}(kx),$$

$$B(\lambda, k, x, y) = \frac{i}{2k} [f_0(\lambda, k, y) f_0(\lambda, -k, x) - f_0(\lambda, k, x) f_0(\lambda, -k, y)],$$

a $H_\lambda^{(2)}(kx)$ je druhá Hankelova funkcia.

Riešenie (1.21) sa nazýva Jostovo a je analytické pre $\lambda^2 < \infty$ a $\text{Im } k < 0$ (za istých podmienok pre potenciál sa dá rozšíriť v k).

2. Výpočet väzbovej konštanty

2.1. Separabilný potenciál v momentovej reprezentácii

Teraz chceme riešiť úlohu popísanú v úvode: pre Schrödingerovu rovnicu s jednoduchým separabilným potenciálom v tvare $\hat{V} = -\lambda|g\rangle\langle g|$ (kde platí $\langle g|g\rangle = 1$) nás zaujíma závislosť medzi väzbovou konštantou λ a energiou viazaného stavu. Chceme teda závislosť $\lambda(\kappa)$.

Táto závislosť je významná, pretože vlastné hodnoty hamiltoniánu sú dané pólmi odpovedajúceho Greenovho operátora. Tieto póly sa môžu nachádzať len v hodnotách κ určujúcich nulovú väzbovú konštantu λ .

Teda po určení $\lambda(\kappa)$ hľadáme v komplexnej rovine κ krivky, na ktorých je reálna resp. imaginárna časť $\lambda(\kappa)$ nulová.

Pre tieto účely bude výhodnejšie pracovať v momentovej reprezentácii, v ktorej Schrödingerova rovnica nadobúda tvar:

$$\frac{p^2}{2M}\psi(p) + \hat{V}\psi(p) = E\psi(p), \quad (2.1)$$

kde \hat{V} je integrálny operátor potenciálu v momentovej reprezentácii. Rovnicu (2.1) teraz upravme a zapíšeme pomocou braketového formalizmu. Vieme dostať tvar:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - \frac{p^2}{2M}}\hat{V}|\psi\rangle. \quad (2.2)$$

Pre jednoduchý separabilný potenciál $\hat{V} = -\lambda|g\rangle\langle g|$ sa rovnica (2.2) ďalej dá upraviť na tvar:

$$|\psi\rangle = -\lambda\hat{W}|\psi\rangle = -\lambda G_0|g\rangle\langle g|\psi\rangle, \quad (2.3)$$

kde sme sa členu $1/\left(E - \frac{p^2}{2M}\right)$ „zbavili“ jeho zakomponovaním do \hat{W} a $G_0 = (E - \hat{H})^{-1}$ je Greenov operátor (pričom v našom prípade je pôvodný hamiltonián $\hat{H} = \frac{p^2}{2M}$). Ak by nás pre daný potenciál zaujímala vlnová funkcia $|\psi\rangle$, bola by rovnica (2.3) vlastne špeciálnym prípadom (známa funkcia $g(x) = 0$) integrálnej rovnice druhého druhu, čo sme rozoberali v predchádzajúcej kapitole.

Pre zjednodušenie zápisu do nasledujúcich rovníc už nepíšeme $2M$. Namiesto energie E píšeme $-\kappa^2$. Rovnicu (2.3) vieme teraz zľava prenásovať operátorom $\langle g|$ a upraviť:

$$\langle g|\psi\rangle = -\lambda\langle g|G_0|g\rangle\langle g|\psi\rangle, \quad (2.4)$$

$$\lambda = \frac{1}{-\langle g|G_0|g\rangle} = 1/\left(\text{v. p. } \int_0^\infty \frac{g^2(p')p'^2}{\kappa^2 + p'^2} dp'\right),$$

kde v.p. značí integrál v hlavnej hodnote.

2.2. Vázbová konštanta pre konkrétne jednoduché separabilné potenciály

V tejto časti už budeme hľadať závislosť $\lambda(\kappa)$ pre dva jednoduché príklady separabilného potenciálu dané funkciami:

$$g(p) = \frac{p^l}{(p^2 + \alpha^2)^{l + \frac{n}{2}}}, \quad (2.5a)$$

$$g'(p) = \frac{p^l}{\sqrt{(p^2 + \alpha^2)(p^2 + \beta^2)}}. \quad (2.5b)$$

Pre $p \rightarrow \infty$ sú potenciály úmerné p^{-l-n} resp. p^{l-2} .

Tieto závislosti sme spočítali podľa (2.4) pre $l = 0, 1, 2, 3$, $n = 1, 2, 3$ a zapísali ich do tabuliek 2.1a. a 2.1b. Ako vidíme, pre vyššie hodnoty l, n sa veľmi rýchlo stávajú zložitejšími.

Následne tieto funkcie rozšírime do komplexnej roviny κ a sledujeme krivky, pozdĺž ktorých je nulová reálna resp. imaginárna časť $\lambda(\kappa)$ (obrázky 2.1a. a 2.1b.). Krivky s nulovou imaginárnou časťou teda reprezentujú pohyb κ v závislosti od reálneho parametra λ .

l	$n = 1$	$n = 2$
0	$\frac{2(\alpha + \kappa)}{\pi}$	$\frac{4\alpha(\alpha + \kappa)^2}{\pi}$
1	$\frac{16\alpha(\alpha + \kappa)^3}{(\alpha + 3\kappa)\pi}$	$\frac{32\alpha^3(\alpha + \kappa)^4}{(\alpha^2 + 4\alpha\kappa + \kappa^2)\pi}$
2	$\frac{256\alpha^3(\alpha + \kappa)^5}{(3\alpha^3 + 15\alpha^2\kappa + 25\alpha\kappa^2 + 5\kappa^3)\pi}$	$\frac{512\alpha^5(\alpha + \kappa)^6}{(3\alpha^4 + 18\alpha^3\kappa + 38\alpha^2\kappa^2 + 18\alpha\kappa^3 + 3\kappa^4)\pi}$

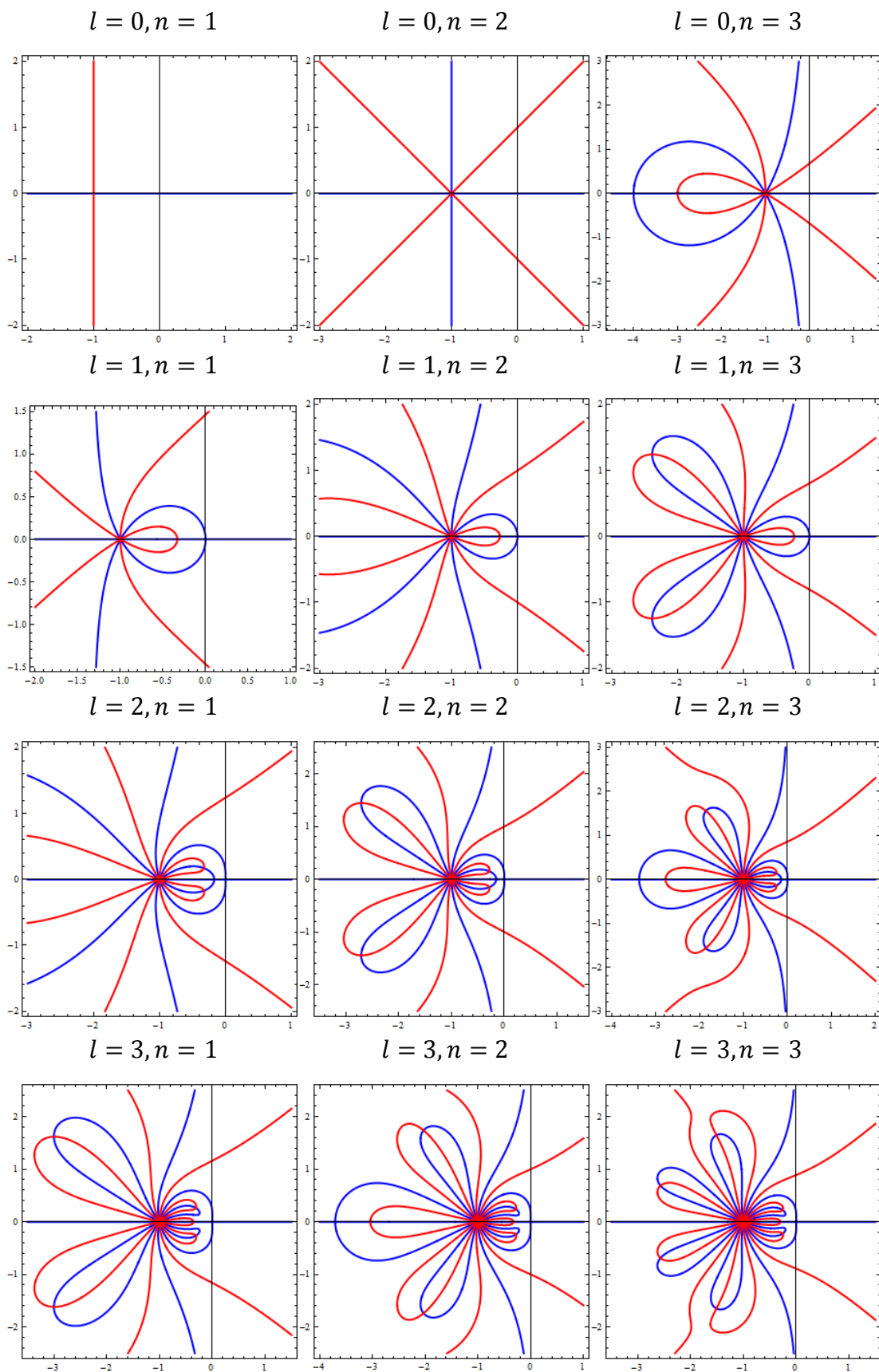
n	$l = 3$
1	$\frac{2048\alpha^5(\alpha + \kappa)^7}{(5\alpha^5 + 35\alpha^4\kappa + 98\alpha^3\kappa^2 + 126\alpha^2\kappa^3 + 49\alpha\kappa^4 + 7\kappa^5)\pi}$
2	$\frac{4096\alpha^7(\alpha + \kappa)^8}{(5\alpha^6 + 40\alpha^5\kappa + 131\alpha^4\kappa^2 + 208\alpha^3\kappa^3 + 131\alpha^2\kappa^4 + 40\alpha\kappa^5 + 5\kappa^6)\pi}$

l	$n = 3$
0	$\frac{16\alpha^3(\alpha + \kappa)^3}{(3\alpha + \kappa)\pi}$
1	$\frac{256\alpha^5(\alpha + \kappa)^5}{(5\alpha^3 + 25\alpha^2\kappa + 15\alpha\kappa^2 + 3\kappa^3)\pi}$
2	$\frac{2048\alpha^7(\alpha + \kappa)^7}{(7\alpha^5 + 49\alpha^4\kappa + 126\alpha^3\kappa^2 + 98\alpha^2\kappa^3 + 35\alpha\kappa^4 + 5\kappa^5)\pi}$
3	$\frac{65536\alpha^9(\alpha + \kappa)^9}{(45\alpha^7 + 405\alpha^6\kappa + 1521\alpha^5\kappa^2 + 2889\alpha^4\kappa^3 + 2535\alpha^3\kappa^4 + 1215\alpha^2\kappa^5 + 315\alpha\kappa^6 + 35\kappa^7)\pi}$

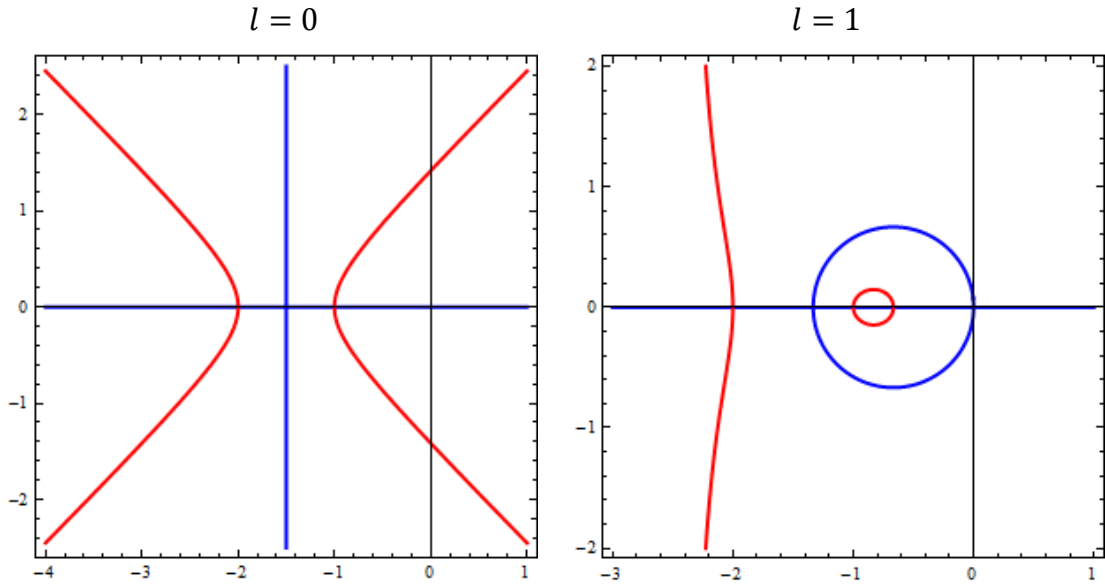
Tabuľka 2.1a. Závislosti $\lambda(\kappa)$ pre potenciál (2.5a) a pre rôzne hodnoty l, n .

l	$\lambda(\kappa)$
0	$\frac{2(\alpha + \beta)(\alpha + \kappa)(\beta + \kappa)}{\pi}$
1	$\frac{2(\alpha + \beta)(\alpha + \kappa)(\beta + \kappa)}{(\beta\kappa + \alpha(\beta + \kappa))\pi}$

Tabuľka 2.1b. Závislosti $\lambda(\kappa)$ pre potenciál (2.5b) a pre rôzne hodnoty l .



Obrázok 2.1a. Krivky v komplexnej rovine κ s nulovou reálnou časťou $\lambda(\kappa)$ (červenou) a s nulovou imaginárnou časťou $\lambda(\kappa)$ (modrou). Použitý potenciál (2.5a). $\alpha = 1$.



Obrázok 2.1b. Krivky v komplexnej rovine κ s nulovou reálnou časťou $\lambda(\kappa)$ (modrou) a s nulovou imaginárnou časťou $\lambda(\kappa)$ (červenou). Použitý potenciál (2.5b). $\alpha = 1, \beta = 2$.

2.3. Separabilný potenciál 2. ranku

Ďalej nás zaujíma situácia pre separabilný potenciál druhého ranku, teda:

$$\hat{V} = -\lambda_1 |g_1\rangle\langle g_1| - \lambda_2 |g_2\rangle\langle g_2|.$$

Namiesto rovnice (2.3) dostaneme:

$$|\psi\rangle = -G_0(\lambda_1 |g_1\rangle\langle g_1| + \lambda_2 |g_2\rangle\langle g_2|)|\psi\rangle, \quad (2.6)$$

a túto rovnicu zľava prenásobíme $\langle g_1|$ resp. $\langle g_2|$ aby sme dostali sústavu:

$$\langle g_1|\psi\rangle = -(\lambda_1 \langle g_1|G_0|g_1\rangle \langle g_1|\psi\rangle + \lambda_2 \langle g_1|G_0|g_2\rangle \langle g_2|\psi\rangle) \quad (2.7a)$$

$$\langle g_2|\psi\rangle = -(\lambda_1 \langle g_2|G_0|g_1\rangle \langle g_1|\psi\rangle + \lambda_2 \langle g_2|G_0|g_2\rangle \langle g_2|\psi\rangle) \quad (2.7b)$$

Vyjadrením $\langle g_1|\psi\rangle$ z (2.7a) a dosadením do (2.7b) dostaneme rovnicu, z ktorej sa dá vyňať $\langle g_2|\psi\rangle$.

Označme: $-\langle g_1|G_0|g_1\rangle = I_1$, $-\langle g_2|G_0|g_2\rangle = I_2$, $-\langle g_1|G_0|g_2\rangle = I_3 = -\langle g_2|G_0|g_1\rangle$.

Po preznačení je výsledná rovnica pre λ_1, λ_2 :

$$\lambda_1 \lambda_2 (I_3^2 - I_1 I_2) + \lambda_1 I_1 + \lambda_2 I_2 - 1 = 0. \quad (2.8)$$

V špeciálnom prípade separabilného potenciálu ranku 2 s jednou väzbovou konštantou $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ platí:

$$\lambda^2 (I_3^2 - I_1 I_2) + \lambda (I_1 + I_2) - 1 = 0,$$

teda:

$$\lambda = \frac{-(I_1+I_2) \pm \sqrt{(I_1-I_2)^2 + 4I_3^2}}{2(I_3^2 - I_1 I_2)}. \quad (2.9)$$

Pritom platí:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty \frac{g_1^2(p') p'^2}{\kappa^2 + p'^2} dp', \\ I_2 &= \int_0^\infty \frac{g_2^2(p') p'^2}{\kappa^2 + p'^2} dp', \\ I_3 &= \int_0^\infty \frac{g_1(p') g_2(p') p'^2}{\kappa^2 + p'^2} dp'. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Vidíme teda, že pre $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ bude mať funkcia $\lambda(\kappa)$ singularitu typu druhej odmocniny.

Znova sa teraz pozrime na závislosť $\lambda(\kappa)$ po dosadení konkrétnych funkcií $g(p)$.

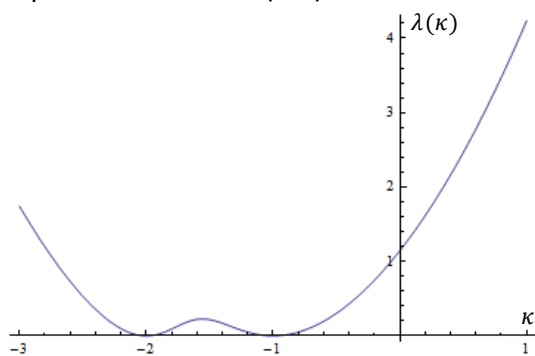
Použijeme separabilný potenciál ranku 2 s jednou väzbovou konštantou λ , v ktorom sa sčítavajú dva potenciály z (2.5a) s rôznym $\alpha_{1,2}$ a rovnakým l a n .

Obrázok 2.2 obsahuje grafy $\lambda(\kappa)$ v reálnych hodnotách κ pre dve rôzne voľby l a n .

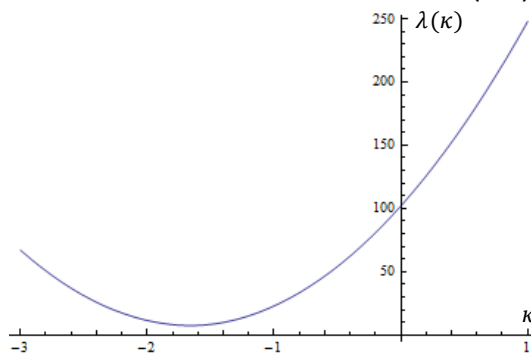
Obrázok 2.3 obsahuje krivky v komplexnej rovine κ pre prípad $l = 1, n = 2$ s rôznymi hodnotami $\alpha_{1,2}$.

$l = 0, n = 2,$

S plusom vo vzťahu (2.9):

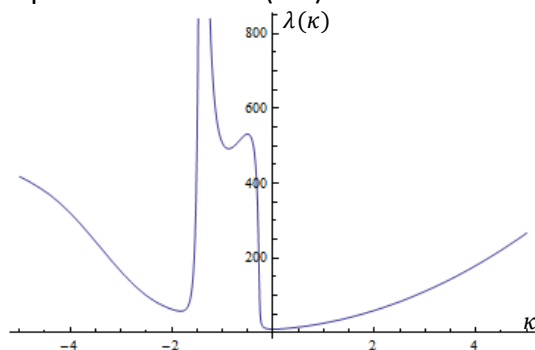


S mínusom vo vzťahu (2.9):

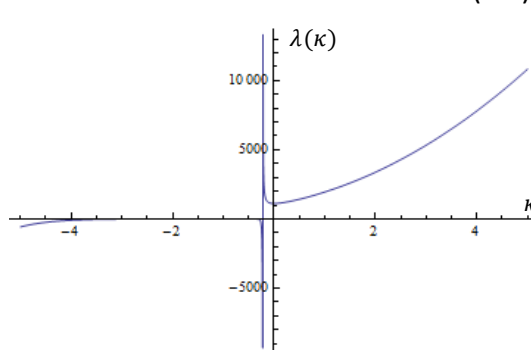


$l = 1, n = 2,$

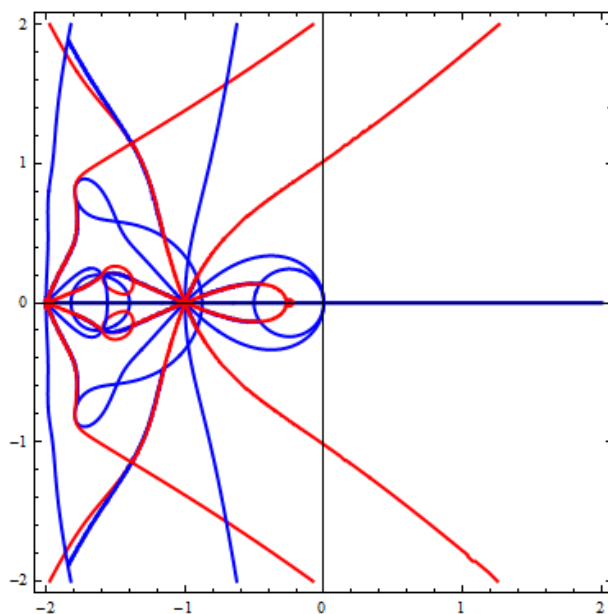
S plusom vo vzťahu (2.9):



S mínusom vo vzťahu (2.9):



Obrázok 2.2. Grafy $\lambda(\kappa)$ pre separabilný potenciál ranku 2 pozostávajúci z dvoch potenciálov (2.5a) s $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 2$.



Obrázok 2.3. Krivky v komplexnej rovine κ s nulovou reálnou časťou $\lambda(\kappa)$ (červenou) a s nulovou imaginárnou časťou $\lambda(\kappa)$ (modrou). Použitý potenciál ranku 2 pozostávajúci z dvoch potenciálov (2.5a) s $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 2$, $l = 1$, $n = 2$.

Spočítané hodnoty $\lambda(\kappa)$ použité v obrázkoch 2.2. a 2.3. sú:

Pre $l = 0$, $n = 2$:

$$\lambda(\kappa) = \frac{-\frac{\pi}{4\alpha_1(\alpha_1+\kappa)^2} - \frac{\pi}{4\alpha_2(\alpha_2+\kappa)^2} \pm \sqrt{\frac{\pi^2}{(\alpha_1+\alpha_2)^2(\alpha_1+\kappa)^2(\alpha_2+\kappa)^2} + \left(-\frac{\pi}{4\alpha_1(\alpha_1+\kappa)^2} + \frac{\pi}{4\alpha_2(\alpha_2+\kappa)^2}\right)^2}}{2\left(-\frac{\pi^2}{16\alpha_1\alpha_2(\alpha_1+\kappa)^2(\alpha_2+\kappa)^2} + \frac{\pi^2}{4(\alpha_1+\alpha_2)^2(\alpha_1+\kappa)^2(\alpha_2+\kappa)^2}\right)},$$

Pre $l = 1$, $n = 2$:

$\lambda(\kappa) =$

$$\frac{\frac{\pi(\alpha_1^2+4\alpha_1\kappa+\kappa^2)}{32\alpha_1^3(\alpha_1+\kappa)^4} - \frac{\pi(\alpha_2^2+4\alpha_2\kappa+\kappa^2)}{32\alpha_2^3(\alpha_2+\kappa)^4} \pm \sqrt{\frac{\pi^2(\alpha_1\alpha_2+2(\alpha_1+\alpha_2)\kappa+\kappa^2)^2}{4(\alpha_1+\alpha_2)^6(\alpha_1+\kappa)^4(\alpha_2+\kappa)^4} + \left(-\frac{\pi(\alpha_1^2+4\alpha_1\kappa+\kappa^2)}{32\alpha_1^3(\alpha_1+\kappa)^4} + \frac{\pi(\alpha_2^2+4\alpha_2\kappa+\kappa^2)}{32\alpha_2^3(\alpha_2+\kappa)^4}\right)^2}}{2\left(-\frac{\pi^2(\alpha_1^2+4\alpha_1\kappa+\kappa^2)(\alpha_2^2+4\alpha_2\kappa+\kappa^2)}{1024\alpha_1^3\alpha_2^3(\alpha_1+\kappa)^4(\alpha_2+\kappa)^4} + \frac{\pi^2(\alpha_1\alpha_2+2(\alpha_1+\alpha_2)\kappa+\kappa^2)^2}{16(\alpha_1+\alpha_2)^6(\alpha_1+\kappa)^4(\alpha_2+\kappa)^4}\right)}.$$

Následne sa pozrime na prípad dvoch potenciálov s rôznymi väzbovými konštantami:

$$\hat{V} = -\lambda_1 |g_1\rangle\langle g_1| - \lambda_2 |g_2\rangle\langle g_2|,$$

kde potenciál indexovaný 1 predstavuje pridaný potenciál a potenciál indexovaný 2 je pôvodný potenciál. Z (2.8) vieme dostať:

$$\lambda_1 = \frac{1 - \lambda_2 I_2}{\lambda_2 (I_3^2 - I_1 I_2) + I_1}. \quad (2.11)$$

Použime konkrétne potenciály typu (2.5a):

$$g_1(p) = \frac{p}{(p^2 + \alpha^2)^2},$$

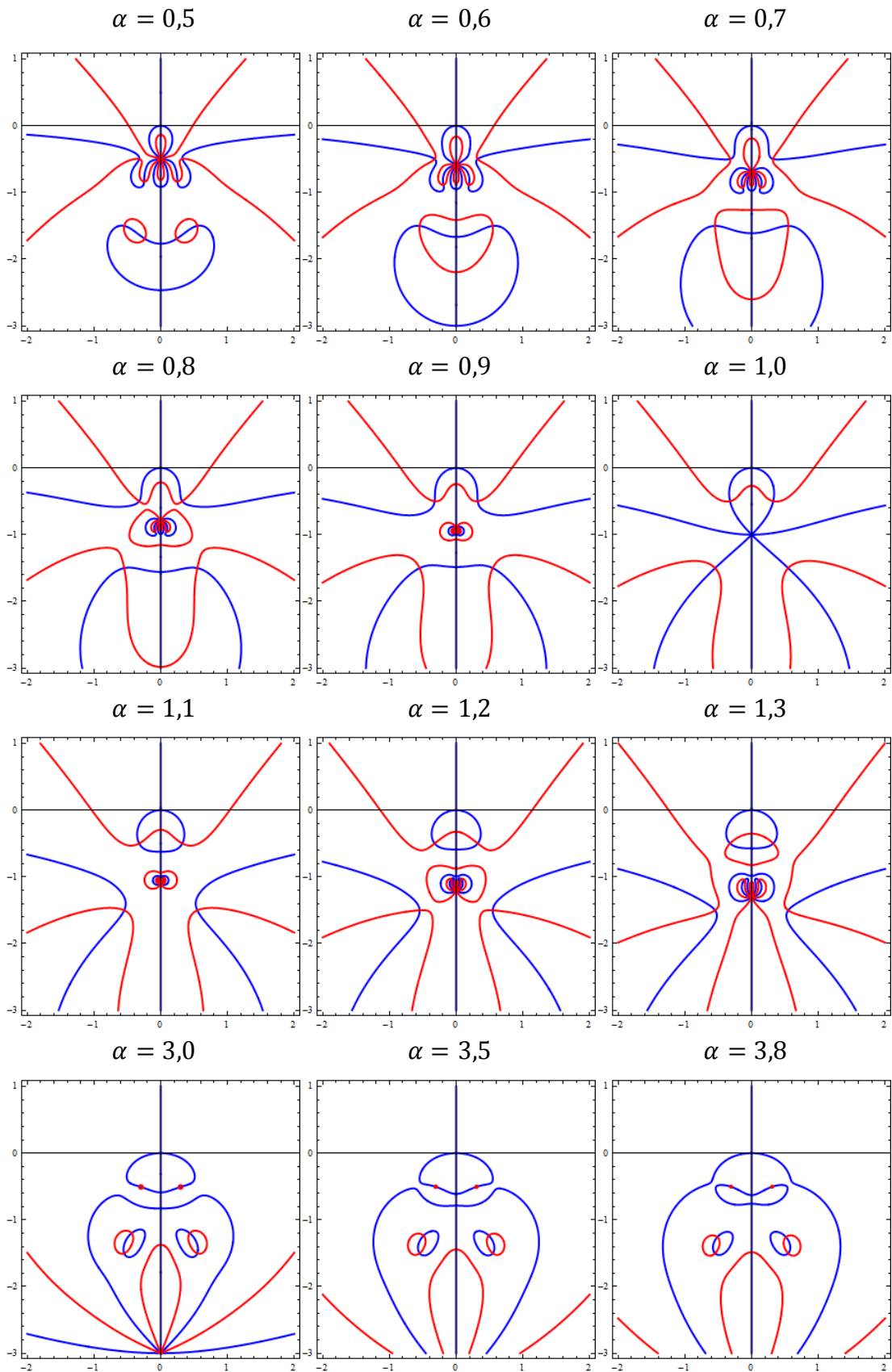
$$g_2(p) = \frac{p}{(p^2 + \beta^2)^2}.$$

Teda dostávame závislosť:

$$\lambda_1(\kappa) = \frac{1024(\alpha + \kappa)^4 \left(1 - \frac{\pi \lambda_2 (\beta^2 + 4\beta\kappa + \kappa^2)}{32\beta^3(\beta + \kappa)^4} \right)}{\pi \left(\frac{32(\alpha^2 + 4\alpha\kappa + \kappa^2)}{\alpha^3} + \frac{\pi \lambda_2 \left(\frac{(\alpha^2 + 4\alpha\kappa + \kappa^2)(\beta^2 + 4\beta\kappa + \kappa^2)}{\alpha^3 \beta^3} + \frac{64(\alpha\beta + 2(\alpha + \beta)\kappa + \kappa^2)^2}{(\alpha + \beta)^6} \right)}{(\beta + \kappa)^4} \right)}. \quad (2.12)$$

Ak zvolíme $\lambda_2 = 1$ a $\beta = 1$, má pôvodný potenciál (tabuľka 2.1a.) rezonancie v bodoch $k = -i\kappa \doteq \pm 0,548 - 1,501i$ a $k \doteq \pm 0,323 - 0,499i$. Celkové $\lambda_1(\kappa)$ má v týchto bodoch nulu nezávisle od voľby α .

Ďalej budeme pozorovať tvar kriviek $\text{Re}[\lambda_1(k)] = 0$, $\text{Im}[\lambda_1(k)] = 0$ v komplexnej rovine $k = i\kappa$ v závislosti od parametru α . Zistujeme teda, či je možné z rezonančných stavov pôvodného potenciálu vytvoriť viazané stavy zosilňovaním pridaného potenciálu, teda či existuje modrá krivka prechádzajúca danou rezonanciou, po ktorej sa vieme dostať na kladnú imaginárnu os.



Obrázok 2.4. Krivky v komplexnej rovine k s nulovou reálnou časťou $\lambda_1(k)$ (červenou) a s nulovou imaginárnou časťou $\lambda_1(k)$ (modrou). Používame $\lambda_2 = 1$, $\beta = 1$ a meníme hodnotu α .

Vidíme, že pre malú hodnotu α majú krivky funkcie $\lambda_1(k)$ okolo bodov $k \doteq \pm 0,323 - 0,499i$ tvar veľmi podobný grafu z obrázku 2.1a. pre $l = 1, n = 2$ (otočený o 90°). Modré krivky prechádzajúce bodmi v $k \doteq \pm 0,323 - 0,499i$ prechádzajú pólom v bode $-\alpha$ a krivky prechádzajúce $k \doteq \pm 0,548 - 1,501i$ tvoria izolovaný okruh. **Pre malé hodnoty α sa teda nedá rezonančný stav premeniť na viazaný stav.**

Okolo hodnoty $\alpha = 0,6$ sa zvyšovaním α začnú približovať krivky prechádzajúce $k \doteq \pm 0,323 - 0,499i$ ku krivkám, po ktorých sa dá dostať na kladnú imaginárnu os. Pre hodnotu α približne $0,643$ sa krivky dotknú a **pre vyššie α sa potom môžeme po modrej krivke dostať z rezonancie do viazaných stavov.** Pre $\alpha = 1$ dochádza k ďalšiemu dotyku a štruktúra kriviek sa znova mení. Rezonancie $k \doteq \pm 0,323 - 0,499i$ zostávajú na uzavretom okruhu ktorý sa stále dotýka kladnej imaginárnej osi. Rezonancie $k \doteq \pm 0,548 - 1,501i$ sa práve „oslobodia“ z okruhu, no modré krivky nimi prechádzajúce sa len približujú ľubovoľne blízko ku kladnej imaginárnej osi a nikdy sa jej nedotknú.

Ďalším zvyšovaním α sa najprv rezonancie $k \doteq \pm 0,548 - 1,501i$ znova dostanú na izolovaný okruh a okolo $\alpha \doteq 3,67$ dochádza k dotyku modrých kriviek, po ktorom aj rezonancie $k \doteq \pm 0,323 - 0,499i$ ostanú na izolovanom okruhu, ktorý sa nedotýka kladnej imaginárnej osi. Následným zvyšovaním α sa už táto situácia nemení, t.j. **pre príliš vysoké α sa rezonančné stavy taktiež nedajú premeniť na viazané.**

Toto porovnanie nám ukazuje, že správna voľba poruchového potenciálu v ACCC metóde je zásadná.

2.4. Analytické predĺženie väzbovej konštanty

V tejto časti nás bude zaujímať otázka výpočtu rezonančnej energie a šírky zo znalosti energií viazaných stavov. Použijeme metódu analytického predĺženia väzbovej konštanty. Predpokladajme najprv, že máme Hamiltonián H_0 , ktorý generuje rezonanciu na energii E :

$$E = E_R - \frac{i}{2}\Gamma, \quad (2.13)$$

kde E_R je energia rezonancie a Γ jej šírka. K hamiltoniánu H_0 ďalej pridáme príťažlivý potenciál V pre násobený kladnou reálnou väzbovou konštantou λ .

$$H = H_0 + \lambda V.$$

Zvyšovaním λ sa príťažlivá interakcia zosilňuje a niektoré rezonančné stavy H_0 sa stanú viazanými stavmi H .

Na zistenie E_R a Γ ale nestačí jednoduchý rozvoj E v λ . Rozvojom závislosti $\lambda(\kappa)$ okolo $\kappa = 0$ vieme spraviť inverzný rozvoj $\kappa(\lambda)$, ale v premennej $\sqrt{\lambda - \lambda_0}$, kde λ_0 je absolútny člen rozvoja $\lambda(\kappa)$ (teda $\kappa(\lambda_0) = 0$). Pri hodnotách $\lambda < \lambda_0$ dostávame komplexné κ .

Dosadením $\lambda = 0$ dostáva energia:

$$E = -\kappa^2 = -(\operatorname{Re}(\kappa)^2 - \operatorname{Im}(\kappa)^2) - 2i \operatorname{Re}(\kappa)\operatorname{Im}(\kappa)$$

svoju reálnu aj imaginárnu časť.

Ako prvé, skúsme spraviť rozvoje $\lambda(\kappa)$ okolo $\kappa = 0$ pre už spočítané závislosti $\lambda(\kappa)$ z tabuliek 2.1a. a 2.1b. Rozvíjame teda $\lambda(\kappa)$ len pre osamotený potenciál bez nejakého pôvodného hamiltoniánu H_0 . Vytvorením inverznej rady $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$ a dosadením $\lambda = 0$ teraz nedostaneme rezonančné stavy H_0 , ale môžeme dostať polohu pólu $\lambda(\kappa) = 0$.

Za istých podmienok pre vlnovú funkciu (riešiacu rovnicu (2.3)) platí, že Taylorov rozvoj v κ funkcie $\lambda(\kappa)$ získanej napríklad z potenciálov (2.5a), (2.5b) má nulové koeficienty pri prvých l nepárnych mocninách κ . V našom prípade sú tieto podmienky splnené stále. Teda prvá nepárna mocnina κ s nenulovým koeficientom je vždy κ^{2l+1} . Keďže máme už spočítané samotné $\lambda(\kappa)$, nemusíme overovať platnosť podmienok pre vlnovú funkciu, ale môžeme priamo spočítať rozvoje $\lambda(\kappa)$. Rozvojom funkcií z tabuliek 2.1a. a 2.1b. skutočne vo všetkých prípadoch dostávame pre nepárne mocniny prvý nenulový koeficient pri κ^{2l+1} .

n	Rozvoj $\lambda(\kappa)$
1	$\frac{256\alpha^5}{3\pi} + \frac{1280\alpha^3\kappa^2}{9\pi} - \frac{20480\alpha\kappa^4}{27\pi} + \frac{32768\kappa^5}{9\pi} + O[\kappa]^6$
2	$\frac{512\alpha^7}{3\pi} + \frac{3584\alpha^5\kappa^2}{9\pi} - \frac{71680\alpha^3\kappa^4}{27\pi} + \frac{131072\alpha^2\kappa^5}{9\pi} + O[\kappa]^6$
3	$\frac{2048\alpha^9}{7\pi} + \frac{6144\alpha^7\kappa^2}{7\pi} - \frac{49152\alpha^5\kappa^4}{7\pi} + \frac{2097152\alpha^4\kappa^5}{49\pi} + O[\kappa]^6$

Tabuľka 2.2. Príklady rozvoja $\lambda(\kappa)$ z tabuľky 2.1a. v κ pre $l = 2$ do piateho rádu.

Pri tvorení inverznej rady $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$ bude teda prvá párna mocnina $\sqrt{\lambda - \lambda_0}$ s nenulovým koeficientom $(\sqrt{\lambda - \lambda_0})^{2l}$. Tento člen je potrebný na získanie reálnej časti κ pri dosadzovaní $\lambda = 0$.

$l = 1$	
n	$\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$
1	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{3}} \sqrt{\frac{1}{\alpha}} \sqrt{\lambda - \frac{16\alpha^3}{\pi}} + \frac{\pi \left(\lambda - \frac{16\alpha^3}{\pi} \right)}{36\alpha^2} + o \left[\lambda - \frac{16\alpha^3}{\pi} \right]^{3/2}$
2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{10}} \sqrt{\frac{1}{\alpha^3}} \sqrt{\lambda - \frac{32\alpha^5}{\pi}} + \frac{\pi \left(\lambda - \frac{32\alpha^5}{\pi} \right)}{100\alpha^4} + o[\dots]^{3/2}$
3	$\frac{1}{16} \sqrt{\frac{5\pi}{7}} \sqrt{\frac{1}{\alpha^5}} \sqrt{\lambda - \frac{256\alpha^7}{5\pi}} + \frac{\pi \left(\lambda - \frac{256\alpha^7}{5\pi} \right)}{196\alpha^6} + o[\dots]^{3/2}$

$l = 2$	
n	$\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$
1	$\frac{3}{16} \sqrt{\frac{\pi}{5}} \sqrt{\frac{1}{\alpha^3}} \sqrt{\lambda - \frac{256\alpha^5}{3\pi}} + \frac{9\pi^{3/2} \left(\frac{1}{\alpha^3} \right)^{3/2} \left(\lambda - \frac{256\alpha^5}{3\pi} \right)^{3/2}}{2560\sqrt{5}\alpha^2} - \frac{81\pi^2 \left(\lambda - \frac{256\alpha^5}{3\pi} \right)^2}{128000\alpha^9} + o \left[\lambda - \frac{256\alpha^5}{3\pi} \right]^{5/2}$
2	$\frac{3}{16} \sqrt{\frac{\pi}{14}} \sqrt{\frac{1}{\alpha^5}} \sqrt{\lambda - \frac{512\alpha^7}{3\pi}} + \frac{45\pi^{3/2} \left(\frac{1}{\alpha^5} \right)^{3/2} \left(\lambda - \frac{512\alpha^7}{3\pi} \right)^{3/2}}{28672\sqrt{14}\alpha^2} - \frac{81\pi^2 \left(\lambda - \frac{512\alpha^7}{3\pi} \right)^2}{702464\alpha^{13}} + o[\dots]^{5/2}$
3	$\frac{1}{32} \sqrt{\frac{7\pi}{6}} \sqrt{\frac{1}{\alpha^7}} \sqrt{\lambda - \frac{2048\alpha^9}{7\pi}} + \frac{7\sqrt{7}\pi^{3/2} \left(\frac{1}{\alpha^7} \right)^{3/2} \left(\lambda - \frac{2048\alpha^9}{7\pi} \right)^{3/2}}{49152\alpha^2} - \frac{7\pi^2 \left(\lambda - \frac{2048\alpha^9}{7\pi} \right)^2}{221184\alpha^{17}} + o[\dots]^{5/2}$

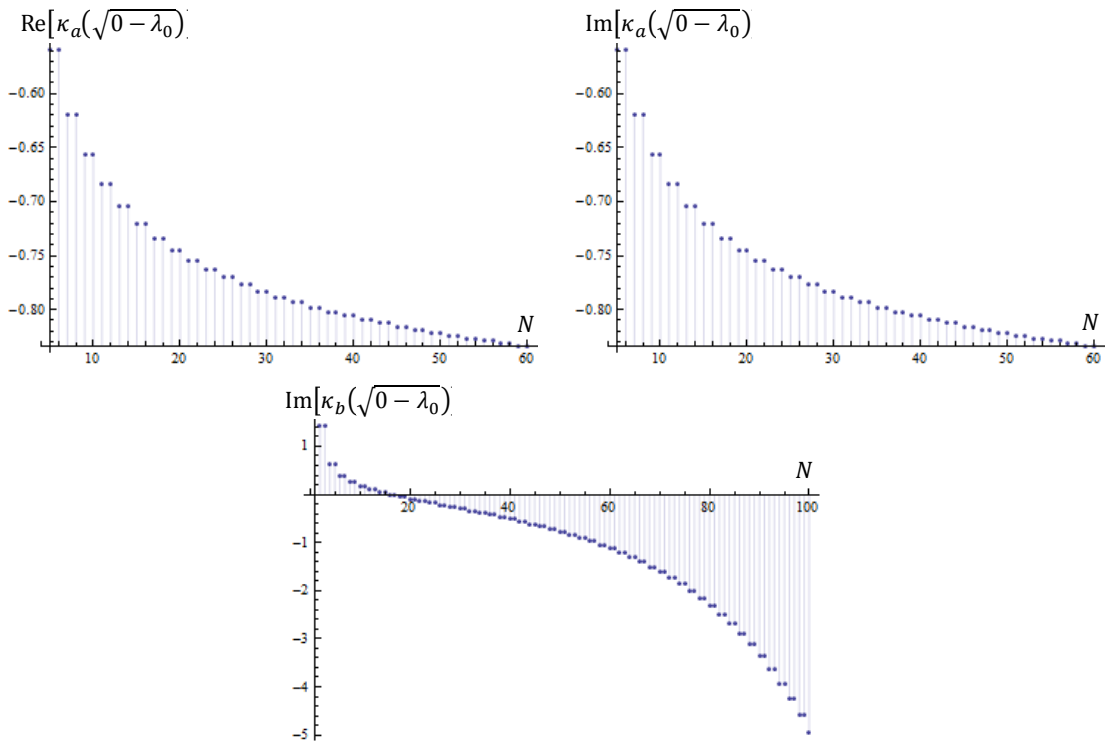
Tabuľka 2.3. Príklady inverznej rady $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$ ku rozvojom $\lambda(\kappa)$ pre $l = 1$ a $l = 2$

Z takýchto rozvojev chceme spočítať hodnoty $\kappa(\sqrt{0 - \lambda_0})$, čím by sme mali dostať jeden z bodov $\lambda(\kappa) = 0$. Z tabuľky 2.1a. hneď vidíme, že pre potenciály (2.5a) by sme mali jednoducho dostať $\kappa = -\alpha$. Pri samotnom dosadzovaní sa ale ukazuje, že aj keď pre $l = 1$ inverzné rady konvergujú pre ľubovoľné n do požadovanej hodnoty, pre $l = 2$ a $l = 3$ divergujú.

Pre potenciál (2.5b) s hodnotou $l = 1$ dostávame v rozvoji $\kappa(\sqrt{0 - \lambda_0})$ len jednu párnú mocninu $(\sqrt{0 - \lambda_0})$, a to je $\frac{1}{4}\pi \left(\lambda - \frac{2(\alpha+\beta)}{\pi} \right)$. Reálna časť $\kappa(\sqrt{0 - \lambda_0})$ sa teda nemení so stupňom rozvoja (ak je rovný aspoň 2). Po dosadení $\lambda = 0$ dostávame teda $\text{Re}[\kappa(\sqrt{0 - \lambda_0})] = -\frac{\alpha+\beta}{2}$, teda aritmetický priemer dvoch nulových bodov.

Imaginárna časť tohto rozvoja je ale divergentná.

Nasledujúce grafy znázorňujú túto konvergenciu resp. divergenciu pre $l = 1, n = 1$.



Obrazok 2.5. Reálna časť $\kappa_a(\sqrt{0 - \lambda_0})$ pre potenciál (2.5a) (hodnoty $l = 1, n = 1, \alpha = 1$) v závislosti od počtu použitých členov rozvoja a imaginárna časť $\kappa_{a,b}(\sqrt{0 - \lambda_0})$ pre potenciály (2.5a) a (2.5b) (hodnoty $l = 1, n = 1, \alpha = 1, \beta = 1$) v závislosti od počtu členov rozvoja.

Ďalej by sme chceli otestovať presnosť metódy používajúcej $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$ aplikovanej na nejaký hamiltonián H_0 ktorého rezonančné stavy poznáme. Rozoberme situáciu, keď je neporušený hamiltonián H_0 v rovnici

$$H = H_0 - \lambda |g\rangle\langle g|, \quad (2.14)$$

rovný

$$H_0 = -\bar{\lambda} |g\rangle\langle g|. \quad (2.15)$$

Namiesto rovníc (2.3) a (2.4) potom dostaneme:

$$|\psi\rangle = -(\bar{\lambda} + \lambda) G_0 |g\rangle\langle g|\psi\rangle, \quad (2.16)$$

$$\lambda = \frac{1}{-\langle g|G_0|g\rangle} - \bar{\lambda}. \quad (2.17)$$

Teda, ak znova použijeme potenciály (2.5a) resp. (2.5b), dostaneme závislosti $\lambda(\kappa)$ ako v tabuľke 2.1a. resp. 2.1b. Ilen posunuté o $-\bar{\lambda}$. V rozvojoch $\lambda(\kappa)$ potom dostávame absolútne členy $\lambda_0 - \bar{\lambda}$ a inverzné rozvoje teda majú tvar $\kappa(\sqrt{\lambda + \bar{\lambda} - \lambda_0})$ analogický s predchádzajúcou časťou. Musíme si teda najprv zvoliť hodnoty $\bar{\lambda}$ a α pre ktoré spočítame rezonancie neporušeného hamiltoniánu H_0 , a potom tieto hodnoty $\bar{\lambda}$ a α budeme dosadzovať do N -členných rozvojev

$\kappa(\sqrt{\lambda + \bar{\lambda} - \lambda_0})$, z ktorých taktiež spočítame $E_R = -(\text{Re}(\kappa)^2 - \text{Im}(\kappa)^2)$
a $\Gamma = 4 \text{Re}(\kappa)\text{Im}(\kappa)$.

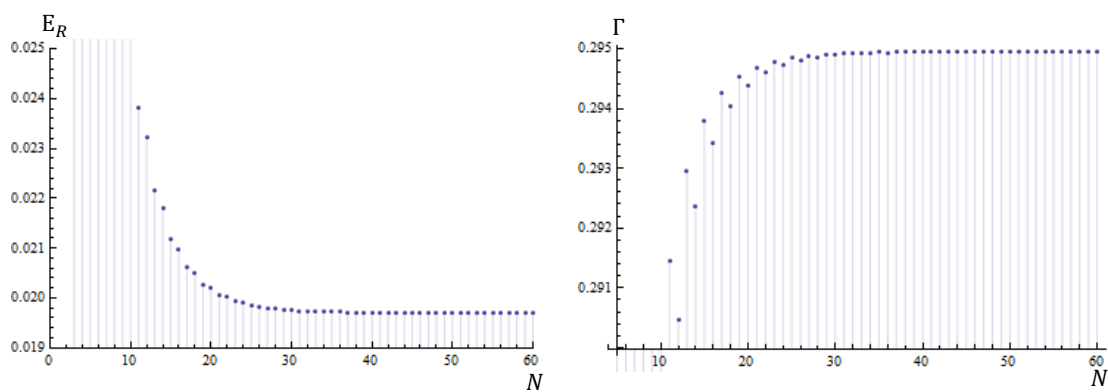
Ako sa dalo čakať z výsledkov minulej časti, sú rozvoje konvergentné ak použijeme potenciál (2.5a) s hodnotou $l = 1$.

V tabuľke 2.4. porovnáme priamo vypočítané parametre rezonancie hamiltoniánu v tvare (2.15) s parametrami, ktoré získame dosadením $\lambda = 0$ do N -členného inverzného rozvoja $\kappa(\sqrt{\lambda + \bar{\lambda} - \lambda_0})$ ku rozvoju funkcie (2.17) pre fixné hodnoty $\alpha, \bar{\lambda}$ a rôzne N .

$l = 1, n = 1, \alpha = 1, \bar{\lambda} = 5$		
	E_R	Γ
priamo	0.005984465957888859	0.002536148704692549
N	E_R	Γ
3	0.006018291907801614	0.0025310055169126535
5	0.0059848087774801014	0.0025361060931782097
7	0.005984470177081023	0.002536148254233854
9	0.005984466015057034	0.0025361486993096
11	0.005984465958709712	0.002536148704623219
$l = 1, n = 2, \alpha = 1, \bar{\lambda} = 10$		
	E_R	Γ
priamo	0.0036051781010220272	0.0014173803762015129
N	E_R	Γ
3	0.0036163449694911155	0.0014115660791272995
5	0.0036053124422790266	0.0014173258504798442
7	0.003605179897696209	0.0014173797389907187
9	0.0036051781266747823	0.0014173803678965047
11	0.0036051781014044115	0.0014173803760858996
$l = 1, n = 3, \alpha = 1, \bar{\lambda} = 5$		
	E_R	Γ
priamo	0.019704162108919912	0.2949503352694365
N	E_R	Γ
3	0.06623849478934454	0.22793777412222208
10	0.025759225092676065	0.2868778661992315
20	0.020195675061156743	0.2943880830465371
30	0.01975583044079983	0.294895179818244
40	0.019710249166488197	0.2949441163276967

Tabuľka 2.4. Energia a šírka rezonancie v závislosti od N . Používame potenciály (2.5a) s $l = 1$.

Očividne s rastúcou zložitou funkciou $\lambda(\kappa)$ rastie počet členov, ktoré musíme vysčítať.



Obrázok 2.6. Konvergencia reálnej a imaginárnej časti $\kappa\left(\sqrt{\bar{\lambda}} - \lambda_0\right)$ pre potenciál (2.5a) (hodnoty $l = 1, n = 3, \alpha = 1, \bar{\lambda} = 5$) v závislosti od počtu použitých členov rozvoja.

Záver

V práci sme najprv uviedli základné typy integrálnych rovníc a ukázali obecný postup ich riešenia. Odvodili sme postup na získanie regulárneho a Jostovho riešenia Schrödingerovej rovnice s istými obmedzeniami na potenciál $V(x)$.

Následne sme odvodili vzorec na výpočet funkcie $\lambda(\kappa)$ pre separabilné potenciály ranku 1 a explicitne ju spočítali pre sériu jednoduchých potenciálov tohto typu. Skúmali sme pohyb núl imaginárnej a reálnej časti tejto funkcie v komplexnej rovine κ , čo nám dáva náhľad na pohyb rezonančných stavov týchto potenciálov pri zmene väzbovej konštanty λ .

Ďalej sme odvodili výpočet $\lambda(\kappa)$ pre separabilné potenciály ranku 2 pre prípad rovnakých aj rôznych hodnôt ich väzbových konštánt. Pre rovnakú hodnotu väzbových konštánt sme spočítali funkciu $\lambda(\kappa)$ pre dve jednoduché separabilné potenciály ranku 2. Pre rôzne väzbové konštanty sme spočítali $\lambda(\kappa)$ pre jeden konkrétny potenciál a skúmali sme správanie sa tejto funkcie v komplexnej rovine κ pre rôzne hodnoty druhej väzbovej konštanty. Ukázalo sa, že pre správne polohy stredu pridaného príťažlivého potenciálu môžu niektoré rezonančné stavy pôvodného potenciálu prejsť do viazaných stavov.

Nakoniec sme počítali Taylorovské rozvoje inverzných funkcií $\kappa(\sqrt{\lambda - \lambda_0})$ pre konkrétne separabilné potenciály ranku 1. V prípade konvergentných rozvojev vieme pomocou nich priamym dosadením λ získať energiu a šírku rezonancie.

Výsledky tejto práce priniesli nové náhľady na správanie sa väzbového parametra v závislosti od energie a upresnili analytické chovanie funkcií $\lambda(\kappa)$ a $\kappa(\lambda)$. Tieto výsledky budú použité v aplikácii ACCC metódy na reálne systémy a hlavne prispesú k optimalizácii voľby perturbačného potenciálu. Dobrá voľba perturbačného potenciálu je zásadná pre dobrú efektivitu metódy ACCC.

Použitá literatura

[1] V. de Alfaro, T. Regge. *Potential Scattering*. North-Holland Publishing Company-Amsterdam, (1965).

[2] V. I. Kukulín, V. M. Krasnopol'sky, J. Horáček. *Theory of Resonances: Principles and Applications*. Academia, Praha, 1989.

ISBN 90-277-2364-8.

[3] L. P. Kok, H. van Haeringen. *Annals of Physics* 131, 426-450 (1981).

[4] J. Kopáček. *Matematická analýza nejen pro fyziky (III)*. Matfyzpress, 2007.

ISBN 978-80-7378-020-3.

Príloha – programy v Mathematice

Na počítanie závislostí $\lambda(\kappa)$ a ich následné grafické znázornenie bol použitý program Wolfram Mathematica 9.0 s nasledujúcimi vstupmi:

Potenciál (2.5a):

```
Clear["Global`*"]
```

```
l=1; (* použité l a n*)
```

```
n=1;
```

```
F[a_]:=Function[\[Kappa],Evaluate[Block[{\[Alpha],\[Lambda]},g,G,M],
```

```
g[p_]:=p^l/(p^2+\[Alpha]^2)^(l+n/2);
```

```
G=-Integrate[p^2/(\[Kappa]^2+p^2) g[p] ^2,{p,0,\[Infinity]},Assumptions->{\[Kappa]>0,\[Alpha]>0}];
```

```
M=1/\[Lambda]+G;
```

```
(\[Lambda]/.Simplify[Solve[M==0,\[Lambda]]][[1]]/.{\[Alpha]->a}]]];
```

```
GraphOptions={
```

```
Axes->True,
```

```
AspectRatio->Automatic,
```

```
ImageSize->300,
```

```
MaxRecursion->4,
```

```
ContourStyle->{{Blue,Thick},{Red,Thick}},
```

```
PlotLabel -> Row[{""]
```

```
};
```

```
CP[F_]:=Block[{},
```

```
Return[
```

```
ContourPlot[{Im[F[kr+l ki]]==0,Re[F[kr+l ki]]==0},{kr,-4,2},{ki,-3,3},Evaluate[GraphOptions]]
```

```
];
```

```
];
```

```
Show[CP[F[1]]] (* tu sa dosadzuje hodnota alpha *)
```

```
F[\[Alpha]][\[Kappa]]
```

Potenciál (2.5b):

```
Clear["Global`*"]
```

```
l=1; (* použité l *)
```

```
F[a_,b_]:=Function[\[Kappa],Evaluate[Block[{\[Alpha],\[Beta],\[Lambda],g,G,M},
```

```
g[p_]:=p^l/((p^2+\[Beta]^2)^(1/2) (p^2+\[Alpha]^2)^(1/2));
```

```
G=-Integrate[p^2/(\[Kappa]^2+p^2) g[p] ^2,{p,0,\[Infinity]},Assumptions->{\[Kappa]>0,\[Alpha]>0,\[Beta]>0}];
```

```
M=1/\[Lambda]+G;
```

```
(\[Lambda]/.Simplify[Solve[M==0,\[Lambda]]][[1]]/.{\[Alpha]->a,\[Beta]->b}]]];
```

```
GraphOptions={
```

```
Axes->True,
```

```
AspectRatio->Automatic,
```

```
ImageSize->300,
```

```
MaxRecursion->4,
```

```
ContourStyle->{{Blue,Thick},{Red,Thick}},
```

```
PlotLabel -> Row[{""]
```

```
};
```

```
CP[F_]:=Block[{},
```

```
Return[
```

```
ContourPlot[{Im[F[kr+l ki]]==0,Re[F[kr+l ki]]==0},{kr,-4,2},{ki,-3,3},Evaluate[GraphOptions]]
```

```
];
```

```
];
```

```
Show[CP[F[1,2]]] (* tu sa dosadzuje alpha a beta *)
```

```
F[\[Alpha],\[Beta]]\[Kappa]
```


Potenciál ranku 2 s dvomi lambdami:

```
Clear["Global`*"]
\[Lambda]^2=1;
l=1;
n=2;

F[a_,b_]:=Function[k,Evaluate[Block[{\[Alpha],[Beta],[Lambda],M,l1,l2,l3,L1},
l1:=Integrate[(p^1/(p^2+\[Alpha]^2)^(l+n/2))^2
p^2/(\[Kappa]^2+p^2),{p,0,Infinity},Assumptions->\[Alpha]>0&&\[Kappa]>0];
l2:=Integrate[(p^1/(p^2+\[Beta]^2)^(l+n/2))^2
p^2/(\[Kappa]^2+p^2),{p,0,Infinity},Assumptions->\[Beta]>0&&\[Kappa]>0];
l3:=Integrate[(p^1/(p^2+\[Alpha]^2)^(l+n/2))(p^1/(p^2+\[Beta]^2)^(l+n/2))
p^2/(\[Kappa]^2+p^2),{p,0,Infinity},Assumptions-
>\[Alpha]>0&&\[Kappa]>0&&\[Beta]>0];
L1:=(1-\[Lambda]^2 l2)/(\[Lambda]^2(l3^2-l1 l2)+l1);
M=-\[Lambda]+L1;
(\[Lambda]/.Simplify[Solve[M==0,\[Lambda]]][[1]]/.{\[Kappa]->- l k,\[Alpha]-
>a,\[Beta]->b}
]]];
```

```
GraphOptions={
Axes->True,
AspectRatio->Automatic,
ImageSize->300,
MaxRecursion->4,
ContourStyle->{{Blue,Thick},{Red,Thick}},
PlotLabel -> Row[{""]}
};
CP[F_]:=Block[{},
Return[
ContourPlot[{Im[F[kr+l ki]]==0,Re[F[kr+l ki]]==0},{kr,-2,2},{ki,-
3,1},Evaluate[GraphOptions]]
];
];
Graf[F_]:=Module[{cp},
cp=CP[F];
Return[Show[cp]];
];
```

```
Graf[F[1.3,1]]
F[\[Alpha],[Beta]][k]
```

Potenciál ranku 2 s jednou lambdou:

```
Clear["Global`*"]
l=1;
n=2;
\[Beta]=2;

F[a_,i_]:=Function[k,Evaluate[Block[{\[Alpha],\[Lambda],g1,g2,G1,G2,G3,G,M},
g1[p_]:=p^l/(p^2+\[Alpha]^2)^(l+n/2);
g2[p_]:=p^l/(p^2+\[Beta]^2)^(l+n/2);
G1=Integrate[p^2/(\[Kappa]^2+p^2) g1[p]^2,{p,0,\[Infinity]},Assumptions->{\[Kappa]>0,\[Alpha]>0}];
G2=Integrate[p^2/(\[Kappa]^2+p^2) g2[p]^2,{p,0,\[Infinity]},Assumptions->{\[Kappa]>0,\[Beta]>0}];
G3=Integrate[p^2/(\[Kappa]^2+p^2) g1[p]g2[p],{p,0,\[Infinity]},Assumptions->{\[Kappa]>0,\[Alpha]>0,\[Beta]>0}];
G=Together[-(G1+G2)+(-1)^i Sqrt[(G1-G2)^2+4G3^2]/(2(G3^2-G1 G2))];
M=-\[Lambda]+G;
(\[Lambda]/.Simplify[Solve[M==0,\[Lambda]]])/.{\[Kappa]-> k,\[Alpha]->a}
]];

GraphOptions={
Axes->True,
AspectRatio->Automatic,
ImageSize->300,
MaxRecursion->4,
ContourStyle->{{Blue,Thick},{Red,Thick}},
PlotLabel -> Row[{""]}
};
CP[F_]:=Block[{},
Return[
ContourPlot[{Im[F[kr+I ki]]==0,Re[F[kr+I ki]]==0},{kr,-2,2},{ki,-2,2},Evaluate[GraphOptions]]
];
];
Graf[F_]:=Module[{cp},
cp=CP[F];
Return[Show[cp]];
];

Show[Graf[F[1,0]],Graf[F[1,1]]]
```