Kéttest Coulomb Szórás

Hornyák István

Témavezető:
Dr. Kruppa András

Debreceni Egyetem Informatikai Kar
PhD Konferencia
Hollókő, 2013. április 4-5.

Bemutatkozás

Doktori program: Elméleti számítástudomány, adatvédelem és kriptográfia

Doktori programvezető: Dr. Pethő Attila

Doktori téma: Szimbolikus és numerikus számítási módszerek háromtest rendszerek kvantummechanikai modelljében

Doktori témavezető: Dr. Kruppa András Tibor

I. Motivációk és Eredmények

1. Motiváció

- Az elektromos töltéssel rendelkező részecskék szórása fontos és nehéz kvantummechanikai probléma.
- Schrödinger-egyenlet:

$$\left(\hat{H} - E\right)\Psi = 0$$

$$\Psi_{kötött} \in \mathcal{L}^2$$
$$\Psi_{szórási} \notin \mathcal{L}^2$$

- Komplex skálázás:

$$\bar{r} \rightarrow \bar{r}e^{i\Theta}$$
$$\Downarrow$$
$$\Psi^{\Theta}_{szórási} \in \mathcal{L}^2$$

- <u>CÉL:</u> A bonyolult szórási határfeltételek egyszerűsítése.

- A teljes szórási hullámfüggvény felbontása:

$$\Psi^{+}\left(\bar{k},\bar{r}\right) \equiv \Phi\left(\bar{k},\bar{r}\right) + \Psi^{sc+}\left(\bar{k},\bar{r}\right)$$

$$\begin{array}{cc} \Updownarrow & \Updownarrow \\ \text{ismert} & \text{ismeretlen} \end{array}$$

$$\Downarrow$$

- Driven Schrödinger-egyenlet:

$$\left(E - \hat{H}\right)\Psi^{sc+}\left(\bar{k},\bar{r}\right) = S(\bar{k},\bar{r})$$

ahol a forrástag

$$S\left(\bar{k},\bar{r}\right) \equiv \left(\hat{H} - E\right)\,\Phi\left(\bar{k},\bar{r}\right)$$

- PROBLÉMA: Az eddig használt Φ függvényekkel felírt driven Schrödinger-egyenletek standard komplex skálázása csak rövid hatótávú potenciálokra egyszerűsíti a szórási határfeltételeket, hosszú hatótávú potenciálokra – pl. a Coulomb potenciálra - nem.

- Módszerek a probléma megoldására:
  - Külső Komplex Skálázás
    - Működik rövid és hosszú hatótávú potenciálokra is.
    - Működik 2, 3 töltött részecske rendszerre.
    - A potenciál veszélyes levágása.
  - Két-potenciál Formalizmus Coulomb szórásra
    - A Hamilton operátort egy ismert és egy ismeretlen megoldású részre bontja.
    - Coulomb szórás esetén csak a kéttest rendszer egzakt megoldása ismert.
    - Így több, mint két Coulomb potenciállal rendelkező rendszer szórási problémájának leírására nem alkalmazzák.

1. Eredmény

- <u>Megoldásunk:</u>
  - Mind a veszélyes levágást, mind a két-potenciál formalizmust elkerüli.
  - Kéttest Coulomb és rövid hatótávú potenciállal kiegészített Coulomb szórás esetén is használható.
  - Reményeink szerint háromtest problémára is alkalmazható.

- Módszerünk lényege:
  - Legyen Φ a kéttest Coulomb szórási probléma egzakt megoldásának „incoming” része:

$$\Phi\left(\bar{k},\bar{r}\right) \equiv e^{\frac{\pi\gamma}{2}} e^{i\bar{k}\bar{r}} U\left(-i\gamma, 1, ikr - i\bar{k}\bar{r}\right)$$

  - Dolgozzunk a parciális hullámok szintjén:

$$\Phi\left(\bar{k},\bar{r}\right) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, \Phi_l(k,r) P_l(cos(\vartheta))$$

  - A forrástag analitikusan kiszámítható:

$$S_l(k,r) = \frac{e^{ikr+\gamma\pi/2}}{2r^2\Gamma(-i\gamma)}$$

  - Komplex skálázzuk a radiális driven Schrödinger-egyenletet, majd oldjuk meg.

- A rövid hatótávú V_s potenciállal kiegészített kéttest Coulomb szórás komplex skálázott radiális driven Schrödinger-egyenlete:

$$\left(\frac{k^2}{2} + e^{-2i\Theta}\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} - e^{-2i\Theta}\frac{l}{r}\frac{d}{dr} - e^{-i\Theta}\frac{\gamma k}{r} - V_s(re^{i\Theta})\right) \times$$

$$\times\, \psi_{l,\Theta}^{sc+}(k,r) = r^{l+1} S_{l,\Theta}^{tot}(k,r)$$

ahol

$$S_{l,\Theta}^{tot}(k,r) \equiv S_{l,\Theta}(k,r) + e^{i3\Theta/2}\,\Phi_l\left(k, re^{i\Theta}\right) V_s\left(re^{i\Theta}\right)$$

- A fáziseltolás asszimptótikus alakja:

$$e^{2i\sigma_l} \sim \left(2kre^{i\Theta}\right)^{i\gamma}\left[e^{-ikre^{i\Theta}}\, 2ikre^{-i\Theta/2}\Psi_{l,\Theta}^{sc+}(k,r)\right.$$

$$\left. + \frac{e^{\gamma\pi/2}(-1)^l (i\gamma - l)_l}{\Gamma(l+1-i\gamma)}\right]$$

Numerikus eredmények

- Határfeltételek:

$$\psi^{sc+}_{l,\Theta}(k,0) = 0$$

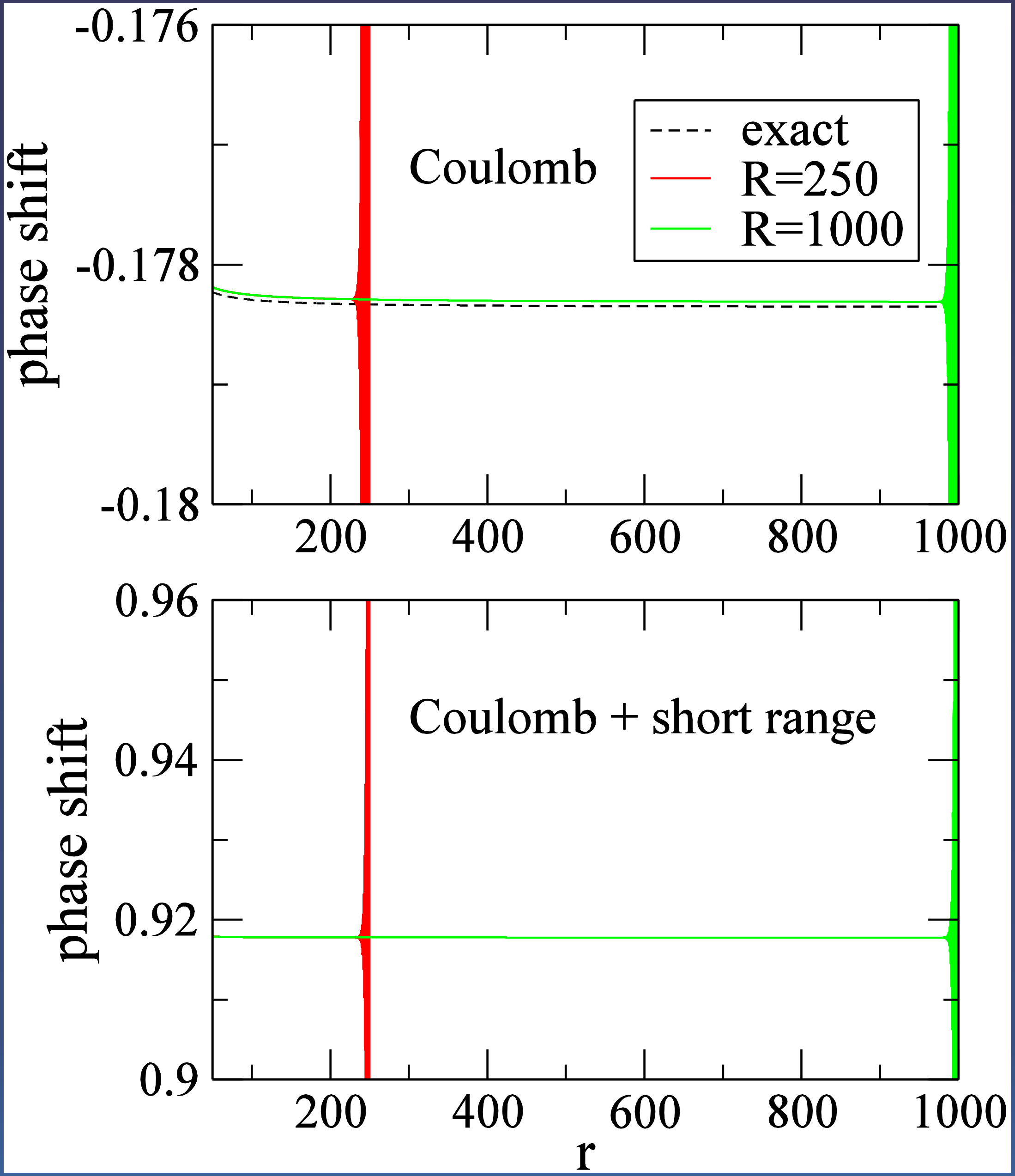
$$\lim_{r \longmapsto \infty} \psi^{sc+}_{l,\Theta}(k,r) = 0 \implies \psi^{sc+}_{l,\Theta}(k,R) = 0$$

ahol R tetszőlegesen nagy pozitív valós szám az asszimptótikus régióban.

- A „Végeselem-módszert" (Finite Element Method) használtuk.
- A rövid hatótávú potenciál

$$V_s(r) \equiv 7.5\, r^2 e^{-r}$$

volt.



-0.176
-0.178
-0.18
phase shift
Coulomb
exact
R=250
R=1000
200
400
600
800
1000
0.96
0.94
0.92
0.9
phase shift
Coulomb + short range
200
400
600
800
1000
r

2. Motiváció és Eredmény

- A Felületi integrál formalizmust alkalmazók körében nagyon népszerű a Coulomb módosított síkhullám (CDPW) Φ-ként való használata:

$$\Phi(\bar{k},\bar{r}) \equiv \tau^{(+)}(\bar{k},\bar{r}) \equiv e^{i\bar{k}\bar{r}}(kr-\bar{k}\bar{r})^{i\gamma}$$

- Eredmény:

Kéttest Coulomb szórás esetén komplex skálázási szempontból a CDPW használata nem vezet a szórási határfeltételek egyszerűsödéséhez!

3. Motiváció

- A Felületi integrál formalizmussal leírható két- és három-töltött részecskés rendszer is. Együtt tudja kezelni a rövid és hosszú hatótávú potenciálokat.
- Ebben a formalizmusban tehát központi szerepet játszik a

$$\tau^{(\pm)}(\bar{k},\bar{r}) \equiv e^{i\bar{k}\bar{r}}(kr \mp \bar{k}\bar{r})^{\pm i\gamma}$$

függvény ($\pm$ rendre a post és prior alak).

- Meghatározták a vezető rendű asszimptótikáját, ami disztribúcióként felírható egy bizonyos $D^{\pm}$ tesztfüggvény téren:

$$\tau^{(\pm)}(\bar{k},\bar{r}) \sim \mp \frac{2\pi}{ikr} e^{\mp ikr}(2kr)^{\pm i\gamma}\delta(\hat{r} \pm \hat{k})$$

- Ennek levezetése nem meggyőző!

3. Eredmény

- Parciális hullámok szintjén:

$$\tau_l^{(+)} = \frac{(-i\gamma)_l}{(1+i\gamma)_{l+1}} (2kr)^{i\gamma} e^{ikr} \times$$
$$\times\, {}_2F_2\left(\begin{matrix} 1+i\gamma\,, & 1+i\gamma \\ l+2+i\gamma\,, & 1+i\gamma-l \end{matrix} ; -2ikr \right)$$

- A post és prior alakra:

$$\tau_l^{(-)} = (-1)^l \tau_l^{(+)\,*}$$

- Ekvivalens kifejezések a numerikus számítások megkönnyítésére:

$$\tau_l^{(+)} = \frac{e^{ikr+\gamma\pi/2}}{2ikr}\sum_{n=0}^{l}\binom{l}{n}\frac{(l+1)_n}{n!}\gamma(1+i\gamma+n,2ikr)(-2ikr)^{-n}$$

$$\tau_l^{(+)} = (-1)^l(2kr)^{i\gamma}e^{ikr}\times$$
$$\times\sum_{n=0}^{l}\binom{l}{n}\frac{(-1)^n(l+1)_n}{(1+i\gamma)_{n+1}}\,{}_1F_1\left(\begin{matrix}1+i\gamma\\2+i\gamma+n\end{matrix};-2ikr\right)$$

$$\tau_l^{(+)} = \frac{e^{\gamma\pi/2}}{2ikr}\left[e^{ikr}\kappa_l^{+}(1+i\gamma,-2ikr)+e^{-ikr}\kappa_l^{-}(1+i\gamma,-2ikr)\right]$$

- Asszimptótikája:

$$\tau_l^{(+)} \sim \frac{e^{ikr}}{2ikr} e^{\frac{\gamma\pi}{2}} \Gamma(1+i\gamma)\, {}_3F_1\left(\begin{matrix} 1+i\gamma, & -l, & l+1 \\ & 1 & \end{matrix}; \frac{1}{2ikr}\right)$$
$$- \frac{e^{-ikr}}{2ikr} (2kr)^{i\gamma} (-1)^l \sum_{n=0}^{\infty} d_n^{(l)} \frac{1}{(-ikr)^n}$$

- A post és prior alak asszimptótikájára:

$$\lim_{r\to\infty} \tau_l^{(-)} = (-1)^l \left[\lim_{r\to\infty} \tau_l^{(+)}\right]^*$$

- A vezető rendű asszimptótika:

$$\tau^{(\pm)}(\bar{k},\bar{r}) \sim \pm \frac{2\pi}{ikr} [e^{\pm ikr + \frac{\gamma\pi}{2}} \Gamma(1 \pm i\gamma) \delta(\hat{r} \mp \hat{k})$$
$$- e^{\mp ikr} (2kr)^{\pm i\gamma} \delta(\hat{r} \pm \hat{k})]$$

- A $D^{\pm}$ tesztfüggvény téren megegyezik a fönti eredménnyel.

Matematikai Állítások

- **1. Tétel:** Legyen l nemnegatív egész, $z \in \mathbb{C}\setminus\{0\}$, $a \in \mathbb{C}\setminus\mathbb{Z}$, akkor a ${}_2F_2(a, a; a+l+1, a-l; z)$ ekvivalens a következőkkel

$$(-1)^l \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{n=0}^{l} \binom{l}{n} \frac{(-1)^n (l+1)_n}{(a)_{n+1}} \, {}_1F_1\left(\begin{matrix} a \\ a+n+1 \end{matrix}; z\right),$$

$$(-z)^{-a} \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \sum_{n=0}^{l} \binom{l}{n} \frac{(l+1)_n}{n!} \gamma(a+n, -z) z^{-n},$$

$$(-z)^{-a} \frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l} \left[\kappa_l^{+}(a,z) + e^z \kappa_l^{-}(a,z)\right],$$

ahol

$$\kappa_l^{+}(a,z) = \Gamma(a)\,{}_3F_1(a,-l,l+1;1;-1/z)$$

és

$$\kappa_l^{-}(a,z) = (-1)^{l+1}\sum_{n=0}^{l}\frac{(l+n)!}{n!\,(l-n)!}U(1-a,1-a-n;-z)(-z)^{-n}.$$

- 2. Tétel: Legyen l nemnegatív egész; $a, z \in \mathbb{C}$; $0 < Re[a] < l+2$, akkor a ${}_2F_2(a,a;a+l+1,a-l;z)$ függvény asszimptótikus alakja $|z| \to \infty$ esetén:

$$(-z)^{-a}\frac{(a)_{l+1}}{(1-a)_l}\kappa_l^{+}(a,z) +$$

$$+(-1)^l\frac{(a)_{l+1}(a)_l}{(1-a)_l}\frac{e^z}{z}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(1-a)_n}{(a-n)_l}\,{}_3F_2\left(\begin{matrix}-l, & -l, & -n\\ 1, & 1-a-l\end{matrix};1\right)z^{-n}.$$

- <u>3. Tétel:</u> Legyen l és n nemnegatív egész szám, $a \in \mathbb{C}$, $0 < Re[a] < l + 2$, akkor

$$d_n{}^{(l)} = \frac{(a)_l(1-a)_n}{(a-n)_l} {}_3F_2\left(\begin{matrix} -l, & -l, & -n \\ 1, & 1-a-l \end{matrix}; 1\right),$$

ahol $d_n{}^{(l)}$ a következő rekurziót elégíti ki

$$d_0{}^{(l)} = 1, \qquad d_1{}^{(l)} = \frac{1 - l^2 - l - a}{2},$$

$$\begin{aligned} 4(n+1)d_{n+1}{}^{(l)} &= \\ &= 2\left(2n^2 - n(2a-3) - l^2 - l - a + 1\right)d_n{}^{(l)} \\ &-n(n-l-a)(n+l+1-a)d_{n-1}{}^{(l)}. \end{aligned}$$

II. Hátralévő feladatok

- Háromtest szórás számításhoz „filter diagonalizációs” algoritmus.

- Alapfokú nyelvvizsga.

Köszönöm a figyelmet!