

POLITECHNIKA GDAŃSKA

RADOŚLAW SZMYTKOWSKI

**METODA R -MACIERZY
DLA RÓWNAŃ
SCHRÖDINGERA I DIRACA**

GDAŃSK 1999

SPIS TREŚCI

1	WSTĘP	5
2	NIERELATYWISTYCZNE ROZPRASZANIE POTENCJALNE. <i>R</i> -MACIERZ $\mathcal{R}_b(E, \rho)$ I JEJ ZWIĄZEK Z MACIERZĄ ROZPRASZANIA $U(E)$	13
3	TEORIA <i>R</i> -MACIERZY DLA RÓWNIANIA SCHRÖDINGERA	22
3.1	Operatory $\hat{B}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$	22
3.1.1	Wprowadzenie	22
3.1.2	Operator $\hat{B}(E)$	23
3.1.3	Operatory $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}(E)$	26
3.1.4	Związek pomiędzy operatorowym i macierzowym sformułowaniem teorii	27
3.2	Związek jąder całkowych $\mathcal{R}_b(E, \rho, \rho')$ i $\mathcal{B}(E, \rho, \rho')$ z funkcjami Greena	28
3.3	Konstrukcja operatora $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$: metoda Kapura–Peierlsa–Wignera	31
3.4	Konstrukcja zasad wariacyjnych związanych z nierelatywistyczną teorią <i>R</i> -macierzy	38
3.4.1	Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{B}(E)$	38
3.4.2	Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$	41
3.4.3	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$ i ich odwrotności	45
3.4.4	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{B}(E)$ i ich odwrotności	50
3.4.5	Zasady wariacyjne z więzami nałożonymi na funkcje próbne	55
4	RELATYWISTYCZNE ROZPRASZANIE POTENCJALNE. <i>R</i> -MACIERZE $\mathcal{R}_b^{(\pm)}(E, \rho)$ I ICH ZWIĄZEK Z MACIERZĄ ROZPRASZANIA $U(E)$	57
5	TEORIA <i>R</i> -MACIERZY DLA RÓWNIANIA DIRACA	64
5.1	Operatory $\hat{B}^{(\pm)}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$	64
5.1.1	Wprowadzenie	64
5.1.2	Operatory $\hat{B}^{(\pm)}(E)$	66
5.1.3	Operatory $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$	73
5.1.4	Związek pomiędzy operatorowym i macierzowym sformułowaniem teorii	76
5.2	Związek jąder całkowych $\mathcal{R}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$, $\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ i $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ z funkcjami Greena	79
5.3	Granica nierelatywistyczna	82
5.4	Konstrukcja operatorów $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$: metoda Kapura–Peierlsa–Wignera	84
5.5	Konstrukcja zasad wariacyjnych związanych z relatywistyczną teorią <i>R</i> -macierzy	95
5.5.1	Zasady wariacyjne dla wartości własnych operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$	95

5.5.2	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności	99
5.5.3	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności	104
5.5.4	Zasady wariacyjne z więzami nałożonymi na funkcje próbne	109
6	ZASTOSOWANIE FUNKCJI PRÓBNYCH TYPU RAYLEIGHA–RITZA W ZASADACH WARIACYJNYCH ZWIĄZANYCH Z METODĄ R-MACIERZY	111
6.1	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_6(E)$, $\hat{\mathcal{B}}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ oraz ich odwrotności	111
6.1.1	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}_6(E)$ i ich odwrotności	111
6.1.2	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ i ich odwrotności	116
6.1.3	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności	119
6.1.4	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności	120
6.2	Zastosowanie funkcji własnych operatorów $\hat{\mathcal{R}}(E)$, $\hat{\mathcal{B}}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ jako baz Rayleigha–Ritza w zasadach wariacyjnych dla elementów macierzowych tych operatorów	121
6.2.1	Zasada wariacyjna dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$	122
6.2.2	Zasada wariacyjna dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$	123
6.2.3	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$	124
6.2.4	Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$	125
6.3	Zasady wariacyjne dla wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}(E)$, $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$	126
6.3.1	Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$	126
6.3.2	Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$	131
6.3.3	Zasady wariacyjne dla wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$	135
7	ZAKOŃCZENIE	144
	UZUPEŁNIENIA	146
A	Funkcje delta Diraca	146
B	Dowód zupełności układów funkcji własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ dla zagadnień o symetrii sferycznej	146
C	Zależność wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ od energii	150
D	Pewne własności wyznaczników	153
	BIBLIOGRAFIA	155
	Streszczenie w języku polskim	163
	Streszczenie w języku angielskim	163

Rozdział 1

WSTĘP

Metoda R -macierzy należy do najbardziej rozpowszechnionych i efektywnych metod stosowanych do opisu teoretycznego nierelatywistycznych dwuciałowych procesów zderzeniowych w fizyce atomowej i jądrowej. Jej idea została zarysowana w roku 1938 przez Kapura i Peierlsa [1] w pracy poświęconej procesom rezonansowym towarzyszącym zderzeniom jąder atomowych przy niskich energiach. Wykorzystali oni fakt, że przestrzeń konfiguracyjną układu pocisk+tarcza można podzielić na dwie części. Obszar wewnętrzny (zwany także obszarem lub hiperobjętością reakcji) odpowiada sytuacji, w której wszystkie składniki układu znajdują się wewnątrz niewielkiej, skończonej objętości w trójwymiarowej przestrzeni fizycznej i oddziałują ze sobą silnie, tworząc jądro złożone. Obszar zewnętrzny, odseparowany od obszaru wewnętrznego hiperpowierzchnią reakcji, odpowiada sytuacji, w której układ podzielony jest na części bądź swobodne, bądź też oddziałujące za pośrednictwem długozasięgowych sił o charakterze lokalnym. Autorzy pracy [1] udowodnili, że macierz rozpraszania, a w konsekwencji także przekroje czynne charakteryzujące proces zderzenia, można znaleźć, jeżeli dana jest baza ortogonalna w przestrzeni funkcji określonych na hiperpowierzchni reakcji i jeśli znana jest macierz kwadratowa, zwana w obecnej terminologii R -macierzą Kapura–Peierlsa. Macierz ta wiąże w szczególny sposób składowe funkcji falowej w zadanej bazie ze składowymi pochodnej normalnej tej funkcji na powierzchni reakcji. Kapur i Peierls pokazali, że R -macierz jest zbudowana z elementów macierzowych operatora Greena dla niehermitowskiego zagadnienia własnego, na które składają się: niezależne od czasu równanie Schrödingera dla układu w obszarze wewnętrznym oraz niehermitowski, zależny od energii, mieszany warunek brzegowy narzucony na rozwiązania tego równania na hiperpowierzchni reakcji. Rolę wartości własnej zagadnienia pełni parametr energii w równaniu Schrödingera. Kapur i Peierls otrzymali wyrażenie dla R -macierzy, znajdując rozwinięcie spektralne funkcji Greena w bazie funkcji własnych rozpatrywanego zagadnienia brzegowego i zagadnienia sprzężonego do niego w sposób hermitowski.

W serii prac opublikowanych w latach 1946–52 Wigner ze współpracownikami [2–5] zmodyfikował i udoskonalił metodę Kapura–Peierlsa, tworząc podstawy pod najbardziej dziś popularną wersję metody R -macierzy związaną z jego nazwiskiem. Pomysł Wignera polegał na zdefiniowaniu R -macierzy w taki sposób, aby jej wyrazy były elementami macierzowymi operatora Greena dla zagadnienia własnego składającego się z równania Schrödingera, spełnianego wewnątrz obszaru reakcji, uzupełnionego przez niezależny od energii hermitowski warunek brzegowy narzucony na rozwiązania równania na hiperpowierzchni otaczającej ten obszar. Zaletą podejścia Wignera jest hermitowskość R -macierzy oraz znacznie prostsza niż w metodzie Kapura–Peierlsa zależność jej elementów od energii. Publikacje Wi-

gnera oraz późniejsze prace przeglądowe Lane'a i Thomasa [6], Breita [7] i Vogta [8] rozpropagowały metodę R -macierzy i sprawiły, że w latach pięćdziesiątych i sześćdziesiątych naszego stulecia stała się ona jednym z najczęściej używanych narzędzi dla parametryzacji i analizy danych doświadczalnych w fizyce reakcji jądrowych przy niskich energiach [6, 7].

W drugiej połowie lat sześćdziesiątych zainteresowanie metodą R -macierzy w środowisku fizyków jądrowych zaczęło maleć, lecz pod koniec tej dekady pojawiły się sugestie, że metoda ta może stanowić doskonałe narzędzie dla potrzeb fizyki atomowej [9]. Za przełomowy należy uznać rok 1971, kiedy Burke, Hibbert i Robb [10] zaadaptowali metodę Wignera do teorii zderzeń elektron–atom. Wkrótce potem kierowany przez Burke'a zespół z Belfastu opublikował pakiet programów komputerowych, implementujących metodę Wignera dla procesów atomowych [11]. Kolejne wersje tego pakietu [12–14] były i są szeroko stosowane dla przeprowadzania obliczeń parametrów charakteryzujących procesy z udziałem elektronów, atomów i jonów atomowych. Począwszy od połowy lat siedemdziesiątych, metoda R -macierzy Wignera jest również intensywnie wykorzystywana w teorii zderzeń elektronów z układami cząsteczkowymi (patrz, na przykład, [15]).

Trudno jest przecenić rolę, jaką w fizyce teoretycznej odgrywają metody wykorzystujące rachunek wariacyjny. Dlatego naturalne jest postawienie pytania: czy możliwe jest zastosowanie rachunku wariacyjnego w teorii R -macierzy? Odpowiedź jest twierdząca. W jednej z pierwszych prac dotyczących wariacyjnych metod kwantowej teorii zderzeń Kohn [16] podał zasadę wariacyjną, którą później Lane i Thomas [6] zidentyfikowali jako zasadę wariacyjną dla odwrotności wartości własnych R -macierzy. W roku 1951 Jackson [17] sformułował zasadę wariacyjną dla elementów R -macierzy. Znaczenie prac Kohna oraz Jacksona zostało docenione dopiero na przełomie lat sześćdziesiątych i siedemdziesiątych przez Lane'a i Robsona [18] oraz przez Chatwina i Purcella [19, 20]. Dalszy rozwój metod wariacyjnych w teorii R -macierzy, z nielicznymi wyjątkami [21–24], związany był przede wszystkim z zastosowaniami teorii w fizyce atomowej. W roku 1973 Oberoi i Nesbet [25, 26] zaproponowali zasadę wariacyjną dla elementów R -macierzy, ogólniejszą od zasady Jacksona. Dwa lata później Zvijac, Heller i Light [27] pokazali, w jaki sposób można wykorzystać zasadę Kohna do poprawienia wyników otrzymywanych w oparciu o zastosowanie metody Wignera. W roku 1977 Shimamura [28] uogólnił zasadę Jacksona do postaci umożliwiającej zastosowanie szerszej klasy funkcji próbnych, a Crawford [29], prezentując ogólną metodę konstrukcji zasad wariacyjnych kwantowej teorii zderzeń, przedstawił również dyskusję niektórych zasad związanych z metodą R -macierzy. Przegląd zastosowań technik wariacyjnych w metodzie R -macierzy w okresie od opublikowania pracy Kohna [16] do końca dekady lat siedemdziesiątych zawarty jest w monografii Nesbeta [30] poświęconej wariacyjnym metodom w teorii zderzeń elektron–atom. Znaczenie metod wariacyjnych w teorii R -macierzy wzrosło w pierwszej połowie lat osiemdziesiątych po ukazaniu się prac Greene'a [31, 32] oraz Le Rouzo i Raşeeva [33–35], w których wskazano, że wariacyjna metoda R -macierzy, oparta o zasadę Kohna, może być z powodzeniem wykorzystywana w teoretycznych badaniach procesów fotojonizacji atomów i cząsteczek. Omówieniu zastosowań wariacyjnej me-

tody R -macierzy do opisu fotoabsorpcji i fotojonizacji atomów poświęcony jest niedawny obszerny artykuł przeglądowy Aymar, Greene'a i Luc-Koenig [36]. Hamacher i Hinze [37, 38], a następnie również Meyer, Greene i Bray [39], pokazali, że metoda Kohna może być wykorzystana do opisu zderzeń elektronów z atomami i jonami atomowymi. Różne zasady wariacyjne związane z metodą R -macierzy były dyskutowane w kontekście fizyki atomowej lub chemii kwantowej także przez Alticka [40], Manolopoulou, D'Mello i Wyatta [41, 42], Meyera [43] oraz Lighta i współpracowników [44, 45]. Nesbet [23, 24, 46] przedstawił zasady wariacyjne dla elementów R -macierzy i jej odwrotności, różniące się istotnie od innych zasad, i przedyskutował możliwości zastosowania ich w fizyce ciała stałego oraz do opisu zderzeń elektronów z cząsteczkami.

Czytelnik, który zapozna się z pracami dotyczącymi wariacyjnych metod w teorii R -macierzy stwierdzi, że w tematyce, której prace te dotyczą panuje chaos. Poszczególne zasady wariacyjne podane na przestrzeni ostatnich pięćdziesięciu lat były znajdowane przy zastosowaniu szerokiego wachlarza metod *ad hoc*. Jedynie Crawford [29] w roku 1977 pokazał, w jaki sposób można otrzymać zasadę wariacyjną dla elementów R -macierzy, startując z bardzo ogólnego funkcjonału, a Rau [47] w roku 1983 oraz Raşev [35] w roku 1985 zauważyli, że zasadę wariacyjną Kohna dla odwrotności wartości własnych R -macierzy można wyprowadzić, posługując się ogólną procedurą konstrukcji zasad wariacyjnych przedstawioną w przeglądowej pracy Gerjuoya, Rau i Sprucha [48]. Zarówno praca Crawforda, jak i uwagi Rau oraz Raşeva, przeszły jednak bez echa.

Chociaż zdecydowana większość z opublikowanych dotychczas prac dotyczyła zastosowań metody R -macierzy do badania układów opisywanych równaniem Schrödingera, ukazała się także pewna liczba artykułów poświęconych metodzie R -macierzy dla równania Diraca. Już w roku 1948 Goertzel [49] uogólnił wyniki Wignera na przypadek rozpraszania relatywistycznej cząstki o spinie $\frac{1}{2}$. Ponieważ w reakcjach jądrowych zachodzących przy niskich energiach efekty relatywistyczne nie odgrywają znaczącej roli, w kontekście fizyki zderzeń jądrowych kolejne dwie prace poświęcone teorii R -macierzy dla równania Diraca zostały opublikowane przez Rosenthala [50] i Haldersona [51] dopiero w drugiej połowie lat osiemdziesiątych. Przydatność metody R -macierzy w nierelatywistycznej fizyce atomowej, a także wzrost zainteresowania efektami relatywistycznymi towarzyszącymi zderzeniom elektronów z ciężkimi atomami i jonami oraz fotojonizacji tych tarcz, skłoniły w połowie lat siedemdziesiątych Changa [52–54] do uogólnienia wyników Burke'a, Hibberta i Robba [10] na przypadek wieloelektronowego hamiltonianu Diraca–Coulomba.^{1A} Napisany przez Changa pakiet programów komputerowych JJMTRX, implementujący relatywistyczną metodę R -macierzy Wignera, jest systematycznie udoskonalany i wykorzystywany przez Granta, Norringtona i współpracowników [55–66]. Na początku lat dziewięćdziesiątych Thumm i Norcross [67–70] opublikowali serię prac, w których zastosowali relatywistyczną metodę R -macierzy Wignera do opisu rozpraszania powolnych elektronów na atomach cezu. W tym samym czasie, Hamacher i Hinze [71] podali zasadę wariacyjną dla odwrotności wartości

^{1A} Przygotowując prace [52–54], Chang nie znał artykułu Goertzela [49].

własnych relatywistycznej R -macierzy, analogiczną do zasady wariacyjnej Kohna [16].

Użyteczność metody R -macierzy wykracza poza fizykę kwantową, o czym świadczą jej zastosowania w akustyce [72–74].

W okresie sześćdziesięciu lat od chwili swojego powstania, metoda R -macierzy doczekała się kilkunastu obszernych omówień i prac przeglądowych. Pierwsze znane autorowi omówienia metody R -macierzy Wignera zawarte są w opublikowanych w pierwszej połowie lat pięćdziesiątych monografiach Blatta i Weisskopfa [75] oraz Sachsa [76]. Bardziej wyczerpująca prezentacja stanu teorii została dokonana przez Blocha [77] w cyklu wykładów wygłoszonych w CEN–Saclay w latach 1955–56. Materiały z tych wykładów zostały jednak udostępnione szerszemu gronu fizyków dopiero w roku 1975, po przedrukowaniu ich w zbiorze prac Blocha [78]. W roku 1958 Lane i Thomas [6], a wkrótce również Breit [7], Brown [79] i Vogt [8, 80], opublikowali obszerne prace dotyczące teorii R -macierzy Wignera [6–8, 80] i Kapura–Peierlsa [79] oraz ich zastosowaniom w fizyce jądrowej. W latach sześćdziesiątych teoria R -macierzy stała się już na tyle znana, że jej omówienie znalazło się w poświęconej kwantowej teorii zderzeń książce Wu i Ohmury [81], a także w dotyczących teorii jądra atomowego i reakcji jądrowych monografiach Prestona [82], Lynna [83] oraz Mahaux i Weidenmüllera [84]. Do pewnego stopnia przeglądowy charakter miały również, opublikowane w drugiej połowie lat sześćdziesiątych, dwie prace Lane’a i Robsona [85, 86]. Zdecydowana większość prac przeglądowych opublikowanych po roku 1970 dotyczyła natomiast zastosowań metody R -macierzy w teorii zderzeń elektronów z atomami i cząsteczkami [28, 87–109]. Znaczna część z tych publikacji wyszła spod pióra Burke’a i jego współpracowników [87–89, 93, 96–99, 102, 107, 109]. Z prac nie poświęconych zderzeniom elektronowym, wspomnieć należy, opublikowany w roku 1983, obszerny artykuł Barretta, Robsona i Tobocmana [110], prezentujący postęp, jaki dokonał się w zakresie rozwoju i zastosowań metody R -macierzy w fizyce zderzeń jądrowych w okresie po opublikowaniu prac [6, 7], a także publikację Greena [111] oraz stosunkowo niedawny artykuł przeglądowy Aymar, Greene’a i Luc-Koenig [36] omawiające zastosowania wariacyjnej metody R -macierzy do opisu fotoabsorpcji i fotojonizacji atomów. Dyskusji teorii R -macierzy dla rozpraszania potencjalnego poświęcony jest także jeden z podrozdziałów wydanej niedawno książki Burke’a i Joachaina [112].

Powyższą listę uzupełnić należy o książkę *Atomic and Molecular Processes: an R -matrix Approach* [113], wydaną w roku 1993 pod redakcją Burke’a i Berringtona. Zawiera ona krótką prezentację teorii R -macierzy i jej zastosowań w fizyce atomowej, omówienie programów komputerowych implementujących metodę, przedruk 27 najistotniejszych artykułów oraz bibliografię obejmującą lata 1938–93 i wymieniającą 547 pozycji.

Biorąc pod uwagę popularność i praktyczne znaczenie metody R -macierzy, za do pewnego stopnia zaskakujący należy uznać fakt, że prócz wspomnianych książek Wu i Ohmury [81] oraz Burke’a i Joachaina [112], poświęcone kwantowej teorii zderzeń klasyczne dzieła Goldbergera i Watsona [114], Joachaina [115] czy Newtona [116], a także książki Rodberga i Thallera [117] oraz Sitenki [118], poza co najwyżej

krótkimi wzmiankami, nie poświęcają metodzie uwagi.

Na ile autorowi wiadomo, jedynymi publikacjami dostępnymi do tej pory w języku polskim i omawiającymi podstawy metody R -macierzy są tłumaczenia książek Sachsa [76] i Dawydowa [119].

Olbrzymia liczba prac, zarówno oryginalnych, jak i przeglądowych, dotyczących teorii R -macierzy i jej zastosowań mogłaby sugerować, iż metoda ta jest już dobrze opracowana pod względem matematycznym i że wszelkie próby uściślenia jej, czy też sformalizowania, będą należały do kategorii zadań czysto matematycznych, nie posiadających poważniejszych konsekwencji dla zastosowań teorii w praktyce. Rudolf Peierls, współtwórca metody R -macierzy, dał wyraz przekonaniu o tym pisząc w roku 1991 w swojej książce *More Surprises in Theoretical Physics* [120]: "... approaches ... by Kapur and Peierls (1938) ... and by Wigner and Eisenbud (1947) ... bring no particular surprises". Zdanie Peierlsa wydaje się podzielać zdecydowana większość fizyków stosujących metodę R -macierzy.

W kontekście tytułu książki Peierlsa oraz roli, jaką odegrał jej autor w stworzeniu i rozwoju metody R -macierzy, za ironię losu należy uznać fakt, że metoda kryła jednak w sobie niespodziankę. Pierwszą wskazówkę, że sformułowanie metody R -macierzy nie jest dopracowane pod względem matematycznym zawierała wspomniana już praca Rosenthala [50] z roku 1987. Jej autor zwrócił uwagę, że podane przez Goertzela [49] relatywistyczne uogólnienie metody R -macierzy Wignera musi zawierać błąd, gdyż jest wewnętrznie sprzeczne. Rosenthal zaryzykował stwierdzenie, że nie jest w ogóle możliwe sformułowanie metody R -macierzy Wignera dla równania Diraca. Nie odwołując się jawnie do pracy Rosenthala, z tezą tą w roku 1988 polemizował Halderson [51]. Jego rozważania były jednak nieścisłe, miejscami wręcz niepoprawne, nie stanowiły więc dowodu możliwości sformułowania metody R -macierzy dla równania Diraca.

Zawartą w publikacji Rosenthala [50] krytykę artykułu Goertzela [49] można w jednakowym stopniu odnieść do pracy Changą [52], gdyż wyniki zawarte w pracach [49, 52] są podobne. Artykuł Rosenthala nie został jednak zauważony w środowisku fizyków zajmujących się zastosowaniami relatywistycznej metody R -macierzy w fizyce atomowej.

W roku 1994 autor rozprawy rozpoczął prace mające doprowadzić do powstania pakietu programów komputerowych BEATRIX implementujących, sformułowaną wcześniej przez Hamachera i Hinzego [71], relatywistyczną wariacyjną metodę R -macierzy. Pakiet BEATRIX ma służyć jako narzędzie do przeprowadzania numerycznych obliczeń wielkości charakteryzujących procesy towarzyszące zderzeniom powolnych elektronów z ciężkimi atomami i jonami atomowymi. Nie znając pracy Rosenthala [50] i będąc pod wrażeniem artykułów przeglądowych [6, 7, 89] oraz książki [113], autor nie spodziewał się napotkać na jakiegokolwiek trudności matematyczne w trakcie planowanych prac. Jednakże już wstępna analiza artykułów Goertzela [49] i Changą [52] ujawniła istnienie tej samej wewnętrznej sprzeczności zamieszczonych w nich wyników, na którą w przypadku pracy Goertzela zwrócił wcześniej uwagę Rosenthal. Kierując się przekonaniem, że przyczyna sprzeczności musi leżeć w błędzie popełnionym niezależnie przez Goertzela i przez Changą, nie zaś w niemożliwości sformułowania metody R -macierzy Wi-

gnera dla równania Diraca, autor podjął szczegółowe studia nad metodą. Prace te zostały uwieńczone częściowym sukcesem — w roku 1995 autorowi udało się zidentyfikować błąd popełniony przez Goertzela i Changa oraz przedstawić matematycznie poprawne sformułowanie metody R -macierzy Wignera dla równania Diraca w przypadku objętości reakcji o symetrii kulistej. Prezentacji otrzymanych wyników poświęcone były dwa artykuły [121, 122], napisane wspólnie z Profesorem Jürgenem Hinze z Uniwersytetu w Bielefeld (Niemcy). Prace te pozostawiały jednak w dalszym ciągu otwartą kwestię sformułowania metody R -macierzy Wignera dla równania Diraca w przypadku objętości reakcji o dowolnym kształcie.

Krytyczna analiza treści najważniejszych prac poświęconych metodzie R -macierzy oraz przekonania autora odnośnie kryteriów, jakie powinny spełniać metody stosowane w fizyce teoretycznej, doprowadziły go do wniosku, że uporządkowanie teorii, warunkujące jej dalszy rozwój, nie będzie możliwe bez uprzedniego sformułowania jej podstaw. Wskazówki, co do kierunku, w którym powinna postępować unifikacja, zawierały dwie prace Nesbeta [23, 24] opublikowane w latach osiemdziesiątych. Ich autor zwrócił uwagę, że skoro (dla potencjałów lokalnych) równanie Schrödingera w przestrzeni konfiguracyjnej jest równaniem różniczkowym cząstkowym, R -macierz należałoby zastąpić operatorem całkowym zdefiniowanym na zbiorze funkcji określonych na powierzchni reakcji. Przejście od teorii operatorowej do teorii macierzowej wymaga jedynie wyboru bazy na powierzchni reakcji oraz obliczenia w tej bazie elementów macierzowych odpowiednich operatorów. Sformułowanie operatorowe ma tę przewagę nad macierzowym, iż jest niezależne od wyboru bazy i od kształtu powierzchni reakcji.

Zadaniem, które w zaistniałej sytuacji autor rozprawy postawił sobie za cel, było sformułowanie metody R -macierzy dla rozpraszania potencjalnego w języku teorii operatorów całkowych, a następnie wykorzystanie tego sformułowania do uporządkowania i uzupełnienia metody. Wyniki otrzymane podczas realizacji tego zadania zostały opublikowane w trzech artykułach [123–125]. Operatorowe sformułowanie metody R -macierzy Wignera dla równań Schrödingera i Diraca dla objętości reakcji o dowolnym kształcie zaprezentowano w chronologicznie ostatniej pracy [125]. Praca ta zamyka cykl, w skład którego wchodzi także wcześniejsze artykuły [121, 122]. Publikacje [123, 124] są natomiast poświęcone zastosowaniu operatorowego sformułowania teorii R -macierzy, w połączeniu z jednolitą metodą konstrukcji zasad wariacyjnych opisaną przez Gerjuoya, Rau i Sprucha [48] (patrz również [126, 127]), do wyprowadzenia sześciu (w tym dwóch nowych) zasad wariacyjnych związanych z metodą R -macierzy dla równania Schrödingera oraz dziesięciu (w tym dziewięciu nowych) zasad wariacyjnych związanych z metodą R -macierzy dla równania Diraca, a także wykorzystaniu w tych zasadach liniowych funkcji próbných typu Rayleigha–Ritza, niezwykle popularnych w fizyce teoretycznej, chemii kwantowej oraz technicznych zastosowaniach matematyki.

Rozprawa oparta jest w dużym stopniu na serii wymienionych wyżej prac autora [121–125], nie stanowi jednakże tylko kompilacji ich zawartości. Część wyników prezentowanych w rozprawie została otrzymana podczas jej przygotowywania i nie była do tej pory publikowana. Dotyczy to w szczególności treści podrozdziałów 3.2, 5.2 i 6.2, fragmentów podrozdziałów 3.3, 5.1, 5.4 i 6.1 oraz dużej

części podrozdziału 6.3.

W rozprawie można wyróżnić trzy zasadnicze części. Część pierwsza obejmuje rozdziały 2 i 3 poświęcone metodzie R -macierzy dla równania Schrödingera. W rozdziale 2 pokazano związek R -macierzy $R_b(E, \rho)$ z macierzą zderzeniową $U(E)$ dla przypadku rozpraszania na potencjale znikającym poza kulą o skończonym promieniu ρ . Rozdział 3 poświęcony jest ogólnej teorii R -macierzy dla równania Schrödingera, sformułowanej w języku teorii operatorów całkowych dla skończonej objętości o dowolnym kształcie. W podrozdziale 3.1 zdefiniowano i omówiono własności operatora pochodnej logarytmicznej $\hat{B}(E)$, odwrotnego do niego operatora $\hat{R}(E)$ oraz operatora $\hat{R}_\delta(E)$ odwrotnego do operatora $\hat{B}(E) - \hat{b}(E)$, gdzie $\hat{b}(E)$ jest dowolnym operatorem hermitowskim. Przedyskutowano zagadnienia własne dla operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{R}(E)$, znaleziono rozwinięcia spektralne ich jąder całkowych, a także omówiono związek pomiędzy operatorowym i macierzowym sformułowaniem teorii R -macierzy, pokazując, że R -macierz jest reprezentacją operatora $\hat{R}_\delta(E)$ w ortogonalnej bazie funkcji określonych na powierzchni reakcji. Podrozdział 3.2 omawia związki pomiędzy jądrami całkowymi operatorów $\hat{R}_\delta(E)$ i $\hat{B}(E)$ oraz funkcjami Greena pewnych zagadnień brzegowych. W następnym podrozdziale przedstawiono zastosowanie metody Kapura–Peierlsa–Wignera do skonstruowania jądra całkowego operatora $\hat{R}_\delta(E)$. Kończący tę część rozprawy podrozdział 3.4 poświęcony jest systematycznej konstrukcji zasad wariacyjnych dla wartości własnych operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{R}(E)$, dla elementów macierzowych operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{R}_\delta(E)$ oraz dla odwrotności tych elementów.

Druga część pracy składa się z rozdziałów 4 i 5, prezentujących metodę R -macierzy dla równania Diraca. Jej struktura jest podobna do struktury części pierwszej. Rozdział 4 wprowadza dwie R -macierze $R_b^{(\pm)}(E, \rho)$ i omawia ich związek z macierzą rozpraszania $U(E)$ dla relatywistycznego odpowiednika przypadku dyskutowanego w rozdziale 2. Rozdział 5 prezentuje ogólną operatorową teorię R -macierzy dla równania Diraca dla dowolnej skończonej objętości reakcji. Podrozdział 5.1 zawiera definicje oraz dyskusję własności operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$, $\hat{R}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_\delta^{(\pm)}(E)$, będących odpowiednikami operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}(E)$ oraz $\hat{R}_\delta(E)$ występujących w teorii nierelatywistycznej. W szczególności, omówiono zagadnienia własne dla operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}^{(\pm)}(E)$ oraz skonstruowano rozwinięcia spektralne ich jąder całkowych. Przedyskutowano też związek pomiędzy operatorowym sformułowaniem metody a szczególnym przypadkiem macierzowym rozważonym w rozdziale 4. W podrozdziale 5.2 pokazano, że jądra operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_\delta^{(\pm)}(E)$ są blisko związane z macierzami Greena pewnych zagadnień brzegowych dla równania Diraca. Kolejny podrozdział poświęcono dyskusji granicy nierelatywistycznej głównych wyników otrzymanych w podrozdziale 5.1. Celem podrozdziału 5.4 jest przedstawienie metody konstrukcji operatora $\hat{R}_\delta^{(\pm)}(E)$, będącej uogólnieniem metody Kapura–Peierlsa–Wignera stosowanej w teorii nierelatywistycznej, a podrozdział 5.5 zawiera szczegółowe omówienie metod konstrukcji zasad wariacyjnych dla wartości własnych operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}^{(\pm)}(E)$, dla elementów macierzowych operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_\delta^{(\pm)}(E)$ oraz dla odwrotności tych elementów.

Część trzecią rozprawy stanowi rozdział 6, w którym pokazano, w jaki sposób

można użyć liniowe funkcje próbne typu Rayleigha–Ritza w zasadach wariacyjnych skonstruowanych w podrozdziałach 3.4 i 5.5, w celu aproksymowania wartości własnych operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}(E)$, $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}^{(\pm)}(E)$, elementów macierzowych operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}_{\mathfrak{h}}(E)$, $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_{\mathfrak{h}}^{(\pm)}(E)$, a także jąder całkowych tych operatorów.

Rozprawę kończy rozdział 7, zawierający podsumowanie przedstawionych w niej wyników, oraz następujące po nim cztery uzupełnienia.

Zanim Czytelnik zapozna się szczegółowo z treścią rozprawy, autor czuje się zobowiązany do wyjaśnienia, że, w zamierzeniu, poziom ścisłości matematycznej zawartych w rozprawie rozważań odpowiada standardowi narzuconemu przez klasyczne dzieło Morse’a i Feshbacha *Methods of Theoretical Physics* [128].

Rozdział 2

NIERELATYWISTYCZNE ROZPRASZANIE POTENCJALNE. R -MACIERZ $R_b(E, \rho)$ I JEJ ZWIĄZEK Z MACIERZĄ ROZPRASZANIA $U(E)$

Rozważmy stacjonarny proces, w którym nierelatywistyczne bezspinowe cząstki o masie m i energii $E > 0$ ulegają sprężystemu rozproszeniu w polu siły o potencjale \hat{V} . Proces można opisać niezależnym od czasu równaniem Schrödingera

$$[\hat{H} - E]\Psi(E, \mathbf{r}) = 0, \quad (2.1)$$

w którym $\Psi(E, \mathbf{r})$ jest funkcją falową cząstki, zaś \hat{H} jest hamiltonianem Schrödingera

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}. \quad (2.2)$$

Będziemy zakładali, że operator potencjału \hat{V} może być nielokalny i że jest hermitowski, to znaczy jego jądro całkowe $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ posiada własność

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Podzielimy przestrzeń fizyczną na dwie części rozgraniczone fikcyjną powierzchnią sferyczną \mathcal{S}_ρ o promieniu ρ i środku w punkcie O , stanowiącym początek sferycznego układu współrzędnych (r, θ, φ) . Kulę otoczoną sferą \mathcal{S}_ρ oznaczymy przez \mathcal{V}_ρ . W dalszym ciągu rozważań ograniczymy się do rozpatrywania tylko takich jąder $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, które można przedstawić w postaci

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r})\Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r}'), \quad (2.4)$$

gdzie $\Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r})$ oznacza trójwymiarową funkcję Heaviside'a zdefiniowaną przez

$$\Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{dla } \mathbf{r} \in \mathcal{V}_\rho \\ 0 & \text{dla } \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho. \end{cases} \quad (2.5)$$

Założenie (2.4) odnośnie postaci dopuszczalnych potencjałów \hat{V} implikuje, że

$$\hat{V}\Psi(E, \mathbf{r}) = \Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r}) \int_{\mathcal{V}_\rho} d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi(E, \mathbf{r}'). \quad (2.6)$$

Oddziaływanie cząstki z polem jest więc ograniczone do objętości \mathcal{V}_ρ , a w obszarze położonym na zewnątrz \mathcal{V}_ρ cząstka jest swobodna.

Rozpatrzmy teraz równanie Schrödingera (2.1) "obcięte" do obszaru $\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E \right] \Phi(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \quad (2.7)$$

Równanie (2.7) ma rozwiązania szczególne postaci^{2A}

$$\Phi_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \frac{1}{r} P_l^{\text{in}}(E, r) i^l Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.8)$$

$$\Phi_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \frac{1}{r} P_l^{\text{out}}(E, r) i^l Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.9)$$

gdzie $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$,

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (2.10)$$

jest prędkością cząstki w obszarze $\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho$, funkcje $\{Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})\}$, z indeksami l oraz m_l mogącymi przyjmować odpowiednio wartości $l = 0, 1, 2, \dots$ oraz $m_l = -l, -l + 1, \dots, +l$, są znormalizowanymi harmonikami sferycznymi zdefiniowanymi zgodnie z konwencją fazową Condon'a i Shortley'a [130, 131], natomiast funkcje $\{P_l^{\text{in/out}}(E, r)\}$ są rozwiązaniami radialnego równania Schrödingera

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - E \right] P_l^{\text{in/out}}(E, r) = 0 \quad (r \geq \rho) \quad (2.11)$$

o postaciach asymptotycznych

$$P_l^{\text{in}}(E, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp \left[-i \left(kr - \frac{1}{2} \pi l \right) \right], \quad (2.12)$$

$$P_l^{\text{out}}(E, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp \left[+i \left(kr - \frac{1}{2} \pi l \right) \right], \quad (2.13)$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (2.14)$$

Z równań (2.11)–(2.13) wynika, że funkcje $\{P_l^{\text{in}}(E, r)\}$ i $\{P_l^{\text{out}}(E, r)\}$ są wzajemnie sprzężone

$$[P_l^{\text{in/out}}(E, r)]^* = P_l^{\text{out/in}}(E, r). \quad (2.15)$$

Ponieważ wyznacznik Wrońskiego rozwiązań radialnego równania Schrödingera (2.11) nie zależy od r , z postaci asymptotycznych funkcji $\{P_l^{\text{in/out}}(E, r)\}$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} & W [P_l^{\text{in}}(E, r); P_l^{\text{out}}(E, r)] \\ & \equiv P_l^{\text{in}}(E, r) \frac{dP_l^{\text{out}}(E, r)}{dr} - P_l^{\text{out}}(E, r) \frac{dP_l^{\text{in}}(E, r)}{dr} = 2ik. \end{aligned} \quad (2.16)$$

^{2A} Czynniki fazowy i^l wyodrębniliśmy, gdyż funkcja $i^l Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})$ posiada pożądaną własność transformacyjną ze względu na odwrócenie czasu

$$\hat{T} [i^l Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})] = (-)^{l-m_l} [i^l Y_{l, -m_l}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (2A.1)$$

(\hat{T} — operator odwrócenia czasu, który w przypadku funkcji skalarnych jest operatorem sprzężenia zespolonego, $\hat{T} = \hat{K}$). Korzyści wynikające ze stosowania funkcji własnych operatorów momentu pędu o takich własnościach transformacyjnych omawia Huby [129].

Funkcje $\{P_l^{\text{in/out}}(E, r)\}$ są w prosty sposób związane ze sferycznymi funkcjami Riccati–Hankela [132, 133]

$$P_l^{\text{in}}(E, r) = -i\hat{h}_l^{(2)}(kr), \quad P_l^{\text{out}}(E, r) = +i\hat{h}_l^{(1)}(kr). \quad (2.17)$$

Czynnik $1/\sqrt{v}$ pojawiający się w definicjach (2.8) i (2.9) zapewnia, że funkcje $\{\Phi_{lm_l}^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r})\}$ są unormowane do jednostkowego prądu prawdopodobieństwa przechodzącego przez *dowolną* powierzchnię zamkniętą otaczającą kulę \mathcal{V}_ρ . Rzeczywiście, korzystając z definicji wektora gęstości prądu prawdopodobieństwa

$$\mathbf{j}(E, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2im} [\Phi^*(E, \mathbf{r}) \nabla \Phi(E, \mathbf{r}) - \Phi(E, \mathbf{r}) \nabla \Phi^*(E, \mathbf{r})] \quad (2.18)$$

oraz z definicji funkcji $\{\Phi_{lm_l}^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r})\}$, mamy

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{lm_l}^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2imv} |Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})|^2 W[r^{-1} P_l^{\text{out/in}}(E, r); r^{-1} P_l^{\text{in/out}}(E, r)], \quad (2.19)$$

skąd, po uwzględnieniu równania (2.16), otrzymujemy

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) = -\frac{1}{r^2} |Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})|^2, \quad \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) = +\frac{1}{r^2} |Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})|^2. \quad (2.20)$$

W konsekwencji, dla całkowitych prądów prawdopodobieństwa odpowiadających funkcjom $\{\Phi_{lm_l}^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r})\}$ i przepływających przez sferę o środku w początku układu współrzędnych i o promieniu $r \geq \rho$ dostajemy

$$J_{lm_l}^{\text{in}}(E, r) = \int_{4\pi} d^2 \hat{\mathbf{r}} r^2 \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) = -1, \quad (2.21)$$

$$J_{lm_l}^{\text{out}}(E, r) = \int_{4\pi} d^2 \hat{\mathbf{r}} r^2 \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) = +1. \quad (2.22)$$

Biorąc za punkt wyjścia równanie Schrödingera (2.7), w standardowy sposób można pokazać, że

$$\text{div } \mathbf{j}_{lm_l}^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r}) = 0. \quad (2.23)$$

Całkując to równanie po objętości ograniczonej z jednej strony sferą o środku w początku układu współrzędnych i o promieniu $r \geq \rho$, z drugiej zaś dowolną inną powierzchnią otaczającą obszar \mathcal{V}_ρ , po zastosowaniu twierdzenia całkowego Gaussa oraz po uwzględnieniu równań (2.21) i (2.22) otrzymujemy, że całkowity prąd przechodzący przez dowolną powierzchnię zamkniętą otaczającą obszar \mathcal{V}_ρ jest równy -1 w przypadku funkcji $\{\Phi_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r})\}$ oraz $+1$ w przypadku funkcji $\{\Phi_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r})\}$.

Chociaż funkcje $\{\Phi_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r})\}$ oraz $\{\Phi_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r})\}$ są rozwiązaniami szczególnymi “obciętego” równania Schrödingera (2.7), w ogólności *nie* są one rozwiązaniami szczególnymi “pełnego” równania Schrödingera (2.1) w obszarze $\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho$, gdyż na sferze \mathcal{S}_ρ nie da się zszyć ich w gładki sposób z rozwiązaniami równania (2.1) w

obszarze \mathcal{V}_ρ . Rozwiązaniami szczególnymi równania (2.1) w obszarze $\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho$ są natomiast następujące kombinacje liniowe funkcji $\{\Phi_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r})\}$ i $\{\Phi_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r})\}$

$$\Psi_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) = \Phi_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) - \sum_{l'm'_l} \Phi_{l'm'_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) U_{l'm'_l, lm_l}^{\text{in}}(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.24)$$

$$\Psi_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) = \Phi_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) - \sum_{l'm'_l} \Phi_{l'm'_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) U_{l'm'_l, lm_l}^{\text{out}}(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.25)$$

z zespolonymi współczynnikami $\{U_{lm_l, l'm'_l}^{\text{in}}(E)\}$ oraz $\{U_{lm_l, l'm'_l}^{\text{out}}(E)\}$ zależnymi od konkretnej postaci jądra całkowego $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, to znaczy od charakteru oddziaływania pomiędzy cząstką a polem rozpraszającym w obszarze \mathcal{V}_ρ . Dowolne rozwiązanie $\Psi(E, \mathbf{r})$ równania Schrödingera (2.1) w obszarze zewnętrznym można przedstawić w postaci kombinacji liniowych

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \sum_{lm_l} a_{lm_l}^{\text{in}}(E) \Psi_{lm_l}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.26)$$

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \sum_{lm_l} a_{lm_l}^{\text{out}}(E) \Psi_{lm_l}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.27)$$

ze współczynnikami $\{a_{lm_l}^{\text{in/out}}(E)\}$ zależnymi od procesu fizycznego, który chcemy opisać za pomocą funkcji falowej $\Psi(E, \mathbf{r})$. Współczynniki $\{U_{lm_l, l'm'_l}^{\text{in/out}}(E)\}$ definiują macierze kwadratowe $\mathbf{U}^{\text{in/out}}(E)$, natomiast współczynniki $\{a_{lm_l}^{\text{in/out}}(E)\}$ definiują macierze jednokolumnowe $\mathbf{a}^{\text{in/out}}(E)$. Korzystając z równań (2.24)–(2.27), można łatwo pokazać, że macierze $\mathbf{U}^{\text{in}}(E)$ i $\mathbf{U}^{\text{out}}(E)$ są wzajemnie odwrotne,

$$\mathbf{U}^{\text{out}}(E) = [\mathbf{U}^{\text{in}}(E)]^{-1}, \quad (2.28)$$

zaś macierze $\mathbf{a}^{\text{in}}(E)$ i $\mathbf{a}^{\text{out}}(E)$ są związane relacją

$$\mathbf{a}^{\text{out}}(E) = -\mathbf{U}^{\text{in}}(E) \mathbf{a}^{\text{in}}(E). \quad (2.29)$$

We wstępie do tego rozdziału założyliśmy, że interesować nas będzie proces rozpraszania. W procesie tego typu na początku mamy cząstki w dobrze określonym stanie, zaś informację o stanach cząstek po rozproszeniu chcemy dopiero uzyskać, analizując rozwiązania równania (2.1). Oznacza to, że w opisie teoretycznym współczynniki $\{a_{lm_l}^{\text{in}}(E)\}$ możemy uważać za zadane, poszukiwać zaś należy współczynników $\{a_{lm_l}^{\text{out}}(E)\}$ lub też, równoważnie, macierzy $\mathbf{U}^{\text{in}}(E)$.

Dla przejrzystości notacji będziemy od tej pory opuszczali indeks “in” przy współczynnikach $\{U_{lm_l, l'm'_l}^{\text{in}}(E)\}$ oraz $\{a_{lm_l}^{\text{in}}(E)\}$

$$U_{lm_l, l'm'_l}(E) \equiv U_{lm_l, l'm'_l}^{\text{in}}(E), \quad a_{lm_l}(E) \equiv a_{lm_l}^{\text{in}}(E). \quad (2.30)$$

Zespól współczynników $\{U_{lm_l, l'm'_l}(E)\}$ definiuje zależną od energii macierz rozpraszania $U(E)$, w której zawiera się cała informacja o przebiegu procesu zderzenia.^{2b} Znajomość macierzy rozpraszania pozwala, między innymi, na znalezienie różniczkowego ($\sigma_{\text{dif}}(E, \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{r}})$) i całkowitego ($\sigma_{\text{tot}}(E)$) przekroju czynnego dla procesu, w którym początkowo równoległa wiązka cząstek o wektorze falowym \mathbf{k} ulega rozproszeniu w polu \hat{V} [115]

$$\sigma_{\text{dif}}(E, \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{r}}) = \frac{4\pi^2}{k^2} \left| \sum_{lm_l, l'm'_l} Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}}) [\delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} - U_{lm_l, l'm'_l}(E)] Y_{l'm'_l}^*(\hat{\mathbf{k}}) \right|^2, \quad (2.31)$$

$$\sigma_{\text{tot}}(E) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{lm_l, l'm'_l} |\delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} - U_{lm_l, l'm'_l}(E)|^2. \quad (2.32)$$

Wprowadzimy teraz szereg oznaczeń, które w dalszym ciągu rozważań pozwolą nam uprościć notację. Niech symbol γ oznacza parę indeksów (l, m_l) . Uwzględniając definicję (2.24) oraz oznaczając

$$\delta_{\gamma\gamma'} = \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l}, \quad (2.33)$$

możemy przepisać równanie (2.26) w postaci

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \sum_{\gamma\gamma'} [\Phi_\gamma^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) \delta_{\gamma\gamma'} - \Phi_\gamma^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) U_{\gamma\gamma'}(E)] a_{\gamma'}(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \quad (2.34)$$

Niech dalej $\mathcal{Y}^T(\mathbf{r})$ będzie macierzą jednowierszową z wyrazami

$$\mathcal{Y}_\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} i^l Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.35)$$

i niech $P(E, r)$ oraz $D(E, r)$ będą macierzami jednokolumnowymi z elementami

$$P_\gamma(E, r) = \int_{4\pi} d^2\hat{\mathbf{r}} r^2 \mathcal{Y}_\gamma^*(\mathbf{r}) \Psi(E, \mathbf{r}) \quad (r \geq \rho), \quad (2.36)$$

$$D_\gamma(E, r) = \int_{4\pi} d^2\hat{\mathbf{r}} r^2 \mathcal{Y}_\gamma^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla \Psi(E, \mathbf{r}) \quad (r \geq \rho). \quad (2.37)$$

Wówczas funkcję $\Psi(E, \mathbf{r})$ oraz jej pochodną radialną możemy zapisać jako

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \mathcal{Y}^T(\mathbf{r}) P(E, r) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.38)$$

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla \Psi(E, \mathbf{r}) = \mathcal{Y}^T(\mathbf{r}) D(E, r) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \quad (2.39)$$

Zdefiniujemy także diagonalne macierze kwadratowe $\mathbf{P}^{\text{in}}(E, r)$ i $\mathbf{P}^{\text{out}}(E, r)$ z elementami $\{P_{\gamma\gamma'}^{\text{in/out}}(E, r) = P_l^{\text{in/out}}(E, r) \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l}\}$, diagonalne macierze kwadratowe $\mathbf{D}^{\text{in}}(E, r)$ i $\mathbf{D}^{\text{out}}(E, r)$ z elementami

$$D_{\gamma\gamma'}^{\text{in/out}}(E, r) = r \frac{d[r^{-1} P_l^{\text{in/out}}(E, r)]}{dr} \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} \quad (2.40)$$

^{2b} Prócz terminu *macierz rozpraszania* zamiennie używa się określenia *macierz zderzeniowa* [76], a zamiast oznaczenia $U(E)$ często stosuje się też oznaczenie $S(E)$.

oraz macierz jednokolumnową $a(E)$ z elementami $\{a_\gamma(E) = a_{lm_l}(E)\}$. W notacji macierzowej równanie (2.34) przyjmuje postać

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \Upsilon^T(\mathbf{r}) [\mathbf{P}^{\text{in}}(E, r) - \mathbf{P}^{\text{out}}(E, r)\mathbf{U}(E)] a(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (2.41)$$

zaś równanie dla pochodnej radialnej funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ ma postać

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla \Psi(E, \mathbf{r}) = \Upsilon^T(\mathbf{r}) [\mathbf{D}^{\text{in}}(E, r) - \mathbf{D}^{\text{out}}(E, r)\mathbf{U}(E)] a(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \quad (2.42)$$

Ze wzorów (2.38), (2.39), (2.41) oraz (2.42) wynika, że

$$P(E, r) = [\mathbf{P}^{\text{in}}(E, r) - \mathbf{P}^{\text{out}}(E, r)\mathbf{U}(E)] a(E), \quad (2.43)$$

$$D(E, r) = [\mathbf{D}^{\text{in}}(E, r) - \mathbf{D}^{\text{out}}(E, r)\mathbf{U}(E)] a(E). \quad (2.44)$$

Równania (2.38), (2.39) oraz (2.41)–(2.44) są słuszne w szczególności na sferze \mathcal{S}_ρ .

Załóżmy teraz, że istnieje taka macierz kwadratowa $R_b(E, \rho)$, że dla dowolnego rozwiązania $\Psi(E, \mathbf{r})$ równania Schrödingera (2.1) na powierzchni \mathcal{S}_ρ zachodzi

$$P(E, \rho) = R_b(E, \rho) [D(E, \rho) - b(E)P(E, \rho)], \quad (2.45)$$

gdzie $b(E)$ jest daną macierzą kwadratową, która w szczególności może być osobliwa lub równa zero. Macierz $R_b(E, \rho)$ nosi nazwę R -macierzy dla równania Schrödingera (2.1).^{2c} R -macierze odpowiadające różnym macierzom $b(E)$ są ze sobą powiązane. Z definicji (2.45) wynika bowiem, że dla dwóch dowolnych macierzy $b(E)$ i $b'(E)$ oraz odpowiadających im R -macierzy $R_b(E, \rho)$ i $R_{b'}(E, \rho)$ zachodzi

$$P(E, \rho) = [I + R_b(E, \rho)b(E)]^{-1} R_b(E, \rho) D(E, \rho), \quad (2.46)$$

$$P(E, \rho) = [I + R_{b'}(E, \rho)b'(E)]^{-1} R_{b'}(E, \rho) D(E, \rho). \quad (2.47)$$

(Tutaj i dalej I oznacza macierz jednostkową z wyrazami $\{I_{ij} = \delta_{ij}\}$.) Równania (2.46) i (2.47) implikują

$$[I + R_b(E, \rho)b(E)]^{-1} R_b(E, \rho) = [I + R_{b'}(E, \rho)b'(E)]^{-1} R_{b'}(E, \rho), \quad (2.48)$$

skąd, po prostych przekształceniach, otrzymujemy

$$R_b^{-1}(E, \rho) + b(E) = R^{-1}(E, \rho) = R_{b'}^{-1}(E, \rho) + b'(E), \quad (2.49)$$

gdzie przez $R(E, \rho)$ oznaczyliśmy R -macierz dla przypadku $b(E) = 0$.

Macierze $R_b(E, \rho)$ posiadają następującą własność symetrii

$$R_b^\dagger(E, \rho) = R_{b^+}(E, \rho), \quad (2.50)$$

z której wynika w szczególności, że R -macierze odpowiadające hermitowskim macierzom $b(E)$ są hermitowskie. Dowód własności (2.50) zaczniemy od wykazania

^{2c} Ścisłe rzecz biorąc, pełna nazwa macierzy $R_b(E, \rho)$ jest następująca: R -macierz w bazie $\{\Upsilon_\gamma(\boldsymbol{\rho})\}$, na powierzchni \mathcal{S}_ρ , dla równania Schrödingera (2.1) i dla macierzy $b(E)$.

hermitowskości macierzy $R(E, \rho)$. Nasze rozumowanie oprzemy na fakcie, że, ze względu na stacjonarność rozważanego procesu oraz hermitowskość operatora potencjału \hat{V} , całkowity prąd prawdopodobieństwa odpowiadający funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ i przechodzący przez powierzchnię \mathcal{S}_ρ jest równy zero

$$\frac{\hbar}{m} \int_{4\pi} d^2 \hat{\mathbf{r}} r^2 \operatorname{Im} [\Psi^*(E, \mathbf{r}) \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla \Psi(E, \mathbf{r})] \Big|_{r=\rho} = 0. \quad (2.51)$$

Podstawiając do wzoru (2.51) relacje (2.38) oraz (2.39) i wykorzystując ortonormalność funkcji $\{\mathcal{Y}_\gamma(\boldsymbol{\rho})\}$ na powierzchni \mathcal{S}_ρ , otrzymujemy

$$\operatorname{Im} P^\dagger(E, \rho) D(E, \rho) = 0, \quad (2.52)$$

skąd, po uwzględnieniu definicji macierzy $R(E, \rho)$, wynika, że

$$\operatorname{Im} P^\dagger(E, \rho) R^{-1}(E, \rho) P(E, \rho) = 0. \quad (2.53)$$

Równanie (2.53) jest oczywiście równoważne relacji

$$P^\dagger(E, \rho) [R^{-1}(E, \rho) - [R^{-1}(E, \rho)]^\dagger] P(E, \rho) = 0. \quad (2.54)$$

Ponieważ ostatnie równanie jest spełnione dla każdej macierzy $P(E, \rho)$, wnioskujemy, że macierz $R^{-1}(E, \rho) - [R^{-1}(E, \rho)]^\dagger$ musi być macierzą zerową. Implikuje to, że macierz $R^{-1}(E, \rho)$ (a w konsekwencji także macierz $R(E, \rho)$) jest hermitowska. Korzystając z tego rezultatu oraz z równania (2.49), mamy

$$R_b^{-1}(E, \rho) + b^\dagger(E) = R^{-1}(E, \rho) = [R^{-1}(E, \rho)]^\dagger = [R_b^{-1}(E, \rho)]^\dagger + b^\dagger(E), \quad (2.55)$$

skąd natychmiast wynika prawdziwość równania (2.50).

Znajdziemy teraz związek pomiędzy macierzami $R_b(E, \rho)$ oraz $U(E)$. Korzystając z równań (2.43) i (2.44), możemy przepisać wzór (2.45) w następującej postaci

$$\begin{aligned} [P^{\text{in}}(E, \rho) - P^{\text{out}}(E, \rho)U(E)] a(E) &= R_b(E, \rho) \left[[D^{\text{in}}(E, \rho) - D^{\text{out}}(E, \rho)U(E)] \right. \\ &\quad \left. - b(E) [P^{\text{in}}(E, \rho) - P^{\text{out}}(E, \rho)U(E)] \right] a(E). \end{aligned} \quad (2.56)$$

Powyższa relacja musi być spełniona dla dowolnego wektora $a(E)$, co oznacza, że musi zachodzić

$$\begin{aligned} P^{\text{in}}(E, \rho) - P^{\text{out}}(E, \rho)U(E) &= R_b(E, \rho) [D^{\text{in}}(E, \rho) - D^{\text{out}}(E, \rho)U(E)] \\ &\quad - R_b(E, \rho)b(E) [P^{\text{in}}(E, \rho) - P^{\text{out}}(E, \rho)U(E)]. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Rozwiązując równanie (2.57) ze względu na $U(E)$, otrzymujemy

$$U(E) = [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} [I - R_b(E, \rho)L_b^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} [I - R_b(E, \rho)L_b^{\text{in}}(E, \rho)] P^{\text{in}}(E, \rho), \quad (2.58)$$

gdzie $L_b^{\text{in/out}}(E, \rho)$ są macierzami kwadratowymi zdefiniowanymi następująco

$$L_b^{\text{in/out}}(E, \rho) = [P^{\text{in/out}}(E, \rho)]^{-1} D^{\text{in/out}}(E, \rho) - b(E). \quad (2.59)$$

Uwzględniając fakt, że z równania (2.16) wynika, iż

$$P^{\text{in}}(E, \rho) D^{\text{out}}(E, \rho) - P^{\text{out}}(E, \rho) D^{\text{in}}(E, \rho) = W [P^{\text{in}}(E, \rho); P^{\text{out}}(E, \rho)] = 2ikI, \quad (2.60)$$

równanie (2.58) można przekształcić do postaci

$$U(E) = [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} P^{\text{in}}(E, \rho) + 2ik [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} [R_b^{-1}(E, \rho) - L_b^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1}. \quad (2.61)$$

Równania (2.58) i (2.61) sprowadzają zagadnienie znalezienia macierzy rozpraszania $U(E)$ dla potencjału \hat{V} do problemu znalezienia macierzy $R_b(E, \rho)$ zdefiniowanej równaniem (2.45) lub też, równoważnie, do problemu znalezienia takiego operatora całkowego $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$, którego reprezentacją macierzową w bazie $\{\mathcal{Y}_\gamma(\rho)\}$ na powierzchni \mathcal{S}_ρ jest macierz $R_b(E, \rho)$. Praktyczne metody konstrukcji operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ omówimy w rozdziałach 3 i 6.

Na zakończenie tego rozdziału zwrócimy jeszcze uwagę na fakt, że jeżeli wybierzemy macierz $b(E)$ następująco

$$b(E) = [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} D^{\text{out}}(E, \rho), \quad (2.62)$$

wówczas

$$L_b^{\text{out}}(E, \rho) = 0 \quad (2.63)$$

i równanie (2.61) przyjmuje szczególnie prostą postać

$$U(E) = [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} P^{\text{in}}(E, \rho) + 2ik [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} R_b(E, \rho) [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1}, \quad (2.64)$$

podaną po raz pierwszy przez Kapura i Peierlsa [1]. Jakkolwiek wzór (2.64) jest istotny z teoretycznego punktu widzenia i odegrał ważną rolę w rozwoju kwantowej teorii zderzeń [79, 134], wadą wyboru macierzy $b(E)$ w postaci (2.62) jest to, że jest ona niehermitowska, a konstrukcja macierzy $R_b(E, \rho)$ dla $b(E) \neq b^\dagger(E)$ napotyka na praktyczne trudności. Dlatego, zgodnie z sugestią Wignera [2–5], w zastosowaniach, zamiast wzoru (2.64), stosuje się wzór (2.61) z hermitowską macierzą $b(E)$.

Ograniczając się do hermitowskich macierzy $b(E)$, musimy udzielić odpowiedzi na pytanie: skoro, jak wynika z równań (2.49), (2.59) oraz (2.61), macierz $U(E)$ nie zależy od konkretnego wyboru $b(E)$, po co rozpatrywać ogólną teorię z dowolną hermitowską macierzą $b(E)$, zamiast ograniczyć się do rozważenia najprostszego przypadku $b(E) = 0$? Przyczyny są dwie. Po pierwsze, w opisanej w podrozdziale 3.3 metodzie Kapura–Peierlsa–Wignera konstrukcji operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ otrzymuje się jądro tego operatora w postaci pewnego szeregu. Okazuje się, że szybkość, z jaką szereg ten zbiega, jest w praktyce uzależniona od postaci operatora $\hat{b}(E)$,

którego reprezentacją macierzową w bazie $\{\mathcal{Y}_\gamma(\boldsymbol{\rho})\}$ na powierzchni \mathcal{S}_ρ jest macierz $b(E)$; optymalny wybór nie musi odpowiadać sytuacji, gdy $\hat{\mathbf{b}}(E) = \hat{\delta}$, gdzie $\hat{\delta}$ jest operatorem zerowym. Po drugie, rozpatrzenie ogólnego przypadku $b(E) \neq 0$ upraszcza późniejsze powiązanie teorii R -macierzy dla równania Schrödingera z granicą nierelatywistyczną odpowiadającą jej teorii dla równania Diraca (patrz podrozdział 5.3).

Rozdział 3

TEORIA R -MACIERZY DLA RÓWNANIA SCHRÖDINGERA

W tym rozdziale przedstawimy ogólne sformułowanie teorii R -macierzy dla równania Schrödingera. Rozważania przeprowadzimy dla przypadku objętości reakcji o dowolnym kształcie, wykorzystując w tym celu formalizm operatorów całkowych. W kolejnych podrozdziałach wprowadzimy R -operator $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$, którego reprezentacją macierzową w pewnej bazie jest R -macierz $R_b(E)$, wykażemy związek jądra całkowego operatora $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$ z funkcją Greena pewnego zagadnienia brzegowego, omówimy szczegółowo metodę Kapura–Peierlsa–Wignera konstrukcji jądra operatora $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$ oraz pokażemy, w jaki sposób można otrzymać szereg zasad wariacyjnych związanych z teorią R -macierzy dla równania Schrödingera.

3.1 Operatory $\hat{B}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$

3.1.1 Wprowadzenie

Niech dana będzie skończona objętość $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^3$ ograniczona odpowiednio gładką i poza tym dowolną powierzchnią \mathcal{S} . Zgodnie z terminologią przyjętą w teorii R -macierzy, w dalszym ciągu objętość \mathcal{V} będziemy nazywali “obszarem reakcji”, a powierzchnię \mathcal{S} — “powierzchnią reakcji”. Przez \mathbf{r} oznaczać będziemy wektor położenia punktu należącego do wnętrza obszaru \mathcal{V} , $\boldsymbol{\rho}$ będzie wektorem położenia punktu znajdującego się na powierzchni \mathcal{S} , a $\mathbf{n}(\boldsymbol{\rho})$ będzie oznaczał wektor jednostkowy normalny do powierzchni \mathcal{S} w punkcie $\boldsymbol{\rho}$ i skierowany na zewnątrz tej powierzchni. Dla dowolnych odpowiednio regularnych funkcji $\Phi(\mathbf{r})$ i $\Phi'(\mathbf{r})$ definiujemy ich iloczyn skalarny objętościowy i powierzchniowy następująco

$$\langle \Phi | \Phi' \rangle \equiv \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r})\Phi'(\mathbf{r}), \quad (\Phi | \Phi') \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho} \Phi^*(\boldsymbol{\rho})\Phi'(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.1.1)$$

gdzie symbol $*$ oznacza sprzężenie zespolone. W równaniu (3.1.1) $d^3\mathbf{r}$ jest infinitesimalnym elementem objętości \mathcal{V} wokół punktu \mathbf{r} , a $d^2\boldsymbol{\rho}$ jest infinitesimalnym skalarnym elementem powierzchni \mathcal{S} wokół punktu $\boldsymbol{\rho}$.

Przez $L^2_{(\cdot)}(\mathcal{S})$ oznaczać będziemy przestrzeń Hilberta funkcji całkowalnych z kwadratem na powierzchni \mathcal{S} , to znaczy takich, że dla dowolnej funkcji $\Phi(\boldsymbol{\rho}) \in L^2_{(\cdot)}(\mathcal{S})$ zachodzi

$$(\Phi | \Phi) < \infty. \quad (3.1.2)$$

Podobnie, przez $L^2_{(\cdot)}(\mathcal{V})$ oznaczymy przestrzeń Hilberta funkcji całkowalnych z kwadratem w objętości \mathcal{V} , to znaczy takich, że dla dowolnej funkcji $\Phi(\mathbf{r}) \in L^2_{(\cdot)}(\mathcal{V})$ zachodzi

$$\langle \Phi | \Phi \rangle < \infty. \quad (3.1.3)$$

3.1.2 Operator $\hat{B}(E)$

Rozważmy nierelatywistyczną bezspinową cząstkę punktową o masie m i energii E . W obszarze \mathcal{V} niezależne od czasu równanie Schrödingera dla cząstki ma postać

$$[\hat{H} - E]\Psi(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.1.4)$$

gdzie \hat{H} jest nierelatywistycznym operatorem Hamiltona zdefiniowanym przez

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}, \quad (3.1.5)$$

przy czym \hat{V} jest hermitowskim, w ogólności nielokalnym, operatorem potencjału o jądrze całkowym $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V^*(\mathbf{r}', \mathbf{r})$. Będziemy zakładać, że nielokalność potencjału \hat{V} jest ograniczona do obszaru \mathcal{V} , to znaczy, że

$$\hat{V}\Psi(E, \mathbf{r}) = \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi(E, \mathbf{r}') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (3.1.6)$$

(zwracamy uwagę, że całkowanie w powyższym wzorze przebiega wyłącznie po objętości \mathcal{V} , nie zaś po całej przestrzeni \mathbb{R}^3). Ruch cząstki *nie* jest ograniczony do wnętrza obszaru \mathcal{V} : cząstka może przekraczać jego powierzchnię \mathcal{S} , wchodząc do wnętrza lub też wychodząc z niego. Oznacza to, że na powierzchni \mathcal{S} nie narzucamy żadnych warunków brzegowych na rozwiązania równania Schrödingera (3.1.4).

W dalszym ciągu przez $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$ oznaczymy zbiór tych wszystkich funkcji $\{\Psi(E, \mathbf{r})\}$, które dla pewnej ustalonej *rzeczywistej* wartości energii E są rozwiązaniami równania Schrödingera (3.1.4) w objętości \mathcal{V} . (Przypomnijmy, że równanie różniczkowo-całkowe cząstkowe typu (3.1.4) bez narzuconych warunków brzegowych ma nieskończenie wiele rozwiązań.) Podobnie, przez $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}(E)$ oznaczymy zbiór powierzchniowych części funkcji należących do zbioru $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$.

Rozważmy dwie funkcje falowe $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ ze zbioru $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$. Mnożąc równanie spełniane przez funkcję $\Psi(E, \mathbf{r})$ z lewej strony przez $\Psi'^*(E, \mathbf{r})$, a sprzężenie zespolone równania dla funkcji $\Psi'(E, \mathbf{r})$ przez $\Psi(E, \mathbf{r})$, odejmując otrzymane równania stronami, całkując wynik po objętości \mathcal{V} i korzystając z twierdzenia całkowego Greena, otrzymujemy

$$\langle \hat{H}\Psi' | \Psi \rangle - \langle \Psi' | \hat{H}\Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}(\Psi' | \nabla_n \Psi) - \frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_n \Psi' | \Psi), \quad (3.1.7)$$

gdzie

$$\nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \equiv \mathbf{n}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \nabla \Psi(E, \mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=\boldsymbol{\rho}} \quad (3.1.8)$$

oznacza zewnętrzną pochodną normalną funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ w punkcie $\boldsymbol{\rho}$ na powierzchni \mathcal{S} . Na mocy równania (3.1.4) oraz z rzeczywistości energii E wynika, że lewa strona równania (3.1.7) jest równa zero. W konsekwencji, mamy

$$(\Psi' | \nabla_n \Psi) = (\nabla_n \Psi' | \Psi). \quad (3.1.9)$$

Wprowadzimy teraz zależny od energii liniowy całkowity operator hermitowski $\hat{B}(E)$ określony na przestrzeni $L^2_{(1)}(S)$ taki, że^{3A}

$$\nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{B}(E) \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (3.1.10)$$

dla dowolnego rozwiązania równania (3.1.4) dla energii E . Wykorzystując operator $\hat{B}(E)$, możemy przepisać relację (3.1.9) w postaci

$$(\Psi' | \hat{B} \Psi) = (\hat{B} \Psi' | \Psi). \quad (3.1.11)$$

Równanie (3.1.11) oznacza, że operator $\hat{B}(E)$ jest hermitowski na zbiorze funkcji $\mathcal{D}_S(E)$ względem powierzchniowego iloczynu skalarnego ($|$). Operator $\hat{B}(E)$, który można nazwać “operatorem pochodnej logarytmicznej”, jest reprezentowany przez jądro całkowite $\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$, z pomocą którego równanie (3.1.10) można zapisać w postaci

$$\nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (3.1.12)$$

dla dowolnej funkcji $\Psi(E, \boldsymbol{r}) \in \mathcal{D}_V(E)$. Warunek hermitowskości operatora $\hat{B}(E)$, wynikający z relacji (3.1.11), implikuje, że jądro $\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ spełnia relację symetrii

$$\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{B}^*(E, \boldsymbol{\rho}', \boldsymbol{\rho}). \quad (3.1.13)$$

Znajdziemy rozwinięcie spektralne jądra $\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. W tym celu rozpatrzmy zbiór takich funkcji $\{\Psi_i(E, \boldsymbol{r})\}$, które w objętości \mathcal{V} spełniają równanie Schrödingera (3.1.4) przy pewnej ustalonej rzeczywistej energii E

$$[\hat{H} - E] \Psi_i(E, \boldsymbol{r}) = 0, \quad (3.1.14)$$

a na powierzchni S mają stałe wartości normalnej pochodnej logarytmicznej

$$\nabla_n \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) = b_i(E) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (3.1.15)$$

(z wyjątkiem możliwych przypadkowych degeneracji, w ogólności stałe $b_i(E)$ będą miały różne wartości dla różnych funkcji $\Psi_i(E, \boldsymbol{r})$). Zbiór funkcji $\{\Psi_i(E, \boldsymbol{r})\}$ jest oczywiście podzbiorem zbioru $\mathcal{D}_V(E)$. Biorąc pod uwagę definicję (3.1.10), równanie (3.1.15) można przepisać w postaci

$$\hat{B}(E) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) = b_i(E) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.1.16)$$

^{3A} Aby uniknąć w dalszym ciągu nieporozumień, podkreślamy, że operatory ∇_n i $\hat{B}(E)$ nie są identyczne. Z rozwinięcia spektralnego (3.1.20) wynika bowiem, że jądro operatora $\hat{B}(E)$ można zdefiniować wyłącznie poprzez funkcje określone na powierzchni S , natomiast działanie operatora ∇_n jest zdefiniowane poprzez przejście graniczne równaniem [135]

$$\nabla_n \Phi(\boldsymbol{\rho}) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Phi(\boldsymbol{\rho} + \varepsilon \boldsymbol{n}(\boldsymbol{\rho})) - \Phi(\boldsymbol{\rho})}{\varepsilon}, \quad (3A.1)$$

w którym argument pierwszego składnika licznika jest w ogólności wektorem leżącym we wnętrzu objętości \mathcal{V} , to znaczy *poza* powierzchnią S .

Równanie to można interpretować w ten sposób, że funkcje $\{\Psi_i(E, \rho)\}$ są funkcjami własnymi operatora całkowego $\hat{B}(E)$, a $\{b_i(E)\}$ są odpowiadającymi im wartościami własnymi. Ze względu na hermitowskość operatora $\hat{B}(E)$ (porównaj (3.1.11)), wszystkie wartości własne $\{b_i(E)\}$ są rzeczywiste, a funkcje własne odpowiadające różnym wartościom własnym tworzą zbiór ortogonalny względem powierzchniowego iloczynu skalarnego ($|$). W dalszym ciągu rozważań, bez utraty ogólności, będziemy zakładali, że funkcje własne $\{\Psi_i(E, \rho)\}$ zostały unormowane do jedności względem iloczynu skalarnego ($|$) oraz że funkcje własne odpowiadające zdegenerowanym wartościom własnym (jeżeli takie istnieją) są także wzajemnie ortogonalne. Wówczas dla dwóch dowolnych funkcji własnych operatora $\hat{B}(E)$ zachodzi

$$(\Psi_i | \Psi_j) = \delta_{ij}. \quad (3.1.17)$$

Założymy również, że funkcje własne $\{\Psi_i(E, \rho)\}$ tworzą układ zupełny w przestrzeni $L^2_{(|)}(\mathcal{S})$ i że odpowiednia relacja zupełności ma postać^{3B}

$$\sum_i \Psi_i(E, \rho) \Psi_i^*(E, \rho') = \delta^{(2)}(\rho - \rho'), \quad (3.1.18)$$

gdzie $\delta^{(2)}(\rho - \rho')$ jest powierzchniową funkcją delta Diraca zdefiniowaną w uzupełnieniu A. Równanie (3.1.16) można przepisać w postaci całkowej

$$\int_{\mathcal{S}} d^2 \rho' \mathcal{B}(E, \rho, \rho') \Psi_i(E, \rho') = b_i(E) \Psi_i(E, \rho), \quad (3.1.19)$$

z której, biorąc pod uwagę relację zupełności (3.1.18) i warunek normalizacyjny (3.1.17), wynika reprezentacja spektralna jądra $\mathcal{B}(E, \rho, \rho')$

$$\mathcal{B}(E, \rho, \rho') = \sum_i \Psi_i(E, \rho) b_i(E) \Psi_i^*(E, \rho'). \quad (3.1.20)$$

Zagadnienie zależności wartości własnych $\{b_i(E)\}$ operatora $\hat{B}(E)$ od energii omówimy w uzupełnieniu C.

Na zakończenie tego podrozdziału zwrócimy jeszcze uwagę, że, po skorzystaniu z równania (3.1.15), relację ortonormalności (3.1.17) można przepisać w postaci

$$(\nabla_n \Psi_i | \nabla_n \Psi_j) = b_i^2(E) \delta_{ij}, \quad (3.1.21)$$

zaś relację zupełności (3.1.18) oraz rozwinięcie spektralne (3.1.20) odpowiednio w postaci

$$\sum_i \nabla_n \Psi_i(E, \rho) b_i^{-2}(E) \nabla_n \Psi_i^*(E, \rho') = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \quad (3.1.22)$$

i

$$\mathcal{B}(E, \rho, \rho') = \sum_i \nabla_n \Psi_i(E, \rho) b_i^{-1}(E) \nabla_n \Psi_i^*(E, \rho'). \quad (3.1.23)$$

^{3B} Niestety, podanie dowodu zupełności układu funkcji $\{\Psi_i(E, \rho)\}$ dla dowolnego operatora potencjału \hat{V} i dla powierzchni \mathcal{S} o dowolnym kształcie przekracza możliwości matematyczne autora. Dowód dla szczególnego przypadku, gdy potencjał \hat{V} jest lokalny i sferycznie symetryczny, a powierzchnia \mathcal{S} jest sferą o środku w centrum potencjału, przedstawiono w uzupełnieniu B.

3.1.3 Operatory $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}(E)$

Po powyższym wstępie jesteśmy przygotowani do wprowadzenia operatora całkowego $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ zdefiniowanego na przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$ i określonego przez jądro całkowe $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. Reprezentacja macierzowa R -operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ odgrywa kluczową rolę w teorii R -macierzy. Niech $\hat{b}(E)$ będzie pewnym liniowym hermitowskim operatorem całkowym zdefiniowanym na przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$ i określonym poprzez jądro całkowe $b(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. Operator $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ jest zdefiniowany jako operator odwrotny do operatora $\hat{B}(E) - \hat{b}(E)$ w sensie

$$\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)[\hat{B}(E) - \hat{b}(E)] = [\hat{B}(E) - \hat{b}(E)]\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E) = \hat{I}, \quad (3.1.24)$$

gdzie \hat{I} jest operatorem jednostkowym w przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$ z jądrem całkowym $\delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')$. Hermitowski operator $\hat{b}(E)$ użyty w definicji (3.1.24) może być dowolny (w szczególności może być stałą funkcją energii E) i jedynym ograniczeniem, które nakładamy na niego, jest to, by operator $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ istniał. Zauważmy, że skoro operatory $\hat{B}(E)$ i $\hat{b}(E)$ są hermitowskie, operator $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ również musi być hermitowski. Oznacza to, że jego jądro całkowe musi spełniać relację

$$\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{R}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}', \boldsymbol{\rho}). \quad (3.1.25)$$

Wykorzystując operator $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$, relację (3.1.10) można przepisać w abstrakcyjnej postaci

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)[\nabla_n - \hat{b}(E)]\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (3.1.26)$$

lub w postaci jawnej, wykorzystując jądro $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$,

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') [\nabla_n - \hat{b}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (3.1.27)$$

W szczególnym przypadku, gdy $\hat{b}(E)$ jest operatorem zerowym, $\hat{b}(E) = \hat{o}$, operator $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ i jego jądro $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ będziemy oznaczali odpowiednio przez $\hat{\mathcal{R}}(E)$ i $\mathcal{R}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. Jak wynika z definicji (3.1.24), operator $\hat{\mathcal{R}}(E)$ jest operatorem odwrotnym do operatora $\hat{B}(E)$

$$\hat{\mathcal{R}}(E)\hat{B}(E) = \hat{B}(E)\hat{\mathcal{R}}(E) = \hat{I}, \quad (3.1.28)$$

a jądra $\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ i $\mathcal{R}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ są jądrami odwrotnymi w sensie

$$\int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\rho}'' \mathcal{R}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') = \int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\rho}'' \mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \mathcal{R}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'). \quad (3.1.29)$$

W konsekwencji, funkcje własne operatora $\hat{B}(E)$ są jednocześnie funkcjami własnymi operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$, a wartości własne operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$ są odwrotnościami odpowiednich wartości własnych operatora $\hat{B}(E)$

$$\hat{\mathcal{R}}(E)\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) = b_i^{-1}(E)\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (3.1.30)$$

$$\int_{\mathcal{S}} d^2 \rho' \mathcal{R}(E, \rho, \rho') \Psi_i(E, \rho') = b_i^{-1}(E) \Psi_i(E, \rho). \quad (3.1.31)$$

Stąd oraz z warunków (3.1.17) i (3.1.18) wynika następująca postać rozwinięcia spektralnego jądra $\mathcal{R}(E, \rho, \rho')$

$$\mathcal{R}(E, \rho, \rho') = \sum_i \Psi_i(E, \rho) b_i^{-1}(E) \Psi_i^*(E, \rho'). \quad (3.1.32)$$

Korzystając z równania własnego (3.1.15), rozwinięcie (3.1.32) można przepisać w postaci

$$\mathcal{R}(E, \rho, \rho') = \sum_i \nabla_n \Psi_i(E, \rho) b_i^{-3}(E) \nabla_n \Psi_i^*(E, \rho'). \quad (3.1.33)$$

3.1.4 Związek pomiędzy operatorowym i macierzowym sformułowaniem teorii

Aby powiązać ze sobą operatorowe i macierzowe sformułowania teorii, załóżmy, że na powierzchni \mathcal{S} zadany jest pewien zbiór funkcji powierzchniowych $\{\Phi_i(\rho)\}$ tworzących bazę ortonormalną w $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$. W bazie tej jądra $\mathcal{B}(E, \rho, \rho')$, $\mathfrak{b}(E, \rho, \rho')$ oraz $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho')$ posiadają rozwinięcia biliniowe

$$\mathcal{B}(E, \rho, \rho') = \sum_{i,j} \Phi_i(\rho) (\Phi_i | \hat{B} \Phi_j) \Phi_j^*(\rho'), \quad (3.1.34)$$

$$\mathfrak{b}(E, \rho, \rho') = \sum_{i,j} \Phi_i(\rho) (\Phi_i | \hat{\mathfrak{b}} \Phi_j) \Phi_j^*(\rho'), \quad (3.1.35)$$

$$\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho') = \sum_{i,j} \Phi_i(\rho) (\Phi_i | \hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}} \Phi_j) \Phi_j^*(\rho'), \quad (3.1.36)$$

przy czym współczynniki

$$(\Phi_i | \hat{B} \Phi_j) \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho' \Phi_i^*(\rho) \mathcal{B}(E, \rho, \rho') \Phi_j(\rho'), \quad (3.1.37)$$

$$(\Phi_i | \hat{\mathfrak{b}} \Phi_j) \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho' \Phi_i^*(\rho) \mathfrak{b}(E, \rho, \rho') \Phi_j(\rho'), \quad (3.1.38)$$

$$(\Phi_i | \hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}} \Phi_j) \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho' \Phi_i^*(\rho) \mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho') \Phi_j(\rho'), \quad (3.1.39)$$

będące elementami macierzowymi operatorów odpowiednio $\hat{B}(E)$, $\hat{\mathfrak{b}}(E)$ oraz $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ pomiędzy funkcjami bazowymi $\{\Phi_i(\rho)\}$, tworzą macierze $\mathbf{B}(E)$, $\mathbf{b}(E)$ oraz $\mathbf{R}_{\hat{b}}(E)$ związane relacją

$$\mathbf{R}_{\hat{b}}(E) [\mathbf{B}(E) - \mathbf{b}(E)] = [\mathbf{B}(E) - \mathbf{b}(E)] \mathbf{R}_{\hat{b}}(E) = \mathbf{I}. \quad (3.1.40)$$

W powyższym równaniu \mathbf{I} oznacza macierz jednostkową z elementami $\{I_{ij} = \delta_{ij}\}$. Macierz $\mathbf{R}_{\hat{b}}(E)$ nosi nazwę R -macierzy w reprezentacji $\{\Phi_i(\rho)\}$.

W przypadku, gdy operator $\hat{b}(E)$ jest operatorem zerowym, macierz $\mathbf{b}(E)$ jest macierzą zerową, $\mathbf{b}(E) = \mathbf{0}$. R -macierz $R_0(E)$ będziemy w dalszym ciągu oznaczali przez $R(E)$. Jak wynika z równania (3.1.40), jest ona odwrotnością macierzy $\mathbf{B}(E)$

$$R(E)\mathbf{B}(E) = \mathbf{B}(E)R(E) = \mathbf{1}. \quad (3.1.41)$$

Reprezentację macierzową równania (3.1.26) otrzymujemy, rzutując to równanie z lewej strony na funkcje bazowe $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$

$$P(E) = R_b(E)[D(E) - \mathbf{b}(E)P(E)], \quad (3.1.42)$$

gdzie $P(E)$ i $D(E)$ są macierzami jednokolumnowymi z elementami odpowiednio $\{P_i(E) = (\Phi_i|\Psi)\}$ i $\{D_i(E) = (\Phi_i|\nabla_n\Psi)\}$.

Rozważmy teraz szczególny przypadek, gdy powierzchnia \mathcal{S} jest sferą o środku w początku układu współrzędnych i o promieniu ρ i wybierzmy na tej powierzchni bazę $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$ z elementami

$$\Phi_i(\boldsymbol{\rho}) = \mathcal{Y}_{lm_i}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.1.43)$$

gdzie funkcje $\{\mathcal{Y}_{lm_i}(\boldsymbol{\rho})\}$ zostały zdefiniowane równaniem (2.35). W tym przypadku macierze $P(E)$ i $D(E)$ są oczywiście identyczne z macierzami $P(E, \rho)$ i $D(E, \rho)$ pojawiającymi się w rozdziale 2. Jeżeli utożsamimy macierz $\mathbf{b}(E)$ o elementach (3.1.38) z oznaczoną w ten sam sposób macierzą z rozdziału 2, wówczas, z wyjątkiem nieistotnych różnic w notacji, wzór (3.1.42) jest identyczny ze wzorem (2.45). W ten sposób powiązaliśmy ogólne sformułowanie teorii R -macierzy dla równania Schrödingera ze szczególnym przypadkiem dyskutowanym w rozdziale 2.

3.2 Związek jąder całkowych $\mathcal{R}_b(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ i $\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ z funkcjami Greena

Rozważmy zagadnienie brzegowe, na które składają się: jednorodne równanie Schrödingera

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V} - E\right]\Psi(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (3.2.1)$$

oraz niejednorodny warunek brzegowy

$$\nabla_n\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) - \hat{b}(E)\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \Xi(\boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}) \quad (3.2.2)$$

narzucony na rozwiązania równania (3.2.1). Zakładamy, że E jest liczbą rzeczywistą i że funkcja $\Xi(\boldsymbol{\rho})$, będąca niejednorodnością w warunku (3.2.2), jest dowolną odpowiednio regularną funkcją zdefiniowaną na powierzchni \mathcal{S} . Hermitowski operator $\hat{b}(E)$ został określony w podrozdziale 3.1. Funkcja Greena $\mathcal{G}_b(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dla tego zagadnienia jest zdefiniowana jako rozwiązanie równania niejednorodnego

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V} - E\right]\mathcal{G}_b(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathcal{V}; \mathbf{r}' \text{ ustalone}), \quad (3.2.3)$$

spełniające na powierzchni \mathcal{S} jednorodny warunek brzegowy (porównaj (3.2.2))

$$\nabla_n \mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{r}') - \hat{b}(E) \mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{r}') = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}, \boldsymbol{r}' \in \mathcal{V}). \quad (3.2.4)$$

Funkcja $\delta^{(3)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$, występująca po prawej stronie równania (3.2.3), jest trójwymiarową funkcją delta Diraca zdefiniowaną w uzupełnieniu A. Ponieważ zagadnienie brzegowe (3.2.1) i (3.2.2) z $\Xi(\boldsymbol{\rho}) = 0$ jest hermitowskie, funkcja $\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ jest hermitowską funkcją argumentów \boldsymbol{r} oraz \boldsymbol{r}'

$$\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}). \quad (3.2.5)$$

Skorzystamy teraz z całkowego wzoru Greena

$$\int_{\mathcal{V}} d^3 \boldsymbol{r} [\Phi(\boldsymbol{r}) \nabla^2 \Phi'(\boldsymbol{r}) - \Phi'(\boldsymbol{r}) \nabla^2 \Phi(\boldsymbol{r})] = \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} [\Phi(\boldsymbol{\rho}) \nabla_n \Phi'(\boldsymbol{\rho}) - \Phi'(\boldsymbol{\rho}) \nabla_n \Phi(\boldsymbol{\rho})], \quad (3.2.6)$$

przyjmując w nim

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \Psi(E, \boldsymbol{r}), \quad \Phi'(\boldsymbol{r}) = \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'), \quad (3.2.7)$$

gdzie funkcja $\Psi(E, \boldsymbol{r})$ jest dowolnym rozwiązaniem zagadnienia brzegowego (3.2.1) i (3.2.2). Otrzymujemy

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} d^3 \boldsymbol{r} [\Psi(E, \boldsymbol{r}) \nabla^2 \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') - \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \nabla^2 \Psi(E, \boldsymbol{r})] \\ &= \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} [\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \nabla_n \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{r}') - \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{r}') \nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho})]. \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

Przekształcając lewą stronę relacji (3.2.8) z pomocą równań (3.2.1) i (3.2.3) oraz korzystając z hermitowskości operatora \hat{V} , otrzymujemy

$$\begin{aligned} & -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathcal{V}} d^3 \boldsymbol{r} \Psi(E, \boldsymbol{r}) \delta^{(3)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \\ &= \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} [\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \nabla_n \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{r}') - \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{r}') \nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho})]. \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

Lewa strona równania (3.2.9) jest oczywiście równa $(-2m/\hbar^2)\Psi(E, \boldsymbol{r}')$, natomiast prawą można przekształcić, wykorzystując warunek brzegowy (3.2.4) dla funkcji Greena oraz korzystając z hermitowskości operatora $\hat{b}(E)$. W rezultacie mamy

$$-\frac{2m}{\hbar^2} \Psi(E, \boldsymbol{r}') = \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} \mathcal{G}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{r}') [\hat{b}(E) \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) - \nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho})]. \quad (3.2.10)$$

Uwzględniając własność (3.2.5) hermitowskości funkcji Greena oraz dokonując w równaniu (3.2.10) zamiany oznaczeń $\boldsymbol{r}' \rightsquigarrow \boldsymbol{r}$ i $\boldsymbol{\rho} \rightsquigarrow \boldsymbol{\rho}'$, otrzymujemy

$$\Psi(E, \boldsymbol{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho}') [\nabla_n - \hat{b}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\boldsymbol{r} \in \mathcal{V}). \quad (3.2.11)$$

Powyższy związek jest prawdziwy dla dowolnego punktu \mathbf{r} należącego do objętości \mathcal{V} , w szczególności jest on słuszny dla punktów leżących na powierzchni \mathcal{S} . Przechodząc w równaniu (3.2.11) do granicy $\mathbf{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}$, mamy

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{G}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.2.12)$$

Porównując ten wynik ze znaną przez nas wcześniej w podrozdziale 3.1 relacją (3.1.27), otrzymujemy związek pomiędzy jądrem operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E)$ a funkcją Greena na powierzchni \mathcal{S}

$$\mathcal{R}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{G}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \quad (\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}' \in \mathcal{S}). \quad (3.2.13)$$

Rozpatrzmy z kolei zagadnienie brzegowe, które tworzą: jednorodny równanie Schrödingera w objętości \mathcal{V}

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V} - E \right] \Psi(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (3.2.14)$$

i niejednorodny warunek brzegowy Dirichleta narzucony na powierzchni \mathcal{S}

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \Xi'(\boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.2.15)$$

gdzie $\Xi'(\boldsymbol{\rho})$ jest odpowiednio regularną funkcją określoną na powierzchni \mathcal{S} .^{3c} Funkcja Greena $\mathcal{G}_{\infty}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dla tego zagadnienia jest rozwiązaniem równania

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V} - E \right] \mathcal{G}_{\infty}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathcal{V}; \mathbf{r}' \text{ ustalone}) \quad (3.2.16)$$

spełniającym na powierzchni \mathcal{S} jednorodny warunek brzegowy Dirichleta (porównaj (3.2.15))

$$\mathcal{G}_{\infty}(E, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{r}') = 0, \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}, \mathbf{r}' \in \mathcal{V}). \quad (3.2.17)$$

Z hermitowskości jednorodnego odpowiednika zagadnienia brzegowego (3.2.14) i (3.2.15) wynika, że funkcja $\mathcal{G}_{\infty}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ jest hermitowską funkcją argumentów \mathbf{r} oraz \mathbf{r}'

$$\mathcal{G}_{\infty}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{G}_{\infty}^*(E, \mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (3.2.18)$$

Korzystając z całkowego wzoru Greena (3.2.6) i przyjmując w nim

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Psi(E, \mathbf{r}), \quad \Phi'(\mathbf{r}) = \mathcal{G}_{\infty}^*(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (3.2.19)$$

^{3c} Warunek (3.2.15) można otrzymać z warunku (3.2.2), przyjmując w tym ostatnim

$$\hat{\mathbf{b}}^{-1}(E) = \hat{\delta} \quad (3c.i)$$

i oznaczając

$$\Xi'(\boldsymbol{\rho}) = \lim_{\hat{\mathbf{b}}^{-1}(E) \rightarrow \hat{\delta}} \hat{\mathbf{b}}^{-1}(E) \Xi(\boldsymbol{\rho}). \quad (3c.ii)$$

gdzie $\Psi(E, \mathbf{r})$ jest dowolnym spośród rozwiązań zagadnienia brzegowego (3.2.14) i (3.2.15), otrzymujemy tożsamość

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r} [\Psi(E, \mathbf{r}) \nabla^2 \mathcal{G}_{\infty}^*(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') - \mathcal{G}_{\infty}^*(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla^2 \Psi(E, \mathbf{r})] \\ &= \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} [\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \nabla_n \mathcal{G}_{\infty}^*(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') - \mathcal{G}_{\infty}^*(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho})]. \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

Rozumowanie identyczne z przeprowadzonym w przypadku dyskutowanym powyżej prowadzi do wniosku, że lewa strona równania (3.2.20) jest równa $(-2m/\hbar^2) \times \Psi(E, \mathbf{r}')$. Z kolei po prawej stronie równania (3.2.20), na mocy warunku brzegowego (3.2.17), znika drugi człon pod całką powierzchniową. Dokonując zamiany oznaczeń $\mathbf{r}' \rightsquigarrow \mathbf{r}$ i $\boldsymbol{\rho} \rightsquigarrow \boldsymbol{\rho}'$, mamy

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \nabla_n' \mathcal{G}_{\infty}(E, \mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}') \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}). \quad (3.2.21)$$

Obliczając pochodną normalną obu stron tego równania w punkcie $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}$ na powierzchni \mathcal{S} , otrzymujemy

$$\nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \nabla_n \nabla_n' \mathcal{G}_{\infty}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.2.22)$$

skąd, przez porównanie z (3.1.12), znajdujemy relację pomiędzy jądrem operatora $\hat{B}(E)$ a mieszaną drugą pochodną normalną funkcji Greena na powierzchni \mathcal{S}

$$\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \nabla_n' \mathcal{G}_{\infty}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \quad (\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}' \in \mathcal{S}). \quad (3.2.23)$$

3.3 Konstrukcja operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$: metoda Kapura–Peierlsa–Wignera

Bezpośredni związek jądra operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ z funkcją Greena jednorodnego zagadnienia brzegowego (3.2.1) i (3.2.2), wyrażony równaniem (3.2.13), sugeruje, że do znalezienia jądra $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ można zastosować metody znane z teorii funkcji Greena. Jeden ze sposobów konstrukcji funkcji $\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ polega na rozwinięciu tej funkcji w biliniowy szereg funkcji własnych jednorodnego zagadnienia brzegowego (3.2.1) i (3.2.2) z parametrem energii w równaniu różniczkowym (lecz *nie* w warunku brzegowym) wybranym jako wartość własna. Do znalezienia reprezentacji macierzowej operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ dla niezależnego od energii hermitowskiego operatora \hat{b} , takie rozwiązanie zostało po raz pierwszy zastosowane przez Wignera [2–4], który wykorzystał idee zawarte we wcześniejszej pracy Kapura i Peierlsa [1]. Celem tego podrozdziału będzie otrzymanie jądra $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ w postaci szeregu biliniowego w oparciu o metodę Kapura–Peierlsa–Wignera. Odpowiemy przy tym pozytywnie na ważne z praktycznego punktu widzenia, lecz na ogół ignorowane w literaturze przedmiotu, pytanie o zbieżność otrzymanego szeregu.

W dalszym ciągu rozważań będziemy wykorzystywali zbiór funkcji $\{\Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r})\}$ zdefiniowanych jako rozwiązania zagadnienia własnego, na które składają się: równanie Schrödingera

$$[\hat{H} - E_{\hat{b}k}(E)]\Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.3.1)$$

z hamiltonianem \hat{H} zdefiniowanym równaniem (3.1.5), oraz warunek brzegowy

$$\nabla_n \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathbf{b}}(E)\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.3.2)$$

Operator $\hat{\mathbf{b}}(E)$ pojawiający się w warunku (3.3.2) jest tym samym operatorem, który występuje w definicji (3.1.24) operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E)$, natomiast liczby $\{E_{\hat{b}k}(E)\}$ są wartościami własnymi postawionego zagadnienia. Ponieważ objętość \mathcal{V} jest skończona, widmo rozpatrywanego zagadnienia jest dyskretne. Ponadto, ze względu na postać hamiltonianu \hat{H} oraz na hermitowskość operatora $\hat{\mathbf{b}}(E)$ względem powierzchniowego iloczynu skalarnego $(|)$, zagadnienie (3.3.1) i (3.3.2) jest samosprężone względem objętościowego iloczynu skalarnego $\langle | \rangle$. W konsekwencji, wszystkie wartości własne $\{E_{\hat{b}k}(E)\}$ są rzeczywiste, a funkcje własne należące do różnych wartości własnych są ortogonalne w sensie

$$\langle \Psi_{\hat{b}k} | \Psi_{\hat{b}k'} \rangle = 0 \quad (E_{\hat{b}k}(E) \neq E_{\hat{b}k'}(E)). \quad (3.3.3)$$

W dalszym ciągu będziemy zakładali, że funkcje własne należące do zdegenerowanych wartości własnych (o ile takie występują) zostały również zortogonalizowane oraz że wszystkie funkcje własne zostały znormalizowane do jedności. Mamy wówczas

$$\langle \Psi_{\hat{b}k} | \Psi_{\hat{b}k'} \rangle = \delta_{kk'}. \quad (3.3.4)$$

Założymy dalej, że operator $\hat{\mathbf{b}}(E)$ występujący w warunku brzegowym (3.3.2) jest taki, że zbiór funkcji własnych $\{\Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r})\}$ jest zupełny w przestrzeni $L^2_{(|)}(\mathcal{V})$. Odpowiednia relacja zupełności ma postać

$$\sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r})\Psi_{\hat{b}k}^*(E, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}). \quad (3.3.5)$$

Zauważmy, że ponieważ na funkcje $\{\Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r})\}$ został narzucony warunek brzegowy (3.3.2), nie wiemy *a priori* czy relacja (3.3.5) jest również spełniona dla punktów \mathbf{r} i \mathbf{r}' leżących na powierzchni \mathcal{S} ograniczającej obszar \mathcal{V} , czy też nie. Problem ten rozważymy w dalszym ciągu tego podrozdziału.

Na mocy założenia o zupełności zbioru funkcji $\{\Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r})\}$, funkcje te można wykorzystać jako bazę do rozwinięcia w szereg funkcji falowej $\Psi(E, \mathbf{r})$ stanowiącej rozwiązanie równania Schrödingera (3.1.4). Oznaczając granicę szeregu przez $\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r})$, mamy

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r})\langle \Psi_{\hat{b}k} | \Psi \rangle \quad (3.3.6)$$

lub jawnie

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r})\Psi_{\hat{b}k}^*(E, \mathbf{r}') \right\} \Psi(E, \mathbf{r}'). \quad (3.3.7)$$

Współczynniki rozwinięcia $\langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle$ występujące w równaniu (3.3.6) można znaleźć w następujący sposób: równanie (3.1.4) mnożymy przez $\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^*(E, \mathbf{r})$, sprzężenie zespolone równania (3.3.1) mnożymy przez $\Psi(E, \mathbf{r})$, odejmujemy otrzymane równania stronami i całkujemy wynik po objętości \mathcal{V} , dostając

$$\langle \hat{H} \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle - \langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \hat{H} \Psi \rangle = [E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E) - E] \langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle. \quad (3.3.8)$$

Korzystając z postaci (3.1.5) hamiltonianu \hat{H} oraz z założonej hermitowskości operatora potencjału \hat{V} , równanie (3.3.8) możemy przepisać w postaci

$$\frac{\hbar^2}{2m} \langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \nabla^2 \Psi \rangle - \frac{\hbar^2}{2m} \langle \nabla^2 \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle = [E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E) - E] \langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle. \quad (3.3.9)$$

Lewą stronę powyższego równania można uprościć, korzystając z twierdzenia całkowego Greena

$$\langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \nabla^2 \Psi \rangle - \langle \nabla^2 \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle = (\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \nabla_n \Psi) - (\nabla_n \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi). \quad (3.3.10)$$

Przekształcając drugą całkę powierzchniową po prawej stronie równania (3.3.10) z pomocą warunku brzegowego (3.3.2) i podstawiając wynik do równania (3.3.9), otrzymujemy

$$\langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}] \Psi)}{E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E) - E}, \quad (3.3.11)$$

skąd wynika, że

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \frac{(\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}] \Psi)}{E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E) - E}. \quad (3.3.12)$$

Ze względu na późniejsze zastosowania, wygodnie jest przepisać ostatnie równanie w jawnej postaci

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho' \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^*(E, \rho')}{E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E) - E} [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \rho'). \quad (3.3.13)$$

Równanie (3.3.13) jest prawdziwe dla dowolnego punktu \mathbf{r} w objętości \mathcal{V} , w szczególności jest ono słuszne dla wszystkich punktów położonych na powierzchni \mathcal{S}

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \rho) = \int_{\mathcal{S}} d^2 \rho' \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \rho) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^*(E, \rho')}{E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E) - E} [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \rho'). \quad (3.3.14)$$

Zdefiniujemy operator całkowy $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E)$ wiążący ze sobą funkcje powierzchniowe $\Psi(E, \rho)$, $\nabla_n \Psi(E, \rho)$ oraz $\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \rho)$ w następujący sposób

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \rho) = \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E) [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \rho). \quad (3.3.15)$$

Operator $\widehat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ jest reprezentowany przez jądro całkowe $\overline{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$, które, jak wynika z równań (3.3.14) i (3.3.15), ma postać

$$\overline{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{b}k}(E) - E}. \quad (3.3.16)$$

Rozważmy teraz problem zbieżności rozwinięcia $\overline{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r})$. Jeśli punkt \boldsymbol{r} leży we wnętrzu objętości \mathcal{V} , na mocy relacji zupełności (3.3.5) i równania (3.3.7) mamy

$$\overline{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}) = \int_{\mathcal{V}} d^3 \boldsymbol{r}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{r}) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{r}') \right\} \Psi(E, \boldsymbol{r}') = \Psi(E, \boldsymbol{r}) \quad (\boldsymbol{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}). \quad (3.3.17)$$

Wykorzystując ten wynik w równaniu (3.3.13), znajdujemy

$$\Psi(E, \boldsymbol{r}) = \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{r}) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{b}k}(E) - E} [\nabla_n - \hat{b}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\boldsymbol{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}). \quad (3.3.18)$$

Relacja (3.3.18) jest słuszna dla punktów \boldsymbol{r} leżących dowolnie blisko powierzchni \mathcal{S} . Funkcja $\Psi(E, \boldsymbol{r})$ spełnia równanie różniczkowo-całkowe drugiego rzędu (3.1.4) i w związku z tym jest ciągła przy przekraczaniu powierzchni \mathcal{S} . Dlatego musi zachodzić

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \lim_{\boldsymbol{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{r}) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{b}k}(E) - E} [\nabla_n - \hat{b}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\boldsymbol{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}). \quad (3.3.19)$$

Porównanie (3.1.27) z (3.3.19) prowadzi do następującej reprezentacji jądra całkowego $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$

$$\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \lim_{\boldsymbol{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{r}) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{b}k}(E) - E} \right\}. \quad (3.3.20)$$

Analiza postaci równania (3.3.20) prowadzi do następującego naturalnego pytania: czy można w tym równaniu dokonać zamiany kolejności operacji $\lim_{\boldsymbol{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}}$ i \sum_k ? Innymi słowy: czy jądra całkowe $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ i $\overline{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ są identyczne? Pokażemy, że w nierelatywistycznej teorii dyskutowanej w tej części pracy odpowiedź na tak postawione pytanie jest twierdząca. W tym celu zauważmy, że powyższy problem jest blisko związany z pytaniem: jaką postać przyjmuje relacja zupełności (3.3.5) dla funkcji $\{\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{r})\}$ w przypadku, gdy którykolwiek z punktów $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'$ leży na powierzchni \mathcal{S} ? Na podstawie analizy równania (3.3.5) oraz pierwszego z równań (A.5) założymy, że spełnione są następujące relacje

$$\sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{r}') = \mathcal{A}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \delta_s^{(1)}(\boldsymbol{r}') \quad (\boldsymbol{r}' \in \mathcal{V}), \quad (3.3.21)$$

$$\sum_k \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{A}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \delta_s^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.3.22)$$

gdzie funkcja delta Diraca $\delta_s^{(1)}(\mathbf{r})$ jest zdefiniowana w uzupełnieniu A , a hermitowskie jądro $\mathcal{A}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$, definiujące powierzchniowy operator całkowy $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$, należy znaleźć. Z definicji (3.3.7) oraz (3.3.21) wynika, że jądro $\mathcal{A}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ wiąże ze sobą funkcje powierzchniowe $\bar{\Psi}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho})$ i $\Psi(E, \boldsymbol{\rho})$ relacją

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}) = \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{A}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (3.3.23)$$

Równanie (3.3.23) można zapisać równoważnie w postaci abstrakcyjnej

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.3.24)$$

Poniżej przedstawimy dwie metody znalezienia jądra $\mathcal{A}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$.

Metoda I

Przemnożmy jądro

$$\sum_{k'} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}^*(E, \mathbf{r}')$$

z prawej strony przez dowolną funkcję własną z bazy $\{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}')\}$ i scałkujemy wynik po objętości \mathcal{V} . Z jednej strony, na mocy relacji ortonormalności (3.3.4), otrzymujemy

$$\int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r}' \left\{ \sum_{k'} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}^*(E, \mathbf{r}') \right\} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}') = \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.3.25)$$

Z drugiej strony, z równania (3.3.21) mamy

$$\int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r}' \left\{ \sum_{k'} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}^*(E, \mathbf{r}') \right\} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}') = \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.3.26)$$

Z równań (3.3.25) i (3.3.26) znajdujemy, że

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.3.27)$$

Ponieważ związek (3.3.27) zachodzi dla dowolnej z funkcji $\{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}\}$, wnioskujemy stąd, iż

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) = \hat{\mathcal{I}} \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{A}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}') \quad (3.3.28)$$

($\hat{\mathcal{I}}$ oznacza tutaj operator jednostkowy w przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$). Stąd oraz z równania (3.3.24) wynika, że

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}) = \Psi(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (3.3.29)$$

to znaczy szereg funkcji własnych (3.3.12) zbiega do funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ również na powierzchni \mathcal{S} .

Metoda II

Znajdziemy równanie różniczkowe spełniane w objętości \mathcal{V} przez funkcję $\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r})$. Działając na obie strony równania (3.3.12) operatorem $\hat{H} - E$, otrzymujemy

$$[\hat{H} - E]\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) (\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}] \Psi) \quad (3.3.30)$$

lub w postaci jawnej

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V} - E \right] \bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}') \right\} [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \end{aligned} \quad (3.3.31)$$

Uwzględniając definicję (3.3.22) jądra $\mathcal{A}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$, możemy zapisać równanie (3.3.31) w następujący sposób

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V} - E \right] \bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \delta_s^{(1)}(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{A}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (3.3.32)$$

lub równoważnie

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V} - E \right] \bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \delta_s^{(1)}(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E) [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.3.33)$$

Tworzymy teraz nieskończenie mały walec o wysokości ε i polu podstawy $d^2 \boldsymbol{\rho}$, przy czym jedna podstawa walca jest styczna do powierzchni \mathcal{S} w punkcie $\boldsymbol{\rho}$, a druga podstawa leży wewnątrz objętości \mathcal{V} . Całkując równanie (3.3.33) po objętości walca, korzystając z twierdzenia Gaussa, zmniejszając następnie wysokość walca do zera, uwzględniając fakt, że we wnętrzu objętości \mathcal{V} szereg $\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r})$ zbiega do funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ i dzieląc wynik przez pole powierzchni podstawy walca, otrzymujemy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla_n \bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}) - \nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho})] = \frac{\hbar^2}{2m} \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E) [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.3.34)$$

Z równania (3.3.34) widać, że pochodna normalna funkcji

$$\Delta_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) - \Psi(E, \mathbf{r}) \quad (3.3.35)$$

w dowolnym punkcie $\boldsymbol{\rho}$ leżącym na powierzchni \mathcal{S} jest skończona, co implikuje, że funkcja $\Delta_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r})$ musi być w punkcie $\boldsymbol{\rho}$ ciągła. Ponieważ jednak wewnątrz objętości \mathcal{V} funkcja ta znika (patrz dyskusja następująca po równaniu (3.3.16)), znajdujemy stąd, że na powierzchni \mathcal{S}

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}) = \Psi(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (3.3.36)$$

co, w połączeniu z równaniem (3.3.24), prowadzi do wyniku (3.3.28), to znaczy do wniosku, że, niezależnie od wartości energii E , operator $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E)$ jest operatorem jednostkowym.

Wynik zawarty w równaniach (3.3.29) oraz (3.3.36) pozwala nam na przepisanie równania (3.3.15) w postaci

$$\Psi(E, \rho) = \hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E) [\nabla_n - \hat{b}(E)] \Psi(E, \rho). \quad (3.3.37)$$

Z porównania (3.1.26) z (3.3.37) wynika, że operatory $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ są identyczne

$$\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E) = \hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E). \quad (3.3.38)$$

Oznacza to, że jądra obu operatorów muszą być takie same i po skorzystaniu z równania (3.3.16) otrzymujemy następującą reprezentację^{3D} jądra $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho')$

$$\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\Psi_{\hat{b}k}(E, \rho) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \rho')}{E_{\hat{b}k}(E) - E}. \quad (3.3.39)$$

Równanie (3.3.39) oznacza, że operacje \sum_k i $\lim_{r \rightarrow \rho}$ w równaniu (3.3.20) rzeczywiście komutują. Dodajmy jeszcze, że ze wzoru (3.3.39) oraz z rzeczywistości wartości własnych $\{E_{\hat{b}k}(E)\}$ zagadnienia (3.3.1) i (3.3.2) wynika, że jądro $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho')$ posiada własność symetrii

$$\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho') = \mathcal{R}_{\hat{b}}^*(E, \rho', \rho), \quad (3.3.40)$$

co zgadza się z naszym wcześniejszym stwierdzeniem (patrz argumentacja prowadząca do równania (3.1.25)), że operator $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ jest hermitowski.

Znając postać jądra $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho')$, możemy znaleźć macierz $R_b(E)$. Rzutując równanie (3.3.39) z lewej i z prawej strony na powierzchniowe funkcje bazowe $\{\Phi_i(\rho)\}$, otrzymujemy dobrze znany wynik dla $R_b(E)$ (patrz, na przykład, [89])

$$R_b(E) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{P_{bk}(E) P_{bk}^\dagger(E)}{E_{bk}(E) - E}, \quad (3.3.41)$$

gdzie $\{P_{bk}(E)\}$ są macierzami jednokolumnowymi z elementami $\{P_{i,bk}(E) = (\Phi_i | \Psi_{\hat{b}k})\}$, a $\{P_{bk}^\dagger(E)\}$ są macierzami jednowierszowymi z elementami $\{P_{i,bk}^*(E) = (\Psi_{\hat{b}k} | \Phi_i)\}$. Należy zaznaczyć, że szybkość, z jaką szeregi stojące po prawej stronie równań (3.3.39) i (3.3.41) zbiegają do swych granic, może zależeć w sposób istotny zarówno od wartości energii E , jak i od konkretnego wyboru operatora $\hat{b}(E)$.

Na zakończenie tej części naszych rozważań zwrócimy jeszcze uwagę, że z równań (3.3.21), (3.3.22) oraz z drugiego z równań (3.3.28) otrzymuje się następujące rozszerzenie relacji zupełności (3.3.5) na przypadek, gdy jeden z punktów leży na powierzchni \mathcal{S}

$$\sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \rho') \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \mathbf{r}) = \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{b}k}^*(E, \rho') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \rho') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}, \rho' \in \mathcal{S}). \quad (3.3.42)$$

^{3D} Reprezentacja (3.3.39) *nie* jest reprezentacją spektralną jądra $\mathcal{R}_{\hat{b}}(E, \rho, \rho')$!

3.4 Konstrukcja zasad wariacyjnych związanych z nierelatywistyczną teorią R -macierzy

Z teorii rachunku wariacyjnego wiadomo [136], że wartości własne liniowego operatora hermitowskiego można zdefiniować jako wartości stacjonarne pewnego funkcjonału przyjmującego wartości rzeczywiste dla dowolnej funkcji próbnej, przy czym funkcjonal jest stacjonarny dla funkcji próbnych będących funkcjami własnymi danego operatora. Bazując na jednolitej metodzie konstrukcji zasad wariacyjnych omówionej w pracach Pomraninga [126], Gerjuoya, Rau i Sprucha [48] oraz Stacey [127], w podrozdziałach 3.4.1 i 3.4.2 pokażemy, w jaki sposób przebiega konstrukcja odpowiednich funkcjonałów dla wartości własnych operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{R}(E)$. Opierając się na tej samej metodzie, w podrozdziałach 3.4.3–3.4.5 omówimy szczegółowo konstrukcję biliniowych zasad wariacyjnych dla elementów macierzowych operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{R}_6(E)$ oraz ilorazowych biliniowych zasad wariacyjnych dla odwrotności tych elementów macierzowych.

3.4.1 Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{B}(E)$

W tym podrozdziale za cel postawimy sobie skonstruowanie zasady wariacyjnej dla wartości własnych $\{b_i(E)\}$ operatora $\hat{B}(E)$, które są liczbami rzeczywistymi zdefiniowanymi bezpośrednio równaniami (3.1.15) i (3.1.16) oraz pośrednio (gdyż wymienione równania zawierają $\Psi_i(E, \rho)$ lub $\nabla_n \Psi_i(E, \rho)$) równaniem (3.1.14). Z punktu widzenia teorii rachunku wariacyjnego, jest to zagadnienie wariacyjne z więzami. Tego typu zadania rozwiązuje się, wykorzystując metodę nieoznaczonych współczynników lub funkcji Lagrange'a [137]. Postępując zgodnie z sugestią Raşeeva [35], zastosujemy przepis podany przez Gerjuoya, Rau i Sprucha [48] (patrz również [126, 127]) i utworzymy funkcjonal^{3E}

$$F[\bar{b}, \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \bar{\Psi}] = \bar{b} + (\bar{\lambda} | \nabla_n \bar{\Psi} - \bar{b} \bar{\Psi}) + \langle \bar{\Lambda} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle. \quad (3.4.1)$$

W równaniu (3.4.1) \bar{b} jest pewną liczbą (niekoniecznie rzeczywistą), $\bar{\lambda}(\rho)$ jest dowolną odpowiednio regularną funkcją zdefiniowaną na powierzchni \mathcal{S} , a $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ są dowolnymi odpowiednio regularnymi funkcjami zdefiniowanymi w objętości \mathcal{V} . Pomocnicze funkcje $\bar{\lambda}(\rho)$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ pełnią rolę nieoznaczonych funkcji Lagrange'a uwzględniających więzy odpowiednio (3.1.15) i (3.1.14). Jeśli funkcja $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ jest równa jednej z funkcji własnych $\Psi(E, \mathbf{r})$ operatora $\hat{B}(E)$ i jeżeli jednocześnie liczba \bar{b} jest równa odpowiedniej wartości własnej $b(E)$, wówczas

$$F[b(E), \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \Psi] = b(E), \quad (3.4.2)$$

niezależnie od postaci funkcji Lagrange'a $\bar{\lambda}(\rho)$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$. Z ogólnej teorii konstrukcji zasad wariacyjnych wiadomo [48], że istnieją takie funkcje $\lambda(\rho)$ i $\Lambda(\mathbf{r})$, iż funkcjonal (3.4.1) jest stacjonarny dla nieskończenie małych wariacji parametru \bar{b} i funkcji $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ wokół $b(E)$ i $\Psi(E, \mathbf{r})$,

$$\delta b = \bar{b} - b(E), \quad \delta \Psi(\mathbf{r}) = \bar{\Psi}(\mathbf{r}) - \Psi(E, \mathbf{r}), \quad (3.4.3)$$

^{3E} Dla przejrzystości, w dalszym ciągu tego podrozdziału będziemy opuszczali indeksy numerujące wartości własne i funkcje własne operatora $\hat{B}(E)$ oraz związane z nimi wielkości.

oraz dla nieskończenie małych wariacji funkcji Lagrange'a $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ wokół funkcji $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\mathbf{r})$,

$$\delta\lambda(\boldsymbol{\rho}) = \bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho}) - \lambda(\boldsymbol{\rho}), \quad \delta\Lambda(\mathbf{r}) = \bar{\Lambda}(\mathbf{r}) - \Lambda(\mathbf{r}), \quad (3.4.4)$$

to znaczy

$$\delta F[b, \lambda, \Lambda, \Psi] = 0. \quad (3.4.5)$$

Znajdziemy teraz funkcje $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\Lambda(\mathbf{r})$ i pokażemy, że są one blisko związane z funkcją $\Psi(E, \mathbf{r})$. Wariując równanie (3.4.1), mamy

$$\begin{aligned} \delta F[b, \lambda, \Lambda, \Psi] &= \delta b + (\delta\lambda|\nabla_n\Psi - b\Psi) - \delta b(\lambda|\Psi) + (\lambda|\nabla_n\delta\Psi - b\delta\Psi) \\ &+ \langle\delta\Lambda|[\hat{H} - E]\Psi\rangle + \langle\Lambda|[\hat{H} - E]\delta\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

Ze względu na równania (3.1.15) i (3.1.14), drugi i piąty wyraz po prawej stronie są równe zero i w konsekwencji równanie (3.4.6) upraszcza się do postaci

$$\delta F[b, \lambda, \Lambda, \Psi] = \delta b[1 - (\lambda|\Psi)] + (\lambda|\nabla_n\delta\Psi - b\delta\Psi) + \langle\Lambda|[\hat{H} - E]\delta\Psi\rangle. \quad (3.4.7)$$

Wykorzystując twierdzenie całkowe Greena, ostatni człon po prawej stronie powyższego równania można przekształcić w następujący sposób

$$\langle\Lambda|[\hat{H} - E]\delta\Psi\rangle = \langle[\hat{H} - E]\Lambda|\delta\Psi\rangle + \frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_n\Lambda|\delta\Psi) - \frac{\hbar^2}{2m}(\Lambda|\nabla_n\delta\Psi), \quad (3.4.8)$$

co pozwala nam przepisać pierwszą wariację funkcjonału (3.4.1) w postaci

$$\begin{aligned} \delta F[b, \lambda, \Lambda, \Psi] &= \delta b[1 - (\lambda|\Psi)] + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_n\Lambda - b\lambda\right|\delta\Psi) + \left(\lambda - \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda\right|\nabla_n\delta\Psi) \\ &+ \langle[\hat{H} - E]\Lambda|\delta\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

Warunkiem wystarczającym na to, by spełniona była relacja (3.4.5) jest, by zachodziły związki

$$1 - (\lambda|\Psi) = 0, \quad (3.4.10)$$

$$[\hat{H} - E]\Lambda(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.4.11)$$

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) - \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.12)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_n\Lambda(\boldsymbol{\rho}) - b(E)\lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.4.13)$$

Z ostatnich dwóch równań wynika, że

$$\nabla_n\Lambda(\boldsymbol{\rho}) - b(E)\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (3.4.14)$$

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.15)$$

Porównanie (3.4.11) i (3.4.14) z (3.1.14) i (3.1.15) prowadzi do wniosku, że funkcja $\Lambda(\mathbf{r})$ spełnia dokładnie to samo liniowe równanie różniczkowo-całkowe w objętości \mathcal{V} oraz dokładnie ten sam warunek brzegowy na powierzchni \mathcal{S} , co funkcja $\Psi(E, \mathbf{r})$. W związku z tym możemy przyjąć

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \eta \Psi(E, \mathbf{r}), \quad (3.4.16)$$

gdzie η jest stałą, którą należy wyznaczyć. Aby znaleźć η , wykorzystamy równanie (3.4.15) oraz warunek (3.4.10), otrzymując

$$\eta = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Psi|\Psi)}, \quad (3.4.17)$$

skąd wynika, że

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Psi|\Psi)} \Psi(E, \mathbf{r}) \quad (3.4.18)$$

i

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(\Psi|\Psi)} \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.19)$$

Zależności (3.4.18) i (3.4.19) pozwalają nam zmniejszyć liczbę argumentów funkcjonału (3.4.1). W tym celu w dalszym ciągu ograniczymy się do rozważania tylko takich funkcji Lagrange'a $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ i $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$, które związane są z funkcją $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ relacjami

$$\bar{\Lambda}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})} \bar{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (3.4.20)$$

$$\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})} \bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.21)$$

analogicznymi do relacji (3.4.18) i (3.4.19) wiążących funkcje $\Lambda(\mathbf{r})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Psi(E, \mathbf{r})$. Uwzględniając relacje (3.4.20) i (3.4.21), otrzymujemy następującą postać funkcjonału (3.4.1)

$$F[\bar{\Psi}] = \frac{(\bar{\Psi}|\nabla_n \bar{\Psi})}{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})}. \quad (3.4.22)$$

Należy zauważyć, że pomimo iż nie czyniliśmy żadnych założeń co do związku pomiędzy liczbą \bar{b} a funkcją $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$, funkcjonał (3.4.22) nie zależy od \bar{b} .

Jak wynika z przedstawionej wyżej metody konstrukcji, funkcjonał (3.4.22) jest stacjonarny dla dowolnych infinitezymalnie małych wariacji $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ wokół $\Psi(E, \mathbf{r})$, a wartość stacjonarna tego funkcjonału, osiągnięta dla $\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \Psi(E, \mathbf{r})$, jest równa wartości własnej $b(E)$ operatora $\hat{B}(E)$ odpowiadającej funkcji własnej $\Psi(E, \boldsymbol{\rho})$. Zauważmy ponadto, że zastosowanie twierdzenia całkowego Greena do całki objętościowej po prawej stronie równania (3.4.22) przekształca to równanie do postaci

$$F[\bar{\Psi}] = \frac{(\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi})}{(\bar{\Psi} | \bar{\Psi})} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle [\hat{H} - E] \bar{\Psi} | \bar{\Psi} \rangle}{(\bar{\Psi} | \bar{\Psi})}. \quad (3.4.23)$$

Porównanie (3.4.23) z (3.4.22) prowadzi do wniosku, że

$$F[\bar{\Psi}] = F^*[\bar{\Psi}], \quad (3.4.24)$$

co oznacza, że funkcjonal (3.4.22) jest rzeczywisty dla dowolnej funkcji próbnej $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$. Jest to cecha pożądana, gdyż wartości przyjmowane przez ten funkcjonal są oszacowaniami rzeczywistych wartości własnych $b(E)$.

Podsumowując wyniki uzyskane w tym podrozdziale, stwierdzamy, że skonstruowaliśmy następującą zasadę wariacyjną dla wartości własnych operatora $\hat{B}(E)$

$$b(E) = \text{stat}_{\bar{\Psi}} \left\{ \frac{(\bar{\Psi}|\nabla_n\bar{\Psi})}{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})} \right\}, \quad (3.4.25)$$

przy czym od funkcji próbnych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ wymagamy jedynie, aby były ciągle wraz z pierwszymi pochodnymi w objętości \mathcal{V} (w szczególności, funkcje $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ nie muszą być unormowane).

Zasada wariacyjna (3.4.25) została po raz pierwszy podana (bez opisu konstrukcji) przez Kohna [16]. Zasada ta, uogólniona do postaci dającej się zastosować do układów wieloelektronowych, jest intensywnie wykorzystywana w fizyce atomowej, przede wszystkim w badaniach fotojonizacji i fotoabsorpcji układów atomowych [36].

Zasada (3.4.25) jest najprostszą, ale nie jedyną, spośród zasad dla wartości własnych operatora $\hat{B}(E)$. Przykładem alternatywnej zasady wariacyjnej, również prowadzącej do rzeczywistych oszacowań wartości własnych, jest zasada

$$b(E) = \text{stat}_{\bar{\Psi}} \left\{ \frac{(\nabla_n\bar{\Psi}|\nabla_n\bar{\Psi})}{(\bar{\Psi}|\nabla_n\bar{\Psi})} \left[\frac{(\bar{\Psi}|\nabla_n\bar{\Psi})}{(\nabla_n\bar{\Psi}|\nabla_n\bar{\Psi})} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\nabla_n\bar{\Psi}|\nabla_n\bar{\Psi})} \right] \frac{(\nabla_n\bar{\Psi}|\nabla_n\bar{\Psi})}{(\nabla_n\bar{\Psi}|\bar{\Psi})} \right\}, \quad (3.4.26)$$

którą można otrzymać, biorąc za punkt wyjścia, zamiast funkcjonału (3.4.1), funkcjonal

$$F[\bar{b}, \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \bar{\Psi}] = \bar{b} + (\bar{\lambda}|\bar{b}^{-1}\nabla_n\bar{\Psi} - \bar{\Psi}) + \langle \bar{\Lambda} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle \quad (3.4.27)$$

i szukając następnie optymalnych zależności pomiędzy \bar{b} , $\bar{\lambda}(\rho)$, $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ w sposób analogiczny do przedstawionego powyżej. Porównanie obu zasad (3.4.25) i (3.4.26) prowadzi jednak do natychmiastowego wniosku, że zdecydowanie prostsza, a więc i przydatniejsza w zastosowaniach, jest zasada (3.4.25).

W rozdziale 6 rozważymy możliwość wykorzystania funkcji próbnych typu Rayleigha–Ritza do znajdowania przybliżonych wartości własnych operatora $\hat{B}(E)$ w oparciu o zasadę wariacyjną (3.4.25).

3.4.2 Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$

W tym podrozdziale skonstruujemy funkcjonal, którego wartości stacjonarne są wartościami własnymi operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$. Punktem wyjścia naszych rozważań będzie obserwacja, że wartości własne operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$ są odwrotnościami wartości

własnych operatora $\hat{B}(E)$ i że warunek brzegowy (3.1.15) może zostać przepisany w postaci^{3F}

$$\nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) - [b^{-1}(E)]^{-1} \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = 0. \quad (3.4.28)$$

Rozważmy funkcjonal

$$F[\bar{b}^{-1}, \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \bar{\Psi}] = \bar{b}^{-1} + (\bar{\lambda} |\nabla_n \bar{\Psi} - (\bar{b}^{-1})^{-1} \bar{\Psi}) + \langle \bar{\Lambda} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle, \quad (3.4.29)$$

w którym \bar{b}^{-1} jest pewną liczbą (niekoniecznie rzeczywistą), $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ jest odpowiednio regularną funkcją zdefiniowaną na powierzchni \mathcal{S} , a $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ są odpowiednio regularnymi funkcjami zdefiniowanymi w objętości \mathcal{V} . Pomocnicze funkcje $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ są funkcjami Lagrange'a dla rozpatrywanego przez nas zagadnienia i uwzględniają odpowiednio warunki (3.4.28) oraz (3.1.14) definiujące wartości własne $b(E)$ i funkcje $\Psi(E, \mathbf{r})$. Pierwsza wariacja funkcjonału (3.4.29), będąca wynikiem nieskończenie małych wariacji jego argumentów odpowiednio wokół $b^{-1}(E)$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda(\mathbf{r})$ oraz $\Psi(E, \mathbf{r})$, gdzie $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\mathbf{r})$ są pewnymi, na razie dowolnymi, funkcjami, jest równa

$$\delta F[b^{-1}, \lambda, \Lambda, \Psi] = \delta b^{-1} + \delta b^{-1} b^2 (\lambda | \Psi) + (\lambda | \nabla_n \delta \Psi - b \delta \Psi) + \langle \Lambda | [\hat{H} - E] \delta \Psi \rangle \quad (3.4.30)$$

(zarówno tutaj, jak i poniżej, δb^{-1} oznacza $\delta(b^{-1})$, a *nie* $(\delta b)^{-1}$). Równanie (3.4.30), po zastosowaniu wzoru całkowego Greena, może zostać przepisane w postaci

$$\begin{aligned} \delta F[b^{-1}, \lambda, \Lambda, \Psi] = & \delta b^{-1} [1 + b^2 (\lambda | \Psi)] + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \Lambda - b \lambda \middle| \delta \Psi \right) \\ & + \left(\lambda - \frac{\hbar^2}{2m} \Lambda \middle| \nabla_n \delta \Psi \right) + \langle [\hat{H} - E] \Lambda | \delta \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.4.31)$$

Dobierzemy teraz funkcje $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\mathbf{r})$ w taki sposób, aby funkcjonal (3.4.29) był stacjonarny dla nieskończenie małych wariacji jego argumentów wokół $b^{-1}(E)$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda(\mathbf{r})$ oraz $\Psi(E, \mathbf{r})$

$$\delta F[b^{-1}, \lambda, \Lambda, \Psi] = 0. \quad (3.4.32)$$

Z postaci równania (3.4.31) widać, że w tym celu wystarczy przyjąć

$$1 + b^2(E) (\lambda | \Psi) = 0, \quad (3.4.33)$$

$$[\hat{H} - E] \Lambda(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.4.34)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \Lambda(\boldsymbol{\rho}) - b(E) \lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.35)$$

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.4.36)$$

^{3F} Dla przejrzystości, w tym podrozdziale będziemy opuszczali indeksy przy wartościach własnych i funkcjach własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$ oraz przy związanych z nimi wielkościach.

Z równań (3.4.35) i (3.4.36) wynika warunek brzegowy spełniany na powierzchni \mathcal{S} przez funkcję $\Lambda(\boldsymbol{\rho})$

$$\nabla_n \Lambda(\boldsymbol{\rho}) - b(E)\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (3.4.37)$$

oraz relacja pomiędzy funkcją $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ a pochodną normalną funkcji $\Lambda(\boldsymbol{r})$ na powierzchni \mathcal{S}

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{\hbar^2}{2m} b^{-1}(E) \nabla_n \Lambda(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.38)$$

Z porównania (3.4.34) i (3.4.37) z (3.1.14) i (3.1.15) wnioskujemy, że funkcję Lagrange'a $\Lambda(\boldsymbol{r})$ można wybrać w postaci

$$\Lambda(\boldsymbol{r}) = \eta \Psi(E, \boldsymbol{r}), \quad (3.4.39)$$

gdzie stałą η należy wyznaczyć. Wykorzystując równania (3.4.33), (3.4.36) oraz (3.4.39), znajdujemy

$$\eta = -\frac{2m}{\hbar^2} b^{-2}(E) \frac{1}{(\Psi|\Psi)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\nabla_n \Psi|\nabla_n \Psi)}, \quad (3.4.40)$$

skąd wynika, że

$$\Lambda(\boldsymbol{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\nabla_n \Psi|\nabla_n \Psi)} \Psi(E, \boldsymbol{r}) \quad (3.4.41)$$

oraz, po skorzystaniu z równań (3.4.38) i (3.4.41),

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{(\Psi|\Psi)}{(\Psi|\nabla_n \Psi)(\nabla_n \Psi|\nabla_n \Psi)} \nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.42)$$

Przy wyprowadzeniu równania (3.4.42) uwzględniliśmy, że

$$b^{-1}(E) = \frac{(\Psi|\Psi)}{(\Psi|\nabla_n \Psi)} = \frac{(\Psi|\Psi)}{(\nabla_n \Psi|\Psi)}. \quad (3.4.43)$$

W dalszych rozważaniach założymy, że liczba \bar{b}^{-1} jest związana z funkcją $\bar{\Psi}(\boldsymbol{r})$ relacją (porównaj (3.4.43))

$$\bar{b}^{-1} = \frac{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})}{(\nabla_n \bar{\Psi}|\bar{\Psi})} \quad (3.4.44)$$

i ograniczymy się do rozpatrywania tylko takich funkcji Lagrange'a $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r})$, które można zapisać w postaciach (porównaj odpowiednio (3.4.42) oraz (3.4.41))

$$\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{(\bar{\Psi}|\bar{\Psi})}{(\bar{\Psi}|\nabla_n \bar{\Psi})(\nabla_n \bar{\Psi}|\nabla_n \bar{\Psi})} \nabla_n \bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.45)$$

$$\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\nabla_n \bar{\Psi}|\nabla_n \bar{\Psi})} \bar{\Psi}(\boldsymbol{r}). \quad (3.4.46)$$

W tym miejscu należy uczynić dwie uwagi. Po pierwsze, oszacowanie (3.4.44) dla $b^{-1}(E)$ w ogólności nie będzie rzeczywiste, chociaż $b^{-1}(E)$ jest liczbą rzeczywistą. Po drugie, jeśli funkcja próbna $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ różni się od funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ o wielkość małą pierwszego rzędu (innymi słowy, jeżeli $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ jest rozsądnym oszacowaniem funkcji własnej $\Psi(E, \mathbf{r})$), wówczas oczywiście liczba \bar{b}^{-1} oraz funkcje $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ zdefiniowane powyżej również będą różniły się od $b^{-1}(E)$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\mathbf{r})$, zdefiniowanych odpowiednio równaniami (3.4.43), (3.4.42) i (3.4.41), o wielkości małe pierwszego rzędu.

Podstawienie szczególnych postaci \bar{b}^{-1} , $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ danych równaniami (3.4.44)–(3.4.46) do wzoru (3.4.29) prowadzi do następującej postaci funkcjonału $F[\bar{\Psi}]$, zależnej jedynie od funkcji $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$

$$F[\bar{\Psi}] = \frac{(\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi})}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})}. \quad (3.4.47)$$

Ten sam funkcjonał można otrzymać, jeżeli zamiast \bar{b}^{-1} zdefiniowanego równaniem (3.4.44) użyć

$$\bar{b}^{-1} = \frac{(\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi})}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})}, \quad (3.4.48)$$

pozostawiając przy tym bez zmian funkcje Lagrange'a (3.4.45) i (3.4.46).

Wykorzystując twierdzenie Greena do przekształcenia prawej strony równania (3.4.47), znajdujemy

$$F[\bar{\Psi}] = \frac{(\bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle [\hat{H} - E] \bar{\Psi} | \bar{\Psi} \rangle}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})}. \quad (3.4.49)$$

Porównanie tego wyniku z (3.4.47) pokazuje, że funkcjonał $F[\bar{\Psi}]$, podobnie jak funkcjonał (3.4.22), jest rzeczywisty dla dowolnej funkcji próbnej $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$,

$$F[\bar{\Psi}] = F^*[\bar{\Psi}]. \quad (3.4.50)$$

Podsumowując, znaleźliśmy następującą zasadę wariacyjną dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$ (równoważnie — dla odwrotności wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$)

$$b^{-1}(E) = \text{stat}_{\bar{\Psi}} \left\{ \frac{(\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi})}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})} \right\}, \quad (3.4.51)$$

przy czym wartości stacjonarne są przyjmowane dla tych funkcji $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$, które są funkcjami własnymi operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$. Zasada (3.4.51) jest analogiczna do zasady wariacyjnej Kohna (3.4.25) dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$.

W zakończeniu podrozdziału 3.4.1 wspomnieliśmy, że zasada Kohna (3.4.25) jest najprostszą, ale nie jedyną, zasadą wariacyjną dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ i podaliśmy przykład innej, bardziej złożonej, zasady dającej również rzeczywiste oszacowania $b(E)$. Podobnie, prócz zasady (3.4.51) istnieje nieskończenie

wiele zasad wariacyjnych dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$. Na przykład, przyjmując jako punkt wyjścia, zamiast funkcjonału (3.4.29), funkcjonał

$$F[\bar{b}^{-1}, \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \bar{\Psi}] = \bar{b}^{-1} + \left(\bar{\lambda} \left| \bar{b}^{-1} \nabla_n \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \right. \right) + \langle \bar{\Lambda} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle, \quad (3.4.52)$$

otrzymuje się następującą zasadę wariacyjną

$$b^{-1}(E) = \text{stat}_{\bar{\Psi}} \left\{ \frac{(\bar{\Psi} | \bar{\Psi})}{(\bar{\Psi} | \nabla_n \bar{\Psi})} \left[\frac{(\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi})}{(\bar{\Psi} | \bar{\Psi})} - \frac{2m \langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{\hbar^2 (\bar{\Psi} | \bar{\Psi})} \right] \frac{(\bar{\Psi} | \bar{\Psi})}{(\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi})} \right\}, \quad (3.4.53)$$

również prowadzącą do rzeczywistych oszacowań wartości $b^{-1}(E)$. Zasada (3.4.51) ma jednak tę przewagę nad zasadą (3.4.53) i nad innymi zasadami, iż użyty w niej funkcjonał ma najprostszą możliwą postać.

W rozdziale 6 przedyskutujemy zastosowanie funkcji próbnych typu Rayleigha–Ritza do znajdowania przybliżonych wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$, wykorzystując zasadę wariacyjną (3.4.51).

3.4.3 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$ i ich odwrotności

W tym podrozdziale omówimy sposoby konstrukcji zasad wariacyjnych dla elementów macierzowych $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi')$ operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$ pomiędzy dwiema dowolnymi odpowiednio regularnymi funkcjami $\Phi(\rho)$ i $\Phi'(\rho)$ zdefiniowanymi na powierzchni \mathcal{S} oraz dla odwrotności tych elementów macierzowych, $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi')^{-1}$. Podkreślamy, że nie wymagamy, aby funkcje $\Phi(\rho)$ i $\Phi'(\rho)$ były ortogonalne względem powierzchniowego iloczynu skalarnego $(|)$.

Konstrukcję rozpoczniemy od wprowadzenia dwóch funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ należących do zbioru $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$ (patrz definicja następująca po równaniu (3.1.6)) i spełniających na powierzchni \mathcal{S} *niejednorodne mieszane* warunki brzegowe^{3g}

$$[\nabla_n - \hat{\mathfrak{b}}(E)] \Psi(E, \rho) = \Phi(\rho), \quad [\nabla_n - \hat{\mathfrak{b}}(E)] \Psi'(E, \rho) = \Phi'(\rho). \quad (3.4.54)$$

Ponieważ z założenia funkcje $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ należą do $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$, korzystając z równań (3.1.10) oraz (3.1.24), relacje (3.4.54) można równoważnie przepisać w postaci

$$\Psi(E, \rho) = \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) \Phi(\rho), \quad \Psi'(E, \rho) = \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) \Phi'(\rho). \quad (3.4.55)$$

W pierwszej kolejności naszym celem będzie skonstruowanie funkcjonału, którego wartość stacjonarna jest równa wartości elementu macierzowego $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi')$. Potraktujemy równania (3.1.4), (3.4.54) i (3.4.55) jako więzy i będziemy szukali funkcjonału w postaci

$$F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}, \bar{\lambda}, \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \bar{\Psi}'] = (\Phi | \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi') + (\bar{\lambda} | \bar{\Psi}' - \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi') + (\bar{\Lambda} | \nabla_n \bar{\Psi}' - \hat{\mathfrak{b}} \bar{\Psi}' - \Phi') + \langle \bar{\Lambda} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle. \quad (3.4.56)$$

^{3g} Funkcje $\Psi(E, \rho)$ używane w tym podrozdziale *nie* są, w ogólności, funkcjami własnymi operatorów $\hat{B}(E)$ oraz $\hat{\mathcal{R}}(E)$, do oznaczania których w dwóch poprzednich podrozdziałach używaliśmy tego samego symbolu.

W równaniu (3.4.56) $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}$ jest pewnym operatorem całkowym^{3H} (niekoniecznie hermitowskim) działającym na funkcje zdefiniowane na powierzchni \mathcal{S} , $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ są odpowiednio regularnymi i poza tym całkowicie dowolnymi funkcjami zdefiniowanymi na powierzchni \mathcal{S} , podczas gdy $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ są dowolnymi odpowiednio regularnymi funkcjami zdefiniowanymi w objętości \mathcal{V} . Funkcje $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ są funkcjami Lagrange'a dla rozważanego przez nas zagadnienia. Przypuśćmy teraz, że funkcjonał (3.4.56) zostaje poddany infinitesimalnie małym wariacjom jego argumentów $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}$, $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$, $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ wokół $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$, $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda(\mathbf{r})$, $\Psi'(E, \mathbf{r})$, gdzie $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\mathbf{r})$ są pewnymi, jak na razie dowolnymi, funkcjami. Pierwsza wariacja funkcjonału jest równa

$$\begin{aligned} \delta F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] &= (\Phi | \delta \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi') + (\chi | \delta \Psi' - \delta \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi') + (\lambda | \nabla_n \delta \Psi' - \hat{\mathfrak{b}} \delta \Psi') \\ &+ \langle \Lambda | [\hat{H} - E] \delta \Psi' \rangle, \end{aligned} \quad (3.4.57)$$

gdzie wykorzystaliśmy fakt, że człony zawierające wariacje $\delta \chi(\boldsymbol{\rho})$, $\delta \lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\delta \Lambda(\mathbf{r})$ muszą zniknąć, aby spełnione były warunki (3.1.4), (3.4.54) oraz (3.4.55). Zastosowanie twierdzenia całkowego Greena do ostatniego członu po prawej stronie równania (3.4.57) pozwala przepisać to równanie w postaci

$$\begin{aligned} \delta F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] &= (\Phi - \chi | \delta \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi') + \left(\chi - \hat{\mathfrak{b}} \lambda + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \Lambda \middle| \delta \Psi' \right) \\ &+ \left(\lambda - \frac{\hbar^2}{2m} \Lambda \middle| \nabla_n \delta \Psi' \right) + \langle [\hat{H} - E] \Lambda | \delta \Psi' \rangle. \end{aligned} \quad (3.4.58)$$

Dobierzemy teraz w taki sposób funkcje $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\Lambda(\mathbf{r})$, aby zniknęła pierwsza wariacja funkcjonału (3.4.56), to znaczy

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = 0. \quad (3.4.59)$$

Jak wynika z postaci prawej strony równania (3.4.58), warunkiem dostatecznym zachodzenia (3.4.59) jest, aby spełnione były następujące relacje

$$[\hat{H} - E] \Lambda(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.4.60)$$

$$\Phi(\boldsymbol{\rho}) - \chi(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.61)$$

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) - \hat{\mathfrak{b}}(E) \lambda(\boldsymbol{\rho}) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}) \quad (3.4.62)$$

oraz

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.4.63)$$

Jako konsekwencję równań (3.4.61)–(3.4.63), otrzymujemy

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.64)$$

^{3H} Operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}$ nie należy mylić z operatorem $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$ o jądrze zdefiniowanym równaniem (3.3.16).

$$[\nabla_n - \hat{b}(E)]\Lambda(\rho) = -\frac{2m}{\hbar^2}\Phi(\rho). \quad (3.4.65)$$

Z równań (3.4.60) i (3.1.4) wynika, że w objętości \mathcal{V} funkcja $\Lambda(\mathbf{r})$ jest rozwiązaniem tego samego równania, co funkcja falowa $\Psi(E, \mathbf{r})$. Na powierzchni \mathcal{S} funkcja $\Lambda(\mathbf{r})$ spełnia natomiast niejednorodny mieszany warunek brzegowy (3.4.65), który różni się od warunku (3.4.54) narzuconego na funkcję $\Psi(E, \mathbf{r})$ jedynie czynnikiem $-2m/\hbar^2$ w członie niejednorodnym. Oznacza to, że możemy przyjąć

$$\Lambda(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\Psi(E, \mathbf{r}), \quad (3.4.66)$$

skąd wynika, że

$$\lambda(\rho) = -\Psi(E, \rho) \quad (3.4.67)$$

(porównaj (3.4.63)).

W dalszym ciągu dyskusji ograniczymy się do rozważania jedynie takich funkcji Lagrange'a $\bar{\chi}(\rho)$, $\bar{\lambda}(\rho)$ oraz $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$, które związane są z funkcjami $\Phi(\rho)$ i $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ relacjami analogicznymi do związków (3.4.64), (3.4.66) i (3.4.67) łączących $\chi(\rho)$, $\lambda(\rho)$, $\Lambda(\mathbf{r})$ z $\Phi(\rho)$ i $\Psi(E, \mathbf{r})$

$$\bar{\chi}(\rho) = \Phi(\rho), \quad (3.4.68)$$

$$\bar{\lambda}(\rho) = -\bar{\Psi}(\rho), \quad (3.4.69)$$

$$\bar{\Lambda}(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\bar{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (3.4.70)$$

Oczywiście, jeżeli funkcja $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ różni się od funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ o wielkość małą pierwszego rzędu, funkcje Lagrange'a $\bar{\lambda}(\rho)$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ określone powyżej będą różniły się od $\lambda(\rho)$ i $\Lambda(\mathbf{r})$ zdefiniowanych odpowiednio równaniami (3.4.67) i (3.4.66) także o wielkości małe pierwszego rzędu.

Podstawiając wybrane przez nas szczególne postacie funkcji Lagrange'a (3.4.68)–(3.4.70) do równania (3.4.56), otrzymujemy funkcjonal

$$F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}'] = (\Phi|\bar{\Psi}') + (\bar{\Psi}|\Phi') - (\bar{\Psi}|\nabla_n - \hat{b}|\bar{\Psi}') - \frac{2m}{\hbar^2}\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle \quad (3.4.71)$$

niezależny od operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}$. Stosując twierdzenie Greena do całki objętościowej stojącej po prawej stronie powyższego równania, można sprawdzić, że funkcjonal (3.4.71) posiada własność symetrii

$$F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}'] = F^*[\Phi', \Phi; \bar{\Psi}', \bar{\Psi}]. \quad (3.4.72)$$

Własność ta jest pożądana, gdyż wartości liczbowe funkcjonałów $F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}']$ oraz $F[\Phi', \Phi; \bar{\Psi}', \bar{\Psi}]$ są oszacowaniami elementów macierzowych odpowiednio $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}\Phi')$ oraz $(\Phi'|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}\Phi) = (\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}\Phi')^*$ dla *hermitowskiego* operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$.

Funkcjonał (3.4.71) jest stacjonarny dla infinitesimalnie małych, gładkich i poza tym dowolnych wariacji funkcji $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ odpowiednio wokół funkcji

$\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ zdefiniowanych równaniami (3.1.4) i (3.4.54), a jego wartość stacjonarna jest równa $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')$. Otrzymujemy wobec tego zasadę wariacyjną

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi') = \text{stat}_{\overline{\Psi}, \overline{\Psi}'} \left\{ (\Phi|\overline{\Psi}') + (\overline{\Psi}|\Phi') - (\overline{\Psi}|\nabla_n - \hat{\mathbf{b}})\overline{\Psi}') - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \overline{\Psi} | [\hat{H} - E] \overline{\Psi}' \rangle \right\}. \quad (3.4.73)$$

Zasada (3.4.73) została znaleziona, w sposób odmienny od przedstawionego powyżej, przez Shimamurę [28].

Możemy również skonstruować zasadę wariacyjną dla $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')^{-1}$. W tym celu potraktujemy równania (3.1.4), (3.4.54) i (3.4.55) jako więzy i rozważymy funkcjonał

$$F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}, \overline{\chi}, \overline{\lambda}, \overline{\Lambda}, \overline{\Psi}'] = \frac{1}{(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')} + (\overline{\chi}|\overline{\Psi}' - \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi') + (\overline{\lambda}|\nabla_n \overline{\Psi}' - \hat{\mathbf{b}}\overline{\Psi}' - \Phi') + \langle \overline{\Lambda} | [\hat{H} - E] \overline{\Psi}' \rangle. \quad (3.4.74)$$

Tak jak w przypadku omówionej powyżej metody konstrukcji zasady (3.4.73), poszukamy takich szczególnych postaci $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\mathbf{r})$ funkcji Lagrange'a $\overline{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\overline{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\overline{\Lambda}(\mathbf{r})$, aby pierwsza wariacja funkcjonału (3.4.74) odpowiadająca infinitezmalnym wariacjom $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}$, $\overline{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\overline{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$, $\overline{\Lambda}(\mathbf{r})$, $\overline{\Psi}'(\mathbf{r})$ wokół $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E)$, $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda(\mathbf{r})$, $\Psi'(E, \mathbf{r})$ była równa zero. Mamy

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = - \frac{(\Phi|\delta\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')}{(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')^2} + (\chi|\delta\Psi' - \delta\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi') + (\lambda|\nabla_n \delta\Psi' - \hat{\mathbf{b}}\delta\Psi') + \langle \Lambda | [\hat{H} - E] \delta\Psi' \rangle \quad (3.4.75)$$

i dalej, po zastosowaniu twierdzenia Greena,

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = - \left[\frac{(\Phi|\delta\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')}{(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')^2} + (\chi|\delta\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi') \right] + \left(\chi - \hat{\mathbf{b}}\lambda + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \Lambda \middle| \delta\Psi' \right) + \left(\lambda - \frac{\hbar^2}{2m} \Lambda \middle| \nabla_n \delta\Psi' \right) + \langle [\hat{H} - E] \Lambda | \delta\Psi' \rangle. \quad (3.4.76)$$

Jak wynika z równania (3.4.76), aby spełniony był warunek

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = 0, \quad (3.4.77)$$

wystarczy zażądać

$$[\hat{H} - E] \Lambda(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.4.78)$$

$$\frac{1}{(\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi'|\Phi)} \Phi(\boldsymbol{\rho}) + \chi(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.79)$$

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) - \hat{\mathbf{b}}(E)\lambda(\boldsymbol{\rho}) + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_n\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}) \quad (3.4.80)$$

oraz

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) - \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.4.81)$$

Z równań (3.4.79)–(3.4.81) znajdujemy

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}} \Phi' | \Phi)^2} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.82)$$

$$[\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)]\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}} \Phi' | \Phi)^2} \Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.83)$$

Korzystając z warunków brzegowych (3.4.55) oraz z hermitowskości operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E)$, przepiszemy równania (3.4.82) i (3.4.83) w wygodniejszej postaci

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\Psi' | \Phi)(\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}} \Phi' | \Phi)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.84)$$

$$[\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)]\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Phi' | \Psi)(\Psi' | \Phi)} \Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.85)$$

Porównanie (3.4.78) i (3.4.85) z (3.1.4) i (3.4.54) pokazuje, że możemy przyjąć, iż

$$\Lambda(\boldsymbol{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Phi' | \Psi)(\Psi' | \Phi)} \Psi(E, \boldsymbol{r}), \quad (3.4.86)$$

a w konsekwencji (porównaj (3.4.81))

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(\Phi' | \Psi)(\Psi' | \Phi)} \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.87)$$

Znalezione zależności pomiędzy szukanymi szczególnymi postaciami funkcji Lagrange'a $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\boldsymbol{r})$ oraz ścisłymi rozwiązaniami $\Psi(E, \boldsymbol{r})$ i $\Psi'(E, \boldsymbol{r})$ zagadnień brzegowych (3.1.4) i (3.4.54) sugerują, aby ograniczyć się do następujących postaci funkcji $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r})$

$$\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\bar{\Psi}' | \Phi)(\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}} \Phi' | \Phi)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.88)$$

$$\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(\Phi' | \bar{\Psi})(\bar{\Psi}' | \Phi)} \bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.89)$$

$$\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Phi' | \bar{\Psi})(\bar{\Psi}' | \Phi)} \bar{\Psi}(\boldsymbol{r}). \quad (3.4.90)$$

Uwzględnienie równań (3.4.88)–(3.4.90) w definicji (3.4.74) prowadzi do funkcjonału

$$F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}'] = \frac{(\bar{\Psi}|\nabla_n - \hat{b}|\bar{\Psi}')}{(\Phi|\bar{\Psi}')(\bar{\Psi}|\Phi')} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi}|\hat{H} - E|\bar{\Psi}' \rangle}{(\Phi|\bar{\Psi}')(\bar{\Psi}|\Phi')}, \quad (3.4.91)$$

posiadającego, jak łatwo pokazać, własność symetrii (3.4.72). Szukana zasada wariacyjna dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$ ma postać

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}\Phi')^{-1} = \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ \frac{(\bar{\Psi}|\nabla_n - \hat{b}|\bar{\Psi}')}{(\Phi|\bar{\Psi}')(\bar{\Psi}|\Phi')} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi}|\hat{H} - E|\bar{\Psi}' \rangle}{(\Phi|\bar{\Psi}')(\bar{\Psi}|\Phi')} \right\}. \quad (3.4.92)$$

Z powyższego wynika również następująca zasada wariacyjna dla elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}\Phi')$

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}\Phi') = \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ \frac{(\Phi|\bar{\Psi}')(\bar{\Psi}|\Phi')}{(\bar{\Psi}|\nabla_n - \hat{b}|\bar{\Psi}') + (2m/\hbar^2)\langle \bar{\Psi}|\hat{H} - E|\bar{\Psi}' \rangle} \right\}, \quad (3.4.93)$$

różniąca się istotnie od zasady (3.4.73). Należy podkreślić, że zasady (3.4.92) i (3.4.93) są niezależne od normalizacji użytych funkcji próbnych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$: funkcjonały użyte w tych zasadach osiągają wartości stacjonarne dla $\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \eta\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r}) = \eta'\Psi'(E, \mathbf{r})$, gdzie η i η' są dowolnymi liczbami zespolonymi różnymi od zera, zaś $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ są rozwiązaniami równania Schrödingera (3.1.4) spełniającymi warunki brzegowe (3.4.54).

Szczególna postać zasady wariacyjnej (3.4.92), dla przypadku, gdy $\hat{b}(E)$ jest operatorem zerowym oraz $\Phi(\rho) = \Phi'(\rho)$ i $\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \bar{\Psi}'(\mathbf{r})$, była rozważana przez Nesbeta [23, 24].

W rozdziale 6 pokażemy, w jaki sposób można zastosować funkcje próbne typu Rayleigha–Ritza do znajdowania przybliżonych wartości elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E)$, opierając się na zasadach wariacyjnych (3.4.73) i (3.4.92).

3.4.4 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{B}(E)$ i ich odwrotności

Możemy wreszcie skonstruować zasady wariacyjne dla elementu macierzowego $(\Phi|\hat{B}\Phi')$ oraz dla jego odwrotności, $(\Phi|\hat{B}\Phi')^{-1}$, gdzie $\hat{B}(E)$ jest operatorem całkowym zdefiniowanym w podrozdziale 3.1, a $\Phi(\rho)$ i $\Phi'(\rho)$ są dwiema dowolnymi odpowiednio regularnymi funkcjami określonymi na powierzchni \mathcal{S} . Wprowadźmy dwie pomocnicze funkcje $\Psi(E, \mathbf{r})$ oraz $\Psi'(E, \mathbf{r})$, należące do $\mathcal{D}_V(E)$ i spełniające na powierzchni \mathcal{S} *niejednorodne* warunki brzegowe *Dirichleta*

$$\Psi(E, \rho) = \Phi(\rho), \quad \Psi'(E, \rho) = \Phi'(\rho). \quad (3.4.94)$$

Działając na obie strony równań (3.4.94) operatorem $\hat{B}(E)$ i wykorzystując równanie (3.1.10), możemy przepisać powyższe warunki brzegowe w postaci

$$\nabla_n \Psi(E, \rho) = \hat{B}(E)\Phi(\rho), \quad \nabla_n \Psi'(E, \rho) = \hat{B}(E)\Phi'(\rho). \quad (3.4.95)$$

Aby skonstruować zasadę wariacyjną dla elementu macierzowego $(\Phi|\hat{B}\Phi')$, potraktujemy równania (3.1.4), (3.4.94) oraz (3.4.95) jako więzy i rozważymy funkcjonał

$$F[\Phi, \Phi'; \hat{B}, \bar{\chi}, \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \bar{\Psi}'] = (\Phi|\hat{B}\Phi') + (\bar{\chi}|\nabla_n \bar{\Psi}' - \hat{B}\Phi') + (\bar{\lambda}|\bar{\Psi}' - \Phi') + \langle \bar{\Lambda} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle. \quad (3.4.96)$$

W równaniu (3.4.96) \hat{B} jest liniowym operatorem całkowym, w ogólności niehermitowskim, działającym na funkcje określone na powierzchni \mathcal{S} , $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ są pewnymi wystarczająco regularnymi funkcjami określonymi na \mathcal{S} , a $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ są odpowiednio regularnymi funkcjami zdefiniowanymi w objętości \mathcal{V} . Pierwszą wariację funkcjonału (3.4.96)

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{B}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = (\Phi|\delta\hat{B}\Phi') + (\chi|\nabla_n \delta\Psi - \delta\hat{B}\Phi') + (\lambda|\delta\Psi') + \langle \Lambda | [\hat{H} - E] \delta\Psi' \rangle, \quad (3.4.97)$$

wywołaną wariacjami \hat{B} , $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ odpowiednio wokół $\hat{B}(E)$, $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda(\mathbf{r})$ oraz $\Psi'(E, \mathbf{r})$, gdzie $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda(\mathbf{r})$ są pewnymi, na razie dowolnymi, funkcjami, można, po zastosowaniu twierdzenia Greena do całki objętościowej występującej po prawej stronie równania (3.4.97), przepisać w postaci

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{B}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = (\Phi - \chi|\delta\hat{B}\Phi') + \left(\lambda + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \Lambda \middle| \delta\Psi' \right) + \left(\chi - \frac{\hbar^2}{2m} \Lambda \middle| \nabla_n \delta\Psi' \right) + \langle [\hat{H} - E] \Lambda | \delta\Psi' \rangle. \quad (3.4.98)$$

Znajdziemy teraz takie postacie funkcji Lagrange'a $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\Lambda(\mathbf{r})$, dla których zachodzi

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{B}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = 0. \quad (3.4.99)$$

Z równań (3.4.98) i (3.4.99) oraz z niezależności poszczególnych wariacji wynika, że w tym celu wystarczy założyć, iż

$$[\hat{H} - E] \Lambda(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.4.100)$$

$$\Phi(\boldsymbol{\rho}) - \chi(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.101)$$

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n \Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.102)$$

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.4.103)$$

Równania (3.4.101) i (3.4.103) implikują

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}) \quad (3.4.104)$$

oraz

$$\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{2m}{\hbar^2} \Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.105)$$

Porównanie (3.4.100) i (3.4.105) z (3.1.4) i (3.4.94) pokazuje, że możemy przyjąć

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \Psi(E, \mathbf{r}), \quad (3.4.106)$$

a w konsekwencji (porównaj (3.4.102))

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) = -\nabla_n \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.107)$$

Znalezione przez nas zależności (3.4.104), (3.4.107) i (3.4.106) pomiędzy funkcjami Lagrange'a $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda(\mathbf{r})$ a funkcjami $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ sugerują następujący naturalny wybór funkcji $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$

$$\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.108)$$

$$\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho}) = -\nabla_n \bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.109)$$

$$\bar{\Lambda}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \bar{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (3.4.110)$$

Przyjmując w definicji (3.4.96) funkcje $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\mathbf{r})$ w postaciach (3.4.108)–(3.4.110), otrzymujemy funkcjonal

$$F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}'] = (\Phi | \nabla_n \bar{\Psi}') + (\nabla_n \bar{\Psi} | \Phi') - (\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi}') + \frac{2m}{\hbar^2} \langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle, \quad (3.4.111)$$

który nie zależy od operatora $\hat{\mathcal{B}}$. Stosując twierdzenie Greena do całki objętościowej po prawej stronie równania (3.4.111), można pokazać, że funkcjonal (3.4.111) spełnia relację symetrii (3.4.72). Podsumowując, mamy zasadę wariacyjną

$$(\Phi | \hat{\mathcal{B}} \Phi') = \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ (\Phi | \nabla_n \bar{\Psi}') + (\nabla_n \bar{\Psi} | \Phi') - (\nabla_n \bar{\Psi} | \bar{\Psi}') + \frac{2m}{\hbar^2} \langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle \right\}, \quad (3.4.112)$$

w której wartość stacjonarna jest osiągana dla tych funkcji $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$, które w objętości \mathcal{V} są rozwiązaniami równania Schrödingera (3.1.4) spełniającymi na powierzchni \mathcal{S} niejednorodne warunki brzegowe Dirichleta (3.4.94).

Pozostaje skonstruować zasadę wariacyjną dla $(\Phi | \hat{\mathcal{B}} \Phi')^{-1}$. Traktujemy równania (3.1.4), (3.4.94) oraz (3.4.95) jako więzy i rozpatrujemy funkcjonal

$$F[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}, \bar{\chi}, \bar{\lambda}, \bar{\Lambda}, \bar{\Psi}'] = \frac{1}{(\Phi | \hat{\mathcal{B}} \Phi')} + (\bar{\chi} | \nabla_n \bar{\Psi}' - \hat{\mathcal{B}} \Phi') + (\bar{\lambda} | \bar{\Psi}' - \Phi') + \langle \bar{\Lambda} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle. \quad (3.4.113)$$

Będziemy szukali takich postaci $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\Lambda(\boldsymbol{r})$ funkcji Lagrange'a $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r})$, aby zniknęła pierwsza wariacja funkcjonału (3.4.113),

$$\begin{aligned} \delta F[\Phi, \Phi'; \hat{B}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] &= -\frac{(\Phi|\delta\hat{B}\Phi')}{(\Phi|\hat{B}\Phi')^2} + (\chi|\nabla_n\delta\Psi' - \delta\hat{B}\Phi') + (\lambda|\delta\Psi') \\ &+ \langle \Lambda|[\hat{H} - E]\delta\Psi' \rangle, \end{aligned} \quad (3.4.114)$$

wywołana wariacjami \hat{B} , $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r})$, $\bar{\Psi}'(\boldsymbol{r})$ odpowiednio wokół $\hat{B}(E)$, $\chi(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda(\boldsymbol{r})$, $\Psi'(E, \boldsymbol{r})$. Ponieważ, przekształcając całkę objętościową znajdującą się po prawej stronie równania (3.4.114), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \delta F[\Phi, \Phi'; \hat{B}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] &= -\left[\frac{(\Phi|\delta\hat{B}\Phi')}{(\Phi|\hat{B}\Phi')^2} + (\chi|\delta\hat{B}\Phi') \right] + \left(\lambda + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_n\Lambda \middle| \delta\Psi' \right) \\ &+ \left(\chi - \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda \middle| \nabla_n\delta\Psi' \right) + \langle [\hat{H} - E]\Lambda | \delta\Psi' \rangle, \end{aligned} \quad (3.4.115)$$

narzucony przez nas warunek

$$\delta F[\Phi, \Phi'; \hat{B}, \chi, \lambda, \Lambda, \Psi'] = 0 \quad (3.4.116)$$

będzie spełniony, gdy

$$[\hat{H} - E]\Lambda(\boldsymbol{r}) = 0 \quad (\boldsymbol{r} \in \mathcal{V}), \quad (3.4.117)$$

$$\frac{1}{(\hat{B}\Phi'|\Phi)^2}\Phi(\boldsymbol{\rho}) + \chi(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.118)$$

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_n\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (3.4.119)$$

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) - \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (3.4.120)$$

Z równań (3.4.118) i (3.4.120) dostajemy

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\hat{B}\Phi'|\Phi)^2}\Phi(\boldsymbol{\rho}) \quad (3.4.121)$$

oraz

$$\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(\hat{B}\Phi'|\Phi)^2}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.122)$$

Wykorzystując warunki brzegowe (3.4.95) i własność hermitowskości operatora $\hat{B}(E)$, wygodnie jest przepisać równania (3.4.121) i (3.4.122) w postaciach

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\nabla_n\Psi'|\Phi)(\hat{B}\Phi'|\Phi)}\Phi(\boldsymbol{\rho}) \quad (3.4.123)$$

oraz

$$\Lambda(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Phi'|\nabla_n\Psi)(\nabla_n\Psi'|\Phi)}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.124)$$

Porównując (3.4.117) i (3.4.124) odpowiednio z (3.1.4) i (3.4.94), dochodzimy do wniosku, że funkcja $\Lambda(\boldsymbol{r})$ może zostać wybrana w postaci

$$\Lambda(\boldsymbol{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Phi'|\nabla_n\Psi)(\nabla_n\Psi'|\Phi)}\Psi(E, \boldsymbol{r}). \quad (3.4.125)$$

W konsekwencji (porównaj (3.4.119)) dla $\lambda(\boldsymbol{\rho})$ dostajemy następujące wyrażenie

$$\lambda(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(\Phi'|\nabla_n\Psi)(\nabla_n\Psi'|\Phi)}\nabla_n\Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.126)$$

Równania (3.4.123), (3.4.126) oraz (3.4.125) sugerują następujący optymalny wybór funkcji Lagrange'a $\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r})$ w funkcjonale (3.4.113)

$$\bar{\chi}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\nabla_n\bar{\Psi}'|\Phi)(\hat{\mathcal{B}}\Phi'|\Phi)}\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.127)$$

$$\bar{\lambda}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(\Phi'|\nabla_n\bar{\Psi})(\nabla_n\bar{\Psi}'|\Phi)}\nabla_n\bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.128)$$

$$\bar{\Lambda}(\boldsymbol{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(\Phi'|\nabla_n\bar{\Psi})(\nabla_n\bar{\Psi}'|\Phi)}\bar{\Psi}(\boldsymbol{r}), \quad (3.4.129)$$

prowadzący do następującej symetrycznej (w sensie równania (3.4.72)) postaci tego funkcjonału

$$F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}'] = \frac{(\nabla_n\bar{\Psi}|\bar{\Psi}')}{(\Phi|\nabla_n\bar{\Psi}')(\nabla_n\bar{\Psi}|\Phi')} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle\bar{\Psi}|\hat{H} - E|\bar{\Psi}'\rangle}{(\Phi|\nabla_n\bar{\Psi}')(\nabla_n\bar{\Psi}|\Phi')}. \quad (3.4.130)$$

Skonstruowana przez nas zasada wariacyjna dla odwrotności elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ ma postać

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi')^{-1} = \frac{\text{stat}}{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ \frac{(\nabla_n\bar{\Psi}|\bar{\Psi}')}{(\Phi|\nabla_n\bar{\Psi}')(\nabla_n\bar{\Psi}|\Phi')} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle\bar{\Psi}|\hat{H} - E|\bar{\Psi}'\rangle}{(\Phi|\nabla_n\bar{\Psi}')(\nabla_n\bar{\Psi}|\Phi')} \right\}. \quad (3.4.131)$$

Z równania (3.4.131) wynika również następująca zasada wariacyjna dla elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi')$

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi') = \frac{\text{stat}}{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ \frac{(\Phi|\nabla_n\bar{\Psi}')(\nabla_n\bar{\Psi}|\Phi')}{(\nabla_n\bar{\Psi}|\bar{\Psi}') - (2m/\hbar^2)\langle\bar{\Psi}|\hat{H} - E|\bar{\Psi}'\rangle} \right\}, \quad (3.4.132)$$

otrzymana wcześniej, w odmienny sposób, przez Nesbeta [24]. Na podkreślenie zasługuje fakt, że zasady (3.4.131) oraz (3.4.132) są niezależne od normalizacji użytych w nich funkcji próbnych $\bar{\Psi}(\boldsymbol{r})$ i $\bar{\Psi}'(\boldsymbol{r})$. Funkcjonały wykorzystane w

obu zasadach przyjmują wartości stacjonarne dla $\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \eta\Psi(E, \mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}'(\mathbf{r}) = \eta'\Psi'(E, \mathbf{r})$, gdzie η i η' są dowolnymi liczbami zespolonymi różnymi od zera, zaś funkcje $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ są rozwiązaniami równania Schrödingera (3.1.4) spełniającymi na powierzchni \mathcal{S} warunki brzegowe Dirichleta (3.4.94).

W rozdziale 6 omówimy zastosowanie funkcji próbnych typu Rayleigha–Ritza oraz zasad wariacyjnych (3.4.112) i (3.4.131) do znajdowania przybliżonych wartości elementów macierzowych operatora $\hat{B}(E)$.

3.4.5 Zasady wariacyjne z więzami nałożonymi na funkcje próbne

Podczas konstrukcji zasad wariacyjnych w podrozdziałach 3.4.3 i 3.4.4, na funkcje próbne $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ nie nakładaliśmy żadnych więzów prócz rozsądnego założenia, że są one ciągłe wraz z pierwszymi pochodnymi w objętości \mathcal{V} . Wydaje się interesującym zbadanie, jak na postać niektórych z otrzymanych przez nas zasad wpłynie narzucenie na funkcje $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ pewnych dodatkowych ograniczeń.

W pierwszej kolejności rozważymy otrzymaną w podrozdziale 3.4.3 zasadę wariacyjną (3.4.73) dla elementu macierzowego $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')$. Pokazaliśmy tam, że funkcjonał

$$F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}'] = (\Phi|\bar{\Psi}') + (\bar{\Psi}|\Phi') - (\bar{\Psi}|\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}|\bar{\Psi}') - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle \quad (3.4.133)$$

jest stacjonarny ze względu na małe, gładkie i poza tym dowolne wariacje funkcji próbnych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ odpowiednio wokół $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$, przy czym dwie ostatnie funkcje są zdefiniowane jako te szczególne rozwiązania równania Schrödingera (3.1.4) w objętości \mathcal{V} , które na ograniczającej tę objętość powierzchni \mathcal{S} spełniają niejednorodne mieszane warunki brzegowe

$$[\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)]\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)]\Psi'(E, \boldsymbol{\rho}) = \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.134)$$

Wartością stacjonarną funkcjonału (3.4.133) jest wartość elementu macierzowego $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')$. Podkreślamy, że w dyskusji przeprowadzonej w podrozdziale 3.4.3 od funkcji próbnych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ *nie* wymagaliśmy, aby spełniały na powierzchni \mathcal{S} warunki brzegowe narzucone na ścisłe rozwiązania $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$. Dopuszczymy teraz jednak do rozważań tylko taką klasę funkcji próbnych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$, dla których

$$[\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)]\bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad [\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}(E)]\bar{\Psi}'(\boldsymbol{\rho}) = \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (3.4.135)$$

W takim przypadku drugi i trzeci człon po prawej stronie równania (3.4.133) znoszą się wzajemnie i funkcjonał przyjmuje postać

$$F[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}, \bar{\Psi}'] = (\Phi|\bar{\Psi}') - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle, \quad (3.4.136)$$

z której wynika zasada wariacyjna Jacksona [17]

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}\Phi') = \underset{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'}{\text{stat}} \left\{ (\Phi|\bar{\Psi}') - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle \right\}. \quad (3.4.137)$$

Jeszcze raz zwracamy uwagę, że w zasadzie wariacyjnej (3.4.137), w odróżnieniu od zasady (3.4.73), funkcje próbne $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ *muszą* spełniać warunki brzegowe (3.4.135).

Podobne rozważania można przeprowadzić w przypadku zasady wariacyjnej (3.4.112) dla elementu macierzowego $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi')$, skonstruowanej w podrozdziale 3.4.4. Jeśli w tej zasadzie ograniczymy klasę dopuszczalnych funkcji próbnych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ do takich, które na powierzchni \mathcal{S} spełniają niejednorodne warunki brzegowe Dirichleta

$$\bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad \bar{\Psi}'(\boldsymbol{\rho}) = \Phi'(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.4.138)$$

otrzymamy następującą zasadę wariacyjną [40, 42]

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi') = \underset{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'}{\text{stat}} \left\{ (\Phi|\nabla_n \bar{\Psi}') + \frac{2m}{\hbar^2} \langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}' \rangle \right\}, \quad (3.4.139)$$

analogiczną do zasady wariacyjnej Jacksona (3.4.137).

Rozdział 4

RELATYWISTYCZNE ROZPRASZANIE POTENCJALNE. R-MACIERZE $R_b^{(\pm)}(E, \rho)$ I ICH ZWIĄZEK Z MACIERZĄ ROZPRASZANIA $U(E)$

Zajmiemy się teraz opisem stacjonarnego procesu, w którym cząstki Diraca o spinie $\frac{1}{2}$, masie spoczynkowej m i energii całkowitej E (będziemy zakładali, że $|E| > mc^2$, gdzie c oznacza szybkość światła w próżni) są rozpraszane sprężysto w polu potencjału \hat{V} . Do opisu rozważanego procesu zastosujemy niezależne od czasu równanie Diraca

$$[\hat{H} - E]\Psi(E, \mathbf{r}) = 0, \quad (4.1)$$

w którym $\Psi(E, \mathbf{r})$ jest czteroskładnikową funkcją falową cząstki, a hamiltonian \hat{H} ma postać

$$\hat{H} = -ic\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 + \hat{V}. \quad (4.2)$$

Macierze Diraca $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z]$ i β o wymiarach 4×4 definiujemy standardowo [138] jako

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} O & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & O \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

gdzie O jest macierzą zerową o wymiarach 2×2 , I jest macierzą jednostkową o wymiarach 2×2 , a $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z]$ jest wektorem zbudowanym z macierzy Pauliego

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Założenia, które poczynimy odnośnie potencjału \hat{V} , są podobne do tych, które wprowadziliśmy w rozdziale 2 przy okazji omawiania zagadnienia nierelatywistycznego: przyjmujemy, że operator \hat{V} jest hermitowski i że może być nielokalny. Ponieważ w teorii relatywistycznej jądro $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ operatora \hat{V} jest macierzą kwadratową o rozmiarach 4×4 , założenie o hermitowskości operatora \hat{V} narzuca na jego jądro warunek

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V^\dagger(\mathbf{r}', \mathbf{r}), \quad (4.5)$$

zastępujący warunek (2.3) z teorii nierelatywistycznej. Tak jak w rozdziale 2, ograniczymy nasze rozważania do potencjałów krótkozasięgowych znikających tożsamościowo na zewnątrz kuli \mathcal{V}_ρ o promieniu ρ , ograniczonej sferą \mathcal{S}_ρ , to znaczy założymy, że

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r})\Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r}'), \quad (4.6)$$

gdzie $\Theta_{\mathcal{V}_\rho}(\mathbf{r})$ jest trójwymiarową funkcją Heaviside'a zdefiniowaną równaniem (2.5). Środek O kuli \mathcal{V}_ρ obierzemy za początek sferycznego układu współrzędnych (r, θ, φ) .

Aby zdefiniować macierz rozpraszania $U(E)$, będziemy potrzebowali tych szczególnych rozwiązań równania (4.1) “obciętego” do obszaru $\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho$,

$$[-i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 - E] \Phi(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (4.7)$$

które mają postać fal kulistych wchodzących lub wychodzących z centrum potencjału i opisujących cząstki w stanie o określonej parzystości $(-)^l$, całkowitym momencie pędu $j(j+1)\hbar^2$ (przy czym $j = l \pm \frac{1}{2}$) oraz rzucie momentu pędu na oś kwantyzacji (oś z) równym $m_j\hbar$. Rozwiązaniami tymi są

$$\Phi_{\kappa m_j}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2|\varepsilon|c}} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_\kappa^{\text{in}}(E, r) i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \\ Q_\kappa^{\text{in}}(E, r) i^{l+1} \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (4.8)$$

$$\Phi_{\kappa m_j}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2|\varepsilon|c}} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_\kappa^{\text{out}}(E, r) i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \\ Q_\kappa^{\text{out}}(E, r) i^{l+1} \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho), \quad (4.9)$$

gdzie

$$\varepsilon = \text{sgn}(E) \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}}. \quad (4.10)$$

W równaniach (4.8) i (4.9) $\Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}})$ jest spinorem sferycznym zdefiniowanym następująco^{4A}

$$\Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{\substack{m_l, m_s \\ (m_l + m_s = m_j)}} \langle l m_l \frac{1}{2} m_s | l \frac{1}{2} j m_j \rangle Y_{l m_l}(\hat{\mathbf{r}}) \chi_{\frac{1}{2} m_s}, \quad (4.11)$$

przy czym $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m_j \rangle$ oznacza współczynnik Clebscha–Gordana,

$$\chi_{\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

a liczba $\kappa = \pm 1, \pm 2, \dots$ jest kombinowaną liczbą kwantową parzystości i momentu pędu, związaną z liczbami l i j relacją

$$\kappa = (2j + 1)(l - j) = \begin{cases} -l - 1 & \text{dla } \kappa < 0 \\ +l & \text{dla } \kappa > 0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Funkcje radialne $\{P_\kappa^{\text{in/out}}(E, r)\}$ oraz $\{Q_\kappa^{\text{in/out}}(E, r)\}$ można wyrazić przez funkcje Riccati–Hankela [132, 133] w następujący sposób

$$P_\kappa^{\text{in}}(E, r) = -i\hat{h}_l^{(2)}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} + \exp[-i(kr - \frac{1}{2}\pi l)], \quad (4.14)$$

^{4A} Pod działaniem operatora odwrócenia czasu $\hat{T} = -i\sigma_y \hat{K}$ (\hat{K} — operator sprzężenia zespolonego) funkcje $i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}})$ oraz $i^{l+1} \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}})$ transformują się następująco

$$\hat{T} [i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}})] = (-)^{j-m_j} [i^l \Omega_{\kappa, -m_j}(\hat{\mathbf{r}})], \quad \hat{T} [i^{l+1} \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}})] = (-)^{j-m_j} [i^{l+1} \Omega_{-\kappa, -m_j}(\hat{\mathbf{r}})] \quad (4A.1)$$

(porównaj przypis 2A na stronie 14).

$$Q_\kappa^{\text{in}}(E, r) = \pm i \varepsilon \hat{h}_{l_{\pm 1}}^{(2)}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -i \varepsilon \exp \left[-i \left(kr - \frac{1}{2} \pi l \right) \right], \quad (4.15)$$

$$P_\kappa^{\text{out}}(E, r) = +i \hat{h}_l^{(1)}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} + \exp \left[+i \left(kr - \frac{1}{2} \pi l \right) \right], \quad (4.16)$$

$$Q_\kappa^{\text{out}}(E, r) = \mp i \varepsilon \hat{h}_{l_{\pm 1}}^{(1)}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} +i \varepsilon \exp \left[+i \left(kr - \frac{1}{2} \pi l \right) \right] \quad (4.17)$$

(w równaniach (4.15) i (4.17) górne znaki należy wybrać dla $\kappa < 0$, dolne dla $\kappa > 0$), gdzie

$$k = \frac{\sqrt{(E - mc^2)(E + mc^2)}}{c\hbar} \quad (4.18)$$

jest relatywistyczną liczbą falową cząstki. Funkcje te są rozwiązaniami układu radialnych równań Diraca

$$\begin{pmatrix} mc^2 - E & c\hbar(-d/dr + \kappa/r) \\ c\hbar(d/dr + \kappa/r) & -mc^2 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_\kappa^{\text{in/out}}(E, r) \\ Q_\kappa^{\text{in/out}}(E, r) \end{pmatrix} = 0 \quad (r \geq \rho). \quad (4.19)$$

Z własności funkcji Riccati–Hankela wynika, że

$$[P_\kappa^{\text{in/out}}(E, r)]^* = P_\kappa^{\text{out/in}}(E, r), \quad [Q_\kappa^{\text{in/out}}(E, r)]^* = Q_\kappa^{\text{out/in}}(E, r), \quad (4.20)$$

zaś wyznacznik Wronskiego funkcji $P_\kappa^{\text{in/out}}(E, r)$ i $Q_\kappa^{\text{in/out}}(E, r)$ jest równy

$$\begin{aligned} W [P_\kappa^{\text{in}}(E, r), Q_\kappa^{\text{in}}(E, r); P_\kappa^{\text{out}}(E, r), Q_\kappa^{\text{out}}(E, r)] \\ \equiv P_\kappa^{\text{in}}(E, r) Q_\kappa^{\text{out}}(E, r) - P_\kappa^{\text{out}}(E, r) Q_\kappa^{\text{in}}(E, r) = 2i\varepsilon. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Współczynnik $1/\sqrt{2|\varepsilon|c}$, uwzględniony w definicjach (4.8) i (4.9), zapewnia, że funkcje $\{\Phi_{\kappa m_j}^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r})\}$ są unormowane do jednostkowego prądu prawdopodobieństwa przechodzącego przez dowolną powierzchnię zamkniętą otaczającą kulę \mathcal{V}_ρ . Rzeczywiście, korzystając z definicji wektora gęstości prądu prawdopodobieństwa dla cząstki Diraca [138]

$$\mathbf{j}(E, \mathbf{r}) = c\Phi^\dagger(E, \mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}\Phi(E, \mathbf{r}) \quad (4.22)$$

i uwzględniając następującą własność spinorów sferycznych

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Omega_{\pm \kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) = -\Omega_{\mp \kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (4.23)$$

mamy

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{\kappa m_j}^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r}) &= \frac{1}{2i|\varepsilon|} [P_\kappa^{\text{out/in}}(E, r) Q_\kappa^{\text{in/out}}(E, r) \Omega_{\kappa m_j}^\dagger(\hat{\mathbf{r}}) \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &\quad - P_\kappa^{\text{in/out}}(E, r) Q_\kappa^{\text{out/in}}(E, r) \Omega_{-\kappa m_j}^\dagger(\hat{\mathbf{r}}) \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}})]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Całkując równanie (4.24) po powierzchni dowolnej kuli \mathcal{V}_r o promieniu $r \geq \rho$ koncentrycznej z kulą \mathcal{V}_ρ , otrzymujemy, że całkowite prądy odpowiadające funkcjom $\{\Phi_{\kappa m_j}^{\text{in}}(E, \mathbf{r})\}$ oraz $\{\Phi_{\kappa m_j}^{\text{out}}(E, \mathbf{r})\}$ i przechodzące przez powierzchnię kuli \mathcal{V}_r są równe

$$J_{\kappa m_j}^{\text{in}}(E, r) = \int_{4\pi} d^2\hat{\mathbf{r}} r^2 \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{\kappa m_j}^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) = -\text{sgn}(E), \quad (4.25)$$

$$J_{\kappa m_j}^{\text{out}}(E, r) = \int_{4\pi} d^2 \hat{\mathbf{r}} r^2 \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{\kappa m_j}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) = + \text{sgn}(E). \quad (4.26)$$

Identycznie, jak w przypadku nierelatywistycznym pokazuje się, że wyniki (4.25) i (4.26) są słuszne dla dowolnych powierzchni, niekoniecznie sferycznych, otaczających kulę \mathcal{V}_ρ .

W dalszym ciągu użyjemy symbolu γ dla oznaczenia pary indeksów (κ, m_j) . Z funkcji $\{\Phi_\gamma^{\text{in/out}}(E, \mathbf{r})\}$ można skonstruować następujące rozwiązanie szczególne równania Diraca (4.1) w obszarze $\mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho$

$$\Psi_\gamma^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) = \Phi_\gamma^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) - \sum_{\gamma'} \Phi_{\gamma'}^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) U_{\gamma' \gamma}(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \quad (4.27)$$

Rozwiązanie ogólne równania (4.1) w tym obszarze ma postać

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \sum_{\gamma \gamma'} [\Phi_\gamma^{\text{in}}(E, \mathbf{r}) \delta_{\gamma \gamma'} - \Phi_\gamma^{\text{out}}(E, \mathbf{r}) U_{\gamma \gamma'}(E)] a_{\gamma'}(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \quad (4.28)$$

Zespół współczynników $\{U_{\gamma \gamma'}(E)\}$ definiuje macierz rozpraszania $U(E)$ w reprezentacji parzystości i momentu pędu.

Oznaczmy przez $\Omega^{(+T)}(\mathbf{r})$ oraz $\Omega^{(-T)}(\mathbf{r})$ macierze jednowierszowe o wyrazach^{4b}

$$\Omega_\gamma^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Omega_\gamma^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} 0 \\ i^{l+1} \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

i zdefiniujmy macierze jednokolumnowe $P(E, r)$ i $Q(E, r)$ z elementami odpowiednio

$$P_\gamma(E, r) = \int_{4\pi} d^2 \hat{\mathbf{r}} r^2 \Omega_\gamma^{(+)\dagger}(\mathbf{r}) \Psi(E, \mathbf{r}) \quad (r \geq \rho), \quad (4.30)$$

$$Q_\gamma(E, r) = \int_{4\pi} d^2 \hat{\mathbf{r}} r^2 \Omega_\gamma^{(-)\dagger}(\mathbf{r}) \Psi(E, \mathbf{r}) \quad (r \geq \rho). \quad (4.31)$$

Wykorzystując wprowadzone powyżej oznaczenia, możemy przedstawić funkcję falową $\Psi(E, \mathbf{r})$ w postaci

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \Omega^{(+T)}(\mathbf{r}) P(E, r) + \Omega^{(-T)}(\mathbf{r}) Q(E, r) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \quad (4.32)$$

Niech dalej $\mathbf{P}^{\text{in/out}}(E, r)$ i $\mathbf{Q}^{\text{in/out}}(E, r)$ będą diagonalnymi macierzami kwadratowymi o wyrazach odpowiednio $\{P_{\gamma \gamma'}^{\text{in/out}}(E, r) = P_\kappa^{\text{in/out}}(E, r) \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{m_j m_j'}\}$ oraz $\{Q_{\gamma \gamma'}^{\text{in/out}}(E, r) = Q_\kappa^{\text{in/out}}(E, r) \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{m_j m_j'}\}$ i niech $\mathbf{a}(E)$ oznacza macierz jednokolumnową z elementami $\{a_\gamma(E) = a_{\kappa m_j}(E)\}$. Wówczas równanie (4.28) można przepisać w postaci

$$\begin{aligned} \Psi(E, \mathbf{r}) = & \Omega^{(+T)}(\mathbf{r}) [\mathbf{P}^{\text{in}}(E, r) - \mathbf{P}^{\text{out}}(E, r) U(E)] \mathbf{a}(E) \\ & + \Omega^{(-T)}(\mathbf{r}) [\mathbf{Q}^{\text{in}}(E, r) - \mathbf{Q}^{\text{out}}(E, r) U(E)] \mathbf{a}(E) \quad (\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_\rho). \end{aligned} \quad (4.33)$$

^{4b} Z definicji (4.3) macierzy α oraz z równań (4.23) i (4.29) wynika, że funkcje $\Omega_\gamma^{(\pm)}$ są ze sobą powiązane relacjami

$$i \hat{\mathbf{r}} \cdot \alpha \Omega_\gamma^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \mp \Omega_\gamma^{(\mp)}(\mathbf{r}). \quad (4B.1)$$

Z porównania (4.32) i (4.33) wynika, że

$$P(E, r) = [P^{\text{in}}(E, r) - P^{\text{out}}(E, r)U(E)]a(E) \quad (r \geq \rho), \quad (4.34)$$

$$Q(E, r) = [Q^{\text{in}}(E, r) - Q^{\text{out}}(E, r)U(E)]a(E) \quad (r \geq \rho). \quad (4.35)$$

R -macierze $R_b^{(+)}(E, \rho)$ oraz $R_b^{(-)}(E, \rho)$, powiązane ze sobą relacją

$$[R_b^{(-)}(E, \rho)]^{-1} + b^{-1}(E) = [[R_b^{(+)}(E, \rho)]^{-1} + b(E)]^{-1}, \quad (4.36)$$

definiujemy tak, aby dla dowolnego rozwiązania równania Diraca (4.1) na powierzchni S_ρ spełnione były warunki

$$P(E, \rho) = R_b^{(+)}(E, \rho) \left[\left(\frac{2mc}{\hbar} \right) Q(E, \rho) - b(E)P(E, \rho) \right], \quad (4.37)$$

$$Q(E, \rho) = R_b^{(-)}(E, \rho) \left[\left(\frac{2mc}{\hbar} \right)^{-1} P(E, \rho) - b^{-1}(E)Q(E, \rho) \right], \quad (4.38)$$

gdzie $b(E)$ jest daną macierzą kwadratową. Równania (4.37) i (4.38) stanowią układ równań jednorodnych dla składowych $\{P_\gamma(E, \rho)\}$ oraz $\{Q_\gamma(E, \rho)\}$ macierzy $P(E, \rho)$ i $Q(E, \rho)$. Jak łatwo sprawdzić, warunek (4.36) zapewnia istnienie nietrywialnych rozwiązań tego układu. R -macierze odpowiadające różnym macierzom $b(E)$ są ze sobą powiązane następująco

$$[R_b^{(\pm)}(E, \rho)]^{-1} + b^{\pm 1}(E) = [R^{(\pm)}(E, \rho)]^{-1} = [R_{b'}^{(\pm)}(E, \rho)]^{-1} + [b'(E)]^{\pm 1}, \quad (4.39)$$

gdzie przez $R^{(+)}(E, \rho)$ oznaczyliśmy R -macierz $R_b^{(+)}(E, \rho)$ dla przypadku $b(E) = 0$, a przez $R^{(-)}(E, \rho)$ R -macierz $R_b^{(-)}(E, \rho)$ dla przypadku $b^{-1}(E) = 0$. Macierze $R_b^{(\pm)}(E, \rho)$ posiadają ponadto następującą własność ze względu na operację sprzężenia hermitowskiego

$$R_b^{(\pm)\dagger}(E, \rho) = R_{b^\dagger}^{(\pm)}(E, \rho). \quad (4.40)$$

Dowody związków (4.39) i (4.40) przebiegają podobnie do dowodów odpowiadających im nierelatywistycznych relacji (2.49) i (2.50).

Tak jak w teorii nierelatywistycznej, macierz rozpraszania $U(E)$ można wyrazić przez R -macierze $R_b^{(\pm)}(E, \rho)$. Ze względu na podobieństwo argumentacji, poniżej bardziej szczegółowo omówimy jedynie wyprowadzenie relacji łączącej macierze $U(E)$ i $R_b^{(+)}(E, \rho)$, zaś dla macierzy $R_b^{(-)}(E, \rho)$ ograniczymy się do podania wyniku końcowego. Uwzględniając relacje (4.34) i (4.35) w definicji (4.37), otrzymujemy związek

$$\begin{aligned} & [P^{\text{in}}(E, \rho) - P^{\text{out}}(E, \rho)U(E)]a(E) \\ &= R_b^{(+)}(E, \rho) \left[\left(\frac{2mc}{\hbar} \right) [Q^{\text{in}}(E, \rho) - Q^{\text{out}}(E, \rho)U(E)] \right. \\ & \quad \left. - b(E)[P^{\text{in}}(E, \rho) - P^{\text{out}}(E, \rho)U(E)] \right] a(E), \end{aligned} \quad (4.41)$$

który musi być spełniony dla dowolnego wektora $a(E)$, co implikuje

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{\text{in}}(E, \rho) - \mathbf{P}^{\text{out}}(E, \rho)\mathbf{U}(E) &= \left(\frac{2mc}{\hbar}\right) \mathbf{R}_b^{(+)}(E, \rho) [\mathbf{Q}^{\text{in}}(E, \rho) - \mathbf{Q}^{\text{out}}(E, \rho)\mathbf{U}(E)] \\ &\quad - \mathbf{R}_b^{(+)}(E, \rho)\mathbf{b}(E) [\mathbf{P}^{\text{in}}(E, \rho) - \mathbf{P}^{\text{out}}(E, \rho)\mathbf{U}(E)]. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Rozwiązując to równanie ze względu na $\mathbf{U}(E)$, dostajemy

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(E) &= [\mathbf{P}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} [I - \mathbf{R}_b^{(+)}(E, \rho)\mathbf{L}_b^{(+)\text{out}}(E, \rho)]^{-1} \\ &\quad \times [I - \mathbf{R}_b^{(+)}(E, \rho)\mathbf{L}_b^{(+)\text{in}}(E, \rho)] \mathbf{P}^{\text{in}}(E, \rho), \end{aligned} \quad (4.43)$$

gdzie $\mathbf{L}_b^{(+)\text{in/out}}(E, \rho)$ są macierzami kwadratowymi zdefiniowanymi równaniem

$$\mathbf{L}_b^{(+)\text{in/out}}(E, \rho) = \left(\frac{2mc}{\hbar}\right) [\mathbf{P}^{\text{in/out}}(E, \rho)]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{in/out}}(E, \rho) - \mathbf{b}(E). \quad (4.44)$$

Ponieważ z równania (4.21) wynika, że

$$\mathbf{P}^{\text{in}}(E, \rho)\mathbf{Q}^{\text{out}}(E, \rho) - \mathbf{P}^{\text{out}}(E, \rho)\mathbf{Q}^{\text{in}}(E, \rho) = 2i\varepsilon I, \quad (4.45)$$

wynik (4.43) można zapisać w następującej równoważnej postaci

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(E) &= [\mathbf{P}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} \mathbf{P}^{\text{in}}(E, \rho) \\ &\quad + 2i\varepsilon \left(\frac{2mc}{\hbar}\right) [\mathbf{P}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} \left[[\mathbf{R}_b^{(+)}(E, \rho)]^{-1} - \mathbf{L}_b^{(+)\text{out}}(E, \rho) \right]^{-1} [\mathbf{P}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Relacje analogiczne do równań (4.43) oraz (4.46), lecz zawierające macierz $\mathbf{R}_b^{(-)}(E, \rho)$ zamiast macierzy $\mathbf{R}_b^{(+)}(E, \rho)$, mają postać

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(E) &= [\mathbf{Q}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} [I - \mathbf{R}_b^{(-)}(E, \rho)\mathbf{L}_b^{(-)\text{out}}(E, \rho)]^{-1} \\ &\quad \times [I - \mathbf{R}_b^{(-)}(E, \rho)\mathbf{L}_b^{(-)\text{in}}(E, \rho)] \mathbf{Q}^{\text{in}}(E, \rho) \end{aligned} \quad (4.47)$$

oraz

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(E) &= [\mathbf{Q}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} \mathbf{Q}^{\text{in}}(E, \rho) \\ &\quad - 2i\varepsilon \left(\frac{2mc}{\hbar}\right)^{-1} [\mathbf{Q}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} \left[[\mathbf{R}_b^{(-)}(E, \rho)]^{-1} - \mathbf{L}_b^{(-)\text{out}}(E, \rho) \right]^{-1} [\mathbf{Q}^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1}, \end{aligned} \quad (4.48)$$

gdzie $\mathbf{L}_b^{(-)\text{in/out}}(E, \rho)$ są macierzami kwadratowymi zdefiniowanymi przez

$$\mathbf{L}_b^{(-)\text{in/out}}(E, \rho) = \left(\frac{2mc}{\hbar}\right)^{-1} [\mathbf{Q}^{\text{in/out}}(E, \rho)]^{-1} \mathbf{P}^{\text{in/out}}(E, \rho) - \mathbf{b}^{-1}(E). \quad (4.49)$$

Jak łatwo zauważyć, z równań (4.44) i (4.49) wynika, że macierze $L_b^{(\pm)\text{in/out}}(E, \rho)$ są ze sobą powiązane relacją

$$L_b^{(-)\text{in/out}}(E, \rho) + b^{-1}(E) = [L_b^{(+)\text{in/out}}(E, \rho) + b(E)]^{-1}, \quad (4.50)$$

a ponadto

$$[L_b^{(\pm)\text{in/out}}(E, \rho)]^\dagger = L_{b^\dagger}^{(\pm)\text{out/in}}(E, \rho) \quad (4.51)$$

oraz

$$L_b^{(\pm)\text{in/out}}(E, \rho) + b^{\pm 1}(E) = L_{b'}^{(\pm)\text{in/out}}(E, \rho) + [b'(E)]^{\pm 1}. \quad (4.52)$$

Wybierając macierz $b(E)$ następująco

$$b(E) = \left(\frac{2mc}{\hbar} \right) [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} Q^{\text{out}}(E, \rho), \quad (4.53)$$

z równania (4.44) mamy

$$L_b^{(+)\text{out}}(E, \rho) = 0 \quad (4.54)$$

i równanie (4.46) przyjmuje szczególnie prostą postać [122]

$$U(E) = [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} P^{\text{in}}(E, \rho) + 2i\varepsilon \left(\frac{2mc}{\hbar} \right) [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} R_b^{(+)}(E, \rho) [P^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1}, \quad (4.55)$$

będącą odpowiednikiem nierelatywistycznej formuły Kapura–Peierlsa (2.64). Zauważmy dalej, że dla $b(E)$ danego równaniem (4.53) zachodzi

$$b^{-1}(E) = \left(\frac{2mc}{\hbar} \right)^{-1} [Q^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} P^{\text{out}}(E, \rho) \quad (4.56)$$

i w konsekwencji (patrz równanie (4.49))

$$L_b^{(-)\text{out}}(E, \rho) = 0, \quad (4.57)$$

co pozwala przepisać równanie (4.48) w postaci

$$U(E) = [Q^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} Q^{\text{in}}(E, \rho) - 2i\varepsilon \left(\frac{2mc}{\hbar} \right)^{-1} [Q^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1} R_b^{(-)}(E, \rho) [Q^{\text{out}}(E, \rho)]^{-1}, \quad (4.58)$$

równoważnej równaniu (4.55).

Z tych samych przyczyn, które przedstawiliśmy w zakończeniu rozdziału 2, w dalszym ciągu pracy ograniczymy się wyłącznie do prezentacji teorii R -macierzy dla równania Diraca w przypadku, gdy macierz $b(E)$ jest hermitowska.

Rozdział 5

TEORIA R -MACIERZY DLA RÓWNIANIA DIRACA

Celem tego rozdziału będzie prezentacja ogólnego sformułowania teorii R -macierzy dla równania Diraca przy użyciu formalizmu teorii operatorów całkowych. Poszczególne etapy dyskusji przebiegać będą podobnie, jak w rozdziale 3 poświęconym teorii dla równania Schrödingera.

5.1 Operatory $\hat{B}^{(\pm)}(E)$, $\hat{R}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_0^{(\pm)}(E)$

5.1.1 Wprowadzenie

Podobnie jak w rozdziale 3, konstrukcję teorii R -macierzy dla równania Diraca przeprowadzimy dla przypadku, gdy skończona objętość reakcji $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^3$ jest ograniczona powierzchnią \mathcal{S} o dowolnym kształcie. Wektor położenia punktu należącego do wnętrza obszaru \mathcal{V} oznaczymy przez \mathbf{r} , natomiast $\boldsymbol{\rho}$ będzie wektorem położenia punktu znajdującego się na powierzchni \mathcal{S} . Przez $\mathbf{n}(\boldsymbol{\rho})$ oznaczymy wektor jednostkowy normalny do powierzchni \mathcal{S} w punkcie $\boldsymbol{\rho}$ i skierowany na zewnątrz tej powierzchni. Symbol $d^3\mathbf{r}$ oznaczać będzie infinitezymalny element objętości \mathcal{V} wokół punktu \mathbf{r} , a $d^2\boldsymbol{\rho}$ będzie infinitezymalnym *skalarным* elementem powierzchni \mathcal{S} wokół punktu $\boldsymbol{\rho}$. Jeżeli $\Phi(\mathbf{r})$ i $\Phi'(\mathbf{r})$ są dwiema odpowiednio regularnymi czteroskładnikowymi funkcjami spinorowymi, ich iloczyn skalarne objętościowy i powierzchniowy definiujemy następująco

$$\langle \Phi | \Phi' \rangle \equiv \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \Phi^\dagger(\mathbf{r}) \Phi'(\mathbf{r}), \quad (\Phi | \Phi') \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho} \Phi^\dagger(\boldsymbol{\rho}) \Phi'(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.1.1)$$

gdzie symbol \dagger oznacza macierzowe sprzężenie hermitowskie.

Niech $L_{(1)}^2(\mathcal{V})$ będzie przestrzenią Hilberta czteroskładnikowych funkcji spinorowych całkowalnych z kwadratem w objętości \mathcal{V} i niech $L_{(1)}^2(\mathcal{S})$ będzie przestrzenią Hilberta czteroskładnikowych funkcji spinorowych całkowalnych z kwadratem na powierzchni \mathcal{S} . Przestrzeń Hilberta $L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S})$ definiujemy jako przestrzeń takich czteroskładnikowych funkcji powierzchniowych $\{\Phi^{(+)}(\boldsymbol{\rho})\}$, dla których

$$\beta^{(-)} \Phi^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (5.1.2)$$

oraz

$$(\Phi^{(+)} | \Phi^{(+)}) = (\Phi^{(+)} | \beta^{(+)} \Phi^{(+)}) < \infty. \quad (5.1.3)$$

Analogicznie, przestrzeń Hilberta $L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S})$ definiujemy jako przestrzeń takich czteroskładnikowych funkcji powierzchniowych $\{\Phi^{(-)}(\boldsymbol{\rho})\}$, dla których

$$\beta^{(+)} \Phi^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (5.1.4)$$

oraz

$$(\Phi^{(-)} | \Phi^{(-)}) = (\Phi^{(-)} | \beta^{(-)} \Phi^{(-)}) < \infty. \quad (5.1.5)$$

Symbolicznie możemy zapisać

$$L_{(1)}^{2(\pm)}(\mathcal{S}) = \beta^{(\pm)} L_{(1)}^2(\mathcal{S}). \quad (5.1.6)$$

Przestrzenie $L_{(1)}^{2(\pm)}(\mathcal{S})$ są podprzestrzeniami przestrzeni $L_{(1)}^2(\mathcal{S})$, przy czym $L_{(1)}^2(\mathcal{S})$ jest sumą prostą $L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S})$ i $L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S})$,

$$L_{(1)}^2(\mathcal{S}) = L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S}) \oplus L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S}), \quad (5.1.7)$$

gdź każdą funkcję z $L_{(1)}^2(\mathcal{S})$, powiedzmy $\Phi(\rho)$, można jednoznacznie przedstawić w postaci sumy funkcji $\beta^{(+)} \Phi(\rho) \in L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S})$ i funkcji $\beta^{(-)} \Phi(\rho) \in L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S})$.

Wprowadźmy funkcję macierzową

$$\alpha_n(\rho) = \mathbf{n}(\rho) \cdot \boldsymbol{\alpha} \quad (5.1.8)$$

oraz cztery macierze

$$\beta^{(\pm)} = \frac{\mathcal{I} \pm \beta}{2}, \quad \alpha_n^{(\pm)}(\rho) = \beta^{(\pm)} \alpha_n(\rho), \quad (5.1.9)$$

gdzie \mathcal{I} oznacza jednostkową macierz 4×4 , zaś $\boldsymbol{\alpha}$ i β są macierzami zdefiniowanymi równaniem (4.3). Macierze $\alpha_n^{(\pm)}(\rho)$ i $\beta^{(\pm)}$ spełniają następujące oczywiste relacje

$$\alpha_n^{(+)}(\rho) + \alpha_n^{(-)}(\rho) = \alpha_n(\rho), \quad \beta^{(+)} + \beta^{(-)} = \mathcal{I}, \quad (5.1.10)$$

$$\alpha_n^{(\pm)\dagger}(\rho) = \alpha_n^{(\mp)}(\rho), \quad \beta^{(\pm)\dagger} = \beta^{(\pm)}. \quad (5.1.11)$$

Zachodzą również następujące związki

$$\beta^{(\pm)} \beta^{(\pm)} = \beta^{(\pm)}, \quad \beta^{(\pm)} \beta^{(\mp)} = 0, \quad (5.1.12)$$

$$\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \alpha_n^{(\pm)}(\rho) = 0, \quad \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \alpha_n^{(\mp)}(\rho) = \beta^{(\pm)}, \quad (5.1.13)$$

$$\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \beta^{(\pm)} = 0, \quad \beta^{(\pm)} \alpha_n^{(\pm)}(\rho) = \alpha_n^{(\pm)}(\rho), \quad (5.1.14)$$

$$\beta^{(\pm)} \alpha_n^{(\mp)}(\rho) = 0, \quad \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \beta^{(\mp)} = \alpha_n^{(\pm)}(\rho), \quad (5.1.15)$$

które wynikają z definicji (5.1.8) i (5.1.9) oraz z relacji antykomutacji [138]

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\mathcal{I} \delta_{ij}, \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0. \quad (5.1.16)$$

W dalszym ciągu będziemy stosowali następującą konwencję notacyjną: gdy macierze $\alpha_n^{(\pm)}(\rho)$ mnożą dowolny operator całkowy $\hat{\mathcal{O}}$ o jądrze całkowym $\mathcal{O}(\rho, \rho')$, wówczas pomijamy ich argumenty, przyjmując, że $\alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathcal{O}}$ i $\hat{\mathcal{O}} \alpha_n^{(\pm)}$ są operatorami z jądrami odpowiednio $\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \mathcal{O}(\rho, \rho')$ i $\mathcal{O}(\rho, \rho') \alpha_n^{(\pm)}(\rho')$.

5.1.2 Operatory $\hat{B}^{(\pm)}(E)$

Rozważamy sytuację, w której cząstka Diraca o spinie $\frac{1}{2}$, masie spoczynkowej m i energii całkowitej E (zawierającej w sobie energię spoczynkową) porusza się w polu sił o potencjale \hat{V} . Przyjmujemy, że potencjał może być nielokalny (z zastrzeżeniem, że nielokalność jest ograniczona do obszaru \mathcal{V}) i że jest reprezentowany przez hermitowskie jądro całkowe $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V^\dagger(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ będące macierzą 4×4 . Stan cząstki jest opisywany czteroskładnikową funkcją falową $\Psi(E, \mathbf{r})$. W obszarze \mathcal{V} funkcja $\Psi(E, \mathbf{r})$ jest rozwiązaniem niezależnego od czasu równania Diraca

$$[\hat{H} - E]\Psi(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (5.1.17)$$

gdzie \hat{H} jest hamiltonianem o postaci

$$\hat{H} = -i\hbar\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 + \hat{V}, \quad (5.1.18)$$

przy czym

$$\hat{V}\Psi(E, \mathbf{r}) = \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi(E, \mathbf{r}') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}). \quad (5.1.19)$$

Zbiór tych wszystkich funkcji $\{\Psi(E, \mathbf{r})\}$, które dla pewnej ustalonej *rzeczywistej* wartości energii E są rozwiązaniami równania Diraca (5.1.17) w objętości \mathcal{V} , oznaczymy przez $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$, natomiast przez $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}(E)$ oznaczymy zbiór powierzchniowych części funkcji należących do zbioru $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$. Zastosowanie tych samych oznaczeń, które wykorzystywaliśmy w rozdziale 3, nie powinno prowadzić do nieporozumień.

Po tych uwagach wstępnych jesteśmy przygotowani do znalezienia relatywistycznych odpowiedników operatora $\hat{B}(E)$ odgrywającego istotną rolę w nierelatywistycznym sformułowaniu teorii omawianym w rozdziale 3. Niech $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ będą dwiema funkcjami należącymi do $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$. Stosując twierdzenie całkowe Gaussa, mamy

$$\langle \hat{H}\Psi' | \Psi \rangle - \langle \Psi' | \hat{H}\Psi \rangle = (\Psi' | i\hbar\alpha_n \Psi). \quad (5.1.20)$$

Ze względu na założoną rzeczywistość energii E , z równania (5.1.17) wynika, że lewa strona równania (5.1.20) znika i otrzymujemy

$$(\Psi' | i\alpha_n \Psi) = 0. \quad (5.1.21)$$

Wykorzystując równania (5.1.10) i (5.1.11), możemy przepisać równanie (5.1.21) w dwóch równoważnych postaciach

$$(i\alpha_n^{(+)}\Psi' | \Psi) = (\Psi' | i\alpha_n^{(+)}\Psi), \quad (i\alpha_n^{(-)}\Psi' | \Psi) = (\Psi' | i\alpha_n^{(-)}\Psi). \quad (5.1.22)$$

Równania (5.1.22) można formalnie interpretować w ten sposób, że macierze $i\alpha_n^{(\pm)}$, traktowane jako operatory w $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$, w działaniu na funkcje, które w objętości \mathcal{V} spełniają równanie Diraca (5.1.17), są hermitowskie względem powierzchniowego

iloczynu skalarnego (\cdot). Wprowadzimy teraz dwa liniowe hermitowskie operatory całkowe $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ zdefiniowane na przestrzeni $L^2_{(\cdot)}(\mathcal{S})$ i takie, że^{5A}

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)}\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (5.1.23)$$

dla dowolnego rozwiązania równania (5.1.17) przy energii E . Zarówno w równaniu (5.1.23), jak i dalej, $\gamma^{(\pm)}$ są współczynnikami liczbowymi równymi

$$\gamma^{(\pm)} = \pm \left(\frac{\hbar}{2mc} \right)^{\pm 1}. \quad (5.1.24)$$

Zauważmy, że zachodzi związek

$$\gamma^{(\pm)}\gamma^{(\mp)} = -1. \quad (5.1.25)$$

Operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ zdefiniowane równaniem (5.1.23) są reprezentowane przez swoje jądra całkowe $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$, będące macierzami 4×4 , z pomocą których równanie (5.1.23) można równoważnie przepisać w postaci

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho}' \mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')\Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.1.26)$$

Lewa strona powyższego równania nie ulega zmianie po podziałaniu na nią z lewa przez $\beta^{(\pm)}$. Narzuca to na jądra $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ następujący warunek

$$\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \beta^{(\pm)}\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.1.27)$$

Ponieważ operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ są hermitowskie, jądra $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ muszą spełniać relację symetrii

$$\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{B}^{(\pm)\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}', \boldsymbol{\rho}). \quad (5.1.28)$$

Z równań (5.1.27) i (5.1.28) wynika, że

$$\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \beta^{(\pm)}\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')\beta^{(\pm)}. \quad (5.1.29)$$

W postaci abstrakcyjnej równanie (5.1.29) można zapisać jako

$$\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) = \beta^{(\pm)}\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)\beta^{(\pm)}. \quad (5.1.30)$$

^{5A} Podkreślamy, że operatory $i\alpha_n^{(\pm)}$ i $\gamma^{(\pm)}\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ *nie* są identyczne (porównaj przypis 3A na stronie 24) i dla dowolnej czteroskładnikowej funkcji spinorowej $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ zdefiniowanej na powierzchni \mathcal{S} w ogólności zachodzi

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Phi(\boldsymbol{\rho}) \neq \gamma^{(\pm)}\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5A.1)$$

chyba że funkcja $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ należy do zbioru $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}(E)$, to znaczy jest częścią powierzchniową pewnej funkcji będącej rozwiązaniem równania Diraca (5.1.17) dla energii E . Różnicę pomiędzy operatorami $i\alpha_n^{(\pm)}$ i $\gamma^{(\pm)}\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ widać choćby stąd, że podczas gdy jądra $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ spełniają relację (5.1.29), dla jąder $i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')$ operatorów $i\alpha_n^{(\pm)}$, jak wynika z równań (5.1.14) i (5.1.15), zachodzi

$$\beta^{(\pm)}[i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')] \beta^{(\pm)} = 0. \quad (5A.2)$$

Prawdziwość równania (5A.1) udowodnimy w dalszej części tego podrozdziału, na stronie 71.

W podrozdziale 5.2 pokażemy, w jaki sposób jądra operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ są powiązane z funkcją Greena pewnego zagadnienia brzegowego.

Znajdziemy rozwinięcia spektralne jąder $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. Rozważmy w tym celu podzbiór $\{\Psi_i(E, \boldsymbol{r})\}$ zbioru $\mathcal{D}_V(E)$ składający się z funkcji, które na powierzchni \mathcal{S} spełniają warunek brzegowy

$$i\alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho})\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(+)}b_i(E)\beta^{(+)}\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.1.31)$$

Stałe $\{b_i(E)\}$ w warunku (5.1.31) w ogólności będą różne dla różnych funkcji $\{\Psi_i(E, \boldsymbol{r})\}$. Korzystając z równania (5.1.23) definiującego operator $\hat{B}^{(+)}(E)$, związek (5.1.31) możemy przepisać w postaci

$$\hat{B}^{(+)}(E)\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) = b_i(E)\beta^{(+)}\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (5.1.32)$$

z której wynika, że funkcje powierzchniowe $\{\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\}$ można traktować jako funkcje własne operatora $\hat{B}^{(+)}(E)$ z (osobliwą) wagą $\beta^{(+)}$, a stałe $\{b_i(E)\}$ jako odpowiednie wartości własne.^{5b} Ponieważ operatory $\hat{B}^{(+)}(E)$ i $\beta^{(+)}$ są hermitowskie względem powierzchniowego iloczynu skalarnego $(|)$, w standardowy sposób można pokazać, że ich wartości własne $\{b_i(E)\}$ są rzeczywiste, a funkcje własne odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne na powierzchni \mathcal{S} z wagą $\beta^{(+)}$

$$(\Psi_i|\beta^{(+)}\Psi_j) = 0 \quad (b_i(E) \neq b_j(E)). \quad (5.1.33)$$

W dalszym ciągu rozważań, bez utraty ogólności, będziemy zakładali, że funkcje własne odpowiadające zdegenerowanym wartościom własnym (o ile takie występują) są również ortogonalne na powierzchni \mathcal{S} z wagą $\beta^{(+)}$ i że wszystkie funkcje własne zostały znormalizowane do jedności w sensie

$$(\Psi_i|\beta^{(+)}\Psi_i) = 1. \quad (5.1.34)$$

Wówczas dla dwóch dowolnych funkcji własnych operatora $\hat{B}^{(+)}(E)$ zachodzi

$$(\Psi_i|\beta^{(+)}\Psi_j) = \delta_{ij}. \quad (5.1.35)$$

Założymy ponadto, że funkcje $\{\beta^{(+)}\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\}$ tworzą układ zupełny w przestrzeni $L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S})$ i że odpowiednia relacja zupełności ma postać^{5c}

$$\sum_i \beta^{(+)}\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\Psi_i^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}')\beta^{(+)} = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')\beta^{(+)}. \quad (5.1.36)$$

Z postaci całkowej równania własnego (5.1.32)

$$\int_{\mathcal{S}} d^2\rho' \mathcal{B}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}') = b_i(E)\beta^{(+)}\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (5.1.37)$$

^{5b} Jak wynika z równań (5.1.30) i (5.1.32), funkcje $\{\beta^{(+)}\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\}$ są funkcjami własnymi operatora $\hat{B}^{(+)}(E)$ z wagą jednostkową.

^{5c} Podobnie jak w przypadku nierelatywistycznym dyskutowanym w podrozdziale 3.1, tak i tym razem autor nie jest w stanie podać dowodu zupełności układu funkcji $\{\beta^{(+)}\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\}$ w ogólnym przypadku dowolnego potencjału \hat{V} i dowolnego kształtu powierzchni \mathcal{S} . Dowód dla przypadku szczególnego, gdy potencjał \hat{V} jest lokalny i sferycznie symetryczny, a powierzchnia \mathcal{S} jest sferą o środku w centrum potencjału, przedstawiono w uzupełnieniu B.

z relacji zupełności (5.1.36) oraz z warunku normalizacyjnego (5.1.34) otrzymujemy rozwinięcie spektralne jądra $\mathcal{B}^{(+)}(E, \rho, \rho')$

$$\mathcal{B}^{(+)}(E, \rho, \rho') = \sum_i \beta^{(+)} \Psi_i(E, \rho) b_i(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(+)}. \quad (5.1.38)$$

Powyżej zdefiniowaliśmy funkcje $\{\Psi_i(E, \mathbf{r})\}$ jako te szczególne rozwiązania równania Diraca (5.1.17), które na powierzchni \mathcal{S} są funkcjami własnymi operatora $\hat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$ z wagą $\beta^{(+)}$ (porównaj (5.1.32)). Pokażemy teraz, że funkcje powierzchniowe $\{\Psi_i(E, \rho)\}$ są jednocześnie funkcjami własnymi operatora $\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$ z wagą $\beta^{(-)}$ (równoważnie, że funkcje $\{\beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho)\}$ są funkcjami własnymi operatora $\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$ z wagą jednostkową), a liczby $\{b_i^{-1}(E)\}$ są odpowiadającymi im wartościami własnymi. W tym celu przemnożmy obie strony równania (5.1.31) z lewej strony przez macierz $\alpha_n^{(-)}(\rho)$. Po przekształceniach otrzymujemy

$$i\alpha_n^{(-)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) = \gamma^{(-)} b_i^{-1}(E) \beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho), \quad (5.1.39)$$

co, po skorzystaniu z równania (5.1.23), można przepisać w postaci

$$\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E) \Psi_i(E, \rho) = b_i^{-1}(E) \beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho), \quad (5.1.40)$$

z której natychmiast wynika prawdziwość powyższego stwierdzenia. W standardowy sposób można pokazać, że z równania (5.1.40) wynika, iż funkcje $\{\Psi_i(E, \rho)\}$ spełniają następującą relację ortogonalności

$$(\Psi_i | \beta^{(-)} \Psi_j) = 0 \quad (b_i(E) \neq b_j(E)). \quad (5.1.41)$$

Okazuje się, że słuszna jest ogólniejsza relacja

$$(\Psi_i | \beta^{(-)} \Psi_j) = (\gamma^{(+)} b_i^2(E) \delta_{ij}), \quad (5.1.42)$$

zachodzi bowiem ciąg równości

$$\begin{aligned} (\Psi_i | \beta^{(-)} \Psi_j) &= (\Psi_i | -i\alpha_n^{(-)} i\alpha_n^{(+)} \Psi_j) = (i\alpha_n^{(+)} \Psi_i | i\alpha_n^{(+)} \Psi_j) \\ &= (\gamma^{(+)} b_i(E) b_j(E) (\beta^{(+)} \Psi_i | \beta^{(+)} \Psi_j)) \\ &= (\gamma^{(+)} b_i(E) b_j(E) (\Psi_i | \beta^{(+)} \Psi_j)) = (\gamma^{(+)} b_i^2(E) \delta_{ij}), \end{aligned} \quad (5.1.43)$$

którego poszczególne elementy wynikają odpowiednio z równań (5.1.13), (5.1.11), (5.1.31), (5.1.11) i (5.1.12), (5.1.35). Funkcje $\{\beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho)\}$ tworzą układ zupełny w przestrzeni $L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S})$, a odpowiednia relacja zupełności, którą można otrzymać działając na równanie (5.1.36) z lewej strony macierzą $\alpha_n^{(-)}(\rho)$, z prawej strony macierzą $\alpha_n^{(+)}(\rho')$ i wykorzystując następnie związki (5.1.11)–(5.1.15), równanie (5.1.39) oraz własności funkcji delta Diraca, ma postać^{5d}

$$(\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho) b_i^{-2}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(-)} = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(-)}. \quad (5.1.44)$$

^{5d} Oczywiście, relacja zupełności (5.1.44) jest prawdziwa przy założeniu słuszności relacji (5.1.36). W tym kontekście — patrz przypis 5c na stronie 68.

Jeżeli zapiszemy równanie własne (5.1.40) w postaci całkowej,

$$\int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{B}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}') = b_i^{-1}(E) \beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (5.1.45)$$

to z równania (5.1.45), z relacji zupełności (5.1.44) oraz z relacji ortogonalności (5.1.42) wynika następująca postać rozwinięcia spektralnego jądra $\mathcal{B}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$

$$\mathcal{B}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i^{-3}(E) \Psi_i^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(-)}. \quad (5.1.46)$$

W uzupełnieniu C przedyskutujemy zależność wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ od energii.

Stwierdziliśmy powyżej, że układy funkcji $\{\beta^{(+)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\}$ oraz $\{\beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\}$ tworzą bazy ortogonalne odpowiednio w przestrzeniach $L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S})$ i $L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S})$. Ponieważ $L_{(1)}^2(\mathcal{S}) = L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S}) \oplus L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S})$, układ funkcji $\{\beta^{(+)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\} \cup \{\beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\}$ stanowi bazę (ortogonalną) w przestrzeni $L_{(1)}^2(\mathcal{S})$ i dowolna czteroskładnikowa funkcja spinorowa z tej przestrzeni, powiedzmy $\Phi(\boldsymbol{\rho})$, może zostać rozwinięta w szereg funkcji bazowych

$$\Phi(\boldsymbol{\rho}) = \sum_i a_i^{(+)}(E) \beta^{(+)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) + \sum_i a_i^{(-)}(E) \beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (5.1.47)$$

przy czym z relacji ortogonalności (5.1.35) oraz (5.1.42) wynika, że współczynniki rozwinięcia $\{a_i^{(\pm)}(E)\}$ dane są wzorami

$$a_i^{(+)}(E) = (\Psi_i | \beta^{(+)} \Phi), \quad (5.1.48)$$

$$a_i^{(-)}(E) = (\gamma^{(-)})^2 b_i^{-2}(E) (\Psi_i | \beta^{(-)} \Phi). \quad (5.1.49)$$

Oczywiście, dla dowolnej funkcji $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ współczynniki $a_i^{(+)}(E)$ i $a_i^{(-)}(E)$ z tym samym indeksem i są w ogólności *różne*

$$a_i^{(+)}(E) \neq a_i^{(-)}(E). \quad (5.1.50)$$

Można jednak pokazać, że w szczególnym przypadku, gdy $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ jest częścią powierzchniową pewnej funkcji $\Psi(E, \boldsymbol{r})$ będącej rozwiązaniem równania Diraca (5.1.17) w objętości \mathcal{V} , to znaczy gdy $\Phi(\boldsymbol{\rho}) = \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \in \mathcal{D}_S(E)$ (Czytelnik zechce zwrócić uwagę na brak indeksu przy funkcji $\Psi(E, \boldsymbol{\rho})$, która w ogólności *nie* musi być funkcją własną operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$), zachodzi

$$a_i^{(+)}(E) = a_i^{(-)}(E) \quad (\Phi(\boldsymbol{\rho}) = \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \in \mathcal{D}_S(E)), \quad (5.1.51)$$

a stąd

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = \sum_i (\Psi_i | \beta^{(+)} \Psi) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \in \mathcal{D}_S(E)) \quad (5.1.52)$$

(porównaj (5.1.47) i (5.1.48)). Prawdziwość równania (5.1.51) jest konsekwencją ciągu równości

$$\begin{aligned}
(\gamma^{(+)} b_i^2(E) a_i^{(-)}(E) &= (\Psi_i | \beta^{(-)} \Phi) = (\Psi_i | -i\alpha_n^{(-)} i\alpha_n^{(+)} \Phi) \\
&= (i\alpha_n^{(+)} \Psi_i | i\alpha_n^{(+)} \Phi) = \gamma^{(+)} b_i(E) (\beta^{(+)} \Psi_i | i\alpha_n^{(+)} \Phi) \\
&= \gamma^{(+)} b_i(E) (\Psi_i | i\alpha_n^{(+)} \Phi) = \gamma^{(+)} b_i(E) (i\alpha_n^{(+)} \Psi_i | \Phi) \\
&= (\gamma^{(+)} b_i^2(E) (\beta^{(+)} \Psi_i | \Phi) = (\gamma^{(+)} b_i^2(E) (\Psi_i | \beta^{(+)} \Phi) \\
&= (\gamma^{(+)} b_i^2(E) a_i^{(+)}(E) \quad (\Phi(\rho) = \Psi(E, \rho) \in \mathcal{D}_S(E)), \quad (5.1.53)
\end{aligned}$$

którego poszczególne elementy wynikają odpowiednio z równań (5.1.49), (5.1.13), (5.1.11), (5.1.31), (5.1.11) i (5.1.14), (5.1.22), (5.1.31), (5.1.11), (5.1.48). Zwracamy przy tym uwagę, że bez założenia, iż $\Phi(\rho) \in \mathcal{D}_S(E)$, szósta równość w ciągu (5.1.53) *nie* byłaby prawdziwa.

Udowodnimy teraz prawdziwość równania (5A.1). W tym celu podziałajmy na obie strony rozwinięcia (5.1.47) macierzami $i\alpha_n^{(\pm)}(\rho)$. Korzystając z równań (5.1.14), (5.1.15), (5.1.31) i (5.1.39), w wyniku otrzymujemy

$$\begin{aligned}
i\alpha_n^{(\pm)}(\rho)\Phi(\rho) &= i\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \sum_i a_i^{(\mp)}(E) \beta^{(\mp)} \Psi_i(E, \rho) \\
&= \gamma^{(\pm)} \sum_i b_i^{\pm 1}(E) a_i^{(\mp)}(E) \beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho). \quad (5.1.54)
\end{aligned}$$

Działając z kolei na rozwinięcie (5.1.47) z lewej strony operatorami $\gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i korzystając następnie z równań (5.1.30), (5.1.32) oraz (5.1.40), dostajemy

$$\begin{aligned}
\gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)\Phi(\rho) &= \gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) \sum_i a_i^{(\pm)}(E) \beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho) \\
&= \gamma^{(\pm)} \sum_i b_i^{\pm 1}(E) a_i^{(\pm)}(E) \beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho). \quad (5.1.55)
\end{aligned}$$

Z niezależności liniowej układów funkcji $\{\beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho)\}$ wynika, że prawe strony równań (5.1.54) i (5.1.55) będą równe wtedy i tylko wtedy, gdy dla każdego indeksu i zachodzi $a_i^{(+)}(E) = a_i^{(-)}(E)$. Powyżej zauważyliśmy jednak, że w ogólności dla dowolnej funkcji $\Phi(\rho)$ taka równość nie zachodzi (patrz równanie (5.1.50)), chyba że funkcja $\Phi(\rho)$ należy do zbioru $\mathcal{D}_S(E)$ (patrz równanie (5.1.53)). Konkludując, stwierdzamy, że z równań (5.1.50) i (5.1.53)–(5.1.55) wynika, iż dla dowolnej funkcji $\Phi(\rho)$ w ogólności zachodzi

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\rho)\Phi(\rho) \neq \gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)\Phi(\rho) \quad (5.1.56)$$

(w ten sposób dowiedliśmy słuszności równania (5A.1)), chyba że rozważamy szczególny przypadek, gdy $\Phi(\rho) = \Psi(E, \rho) \in \mathcal{D}_S(E)$, kiedy to otrzymujemy

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\rho)\Phi(\rho) = \gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)\Phi(\rho) \quad (\Phi(\rho) = \Psi(E, \rho) \in \mathcal{D}_S(E)), \quad (5.1.57)$$

co zgadza się z równaniem (5.1.23) definiującym operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$.

Opierając się na wzajemnych relacjach pomiędzy funkcjami własnymi i pomiędzy wartościami własnymi operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$ (porównaj (5.1.32) i (5.1.40)), można by oczekiwać, że operatory te są ze sobą powiązane. Pokażemy, że istotnie tak jest. W tym celu rozpatrzmy całki

$$\int_S d^2 \rho'' [\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \mathcal{B}^{(\mp)}(E, \rho, \rho'') \alpha_n^{(\mp)}(\rho'')] \mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho'', \rho').$$

Korzystając z rozwinięć spektralnych (5.1.38) i (5.1.46), z relacji ortogonalności (5.1.35) i (5.1.42), z relacji zupełności (5.1.36) i (5.1.44), a także ze związków

$$\alpha_n^{(+)}(\rho) \mathcal{B}^{(-)}(E, \rho, \rho') \alpha_n^{(-)}(\rho') = \sum_i \beta^{(+)} \Psi_i(E, \rho) b_i^{-1}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(+)}, \quad (5.1.58)$$

$$\alpha_n^{(-)}(\rho) \mathcal{B}^{(+)}(E, \rho, \rho') \alpha_n^{(+)}(\rho') = (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho) b_i^{-1}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(-)}, \quad (5.1.59)$$

które wynikają z rozwinięć (5.1.46) i (5.1.38) oraz z równań (5.1.14), (5.1.15), (5.1.31) i (5.1.39), dochodzimy do następujących zależności pomiędzy jądrami $\mathcal{B}^{(+)}(E, \rho, \rho')$ i $\mathcal{B}^{(-)}(E, \rho', \rho')$

$$\int_S d^2 \rho'' [\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \mathcal{B}^{(\mp)}(E, \rho, \rho'') \alpha_n^{(\mp)}(\rho'')] \mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho'', \rho') = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(\pm)}, \quad (5.1.60)$$

równoważnych równaniom operatorowym

$$[\alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\mp)}(E) \alpha_n^{(\mp)}] \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) = \hat{\mathcal{I}} \beta^{(\pm)}, \quad (5.1.61)$$

gdzie $\hat{\mathcal{I}}$ jest operatorem jednostkowym. Mnożąc równanie (5.1.60) z lewej strony przez $\alpha_n^{(\mp)}(\rho)$, z prawej strony przez $\alpha_n^{(\pm)}(\rho')$, korzystając z relacji (5.1.13) i z własności funkcji delta Diraca oraz przedstawiając nawiasy kwadratowe, otrzymujemy związki

$$\int_S d^2 \rho'' \mathcal{B}^{(\mp)}(E, \rho, \rho'') [\alpha_n^{(\mp)}(\rho'') \mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho'', \rho') \alpha_n^{(\pm)}(\rho')] = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(\mp)}, \quad (5.1.62)$$

równoważne równaniom operatorowym

$$\hat{\mathcal{B}}^{(\mp)}(E) [\alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) \alpha_n^{(\pm)}] = \hat{\mathcal{I}} \beta^{(\mp)}. \quad (5.1.63)$$

Z równań (5.1.61) i (5.1.63) wynika, że operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\mp)}(E) \alpha_n^{(\mp)}$ są wzajemnie odwrotne w uogólnionym sensie (gdyż po prawych stronach obu równań stoją nie operatory jednostkowe, lecz operatory rzutowe $\hat{\mathcal{I}} \beta^{(\pm)}$).

Zwróćmy jeszcze uwagę Czytelnika, że z równań (5.1.31) i (5.1.39) wynika, iż relacje zupełności (5.1.36) oraz (5.1.44) można przepisać w następujących postaciach

$$(\gamma^{(-)})^2 \sum_i \alpha_n^{(+)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) b_i^{-2}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \alpha_n^{(-)}(\rho') = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(+)}, \quad (5.1.64)$$

$$\sum_i \alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_i^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}') \beta^{(-)}. \quad (5.1.65)$$

Ponadto, rozwinięcia spektralne (5.1.38) oraz (5.1.46) można przepisać w postaciach

$$\mathcal{B}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i^{-1}(E) \Psi_i^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho}'), \quad (5.1.66)$$

$$\mathcal{B}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \sum_i \alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i^{-1}(E) \Psi_i^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho}'). \quad (5.1.67)$$

Z równań (5.1.64)–(5.1.67) skorzystamy w podrozdziale 6.3.3.

5.1.3 Operatory $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$

Niech $\hat{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathfrak{b}}^{(-)}(E)$ będą dwoma hermitowskimi liniowymi operatorami całkowymi zdefiniowanymi na przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$, posiadającymi odpowiednio jądra całkowe $\mathfrak{b}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ i $\mathfrak{b}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. W dalszym ciągu będziemy zakładali, że operatory $\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ spełniają relacje

$$\beta^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \beta^{(\pm)} = \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \quad (5.1.68)$$

(porównaj (5.1.30)) oraz

$$\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\mp)}(E) \alpha_n^{(\mp)} = \alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\mp)}(E) \alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) = \hat{\mathcal{I}} \beta^{(\pm)} \quad (5.1.69)$$

(porównaj (5.1.61) i (5.1.63)). Definiujemy operatory całkowe $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(-)}(E)$, o własności^{5E}

$$\beta^{(\pm)} \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) \beta^{(\pm)} = \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E), \quad (5.1.70)$$

jako operatory odwrotne odpowiednio do operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(+)}(E) - \hat{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E) - \hat{\mathfrak{b}}^{(-)}(E)$ w sensie równania

$$\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) [\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) - \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] = [\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) - \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) = \hat{\mathcal{I}} \beta^{(\pm)}. \quad (5.1.71)$$

W podrozdziale 5.3 pokażemy, w jaki sposób zdefiniowany powyżej operator $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(+)}(E)$ związany jest z operatorem $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$ odgrywającym kluczową rolę w teorii nierelatywistycznej omówionej w rozdziale 3.

Operatory $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E)$ są reprezentowane przez swoje jądra całkowe $\mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. W języku jąder całkowych relacja odwrotności (5.1.71) ma postać

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}'' \mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') [\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') - \mathfrak{b}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}')] \\ &= \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}'' [\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') - \mathfrak{b}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'')] \mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}. \end{aligned} \quad (5.1.72)$$

^{5E} W zasadzie logiczniej byłoby używać następujących oznaczeń: $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)}$ zamiast $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(+)}(E)$ oraz $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}^{(-)}(E)}$ zamiast $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(-)}(E)$. Autor zdecydował się jednak na stosowanie bardziej czytelnych oznaczeń $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E)$.

Ponieważ operatory $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{b}^{(\pm)}(E)$ są hermitowskie, z równania (5.1.71) wynika, że operatory $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ także muszą być hermitowskie, czyli

$$\mathcal{R}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = \mathcal{R}_b^{(\pm)\dagger}(E, \rho', \rho). \quad (5.1.73)$$

Wykorzystując operatory $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$, możemy przepisać warunek brzegowy (5.1.23) i (5.1.26) w postaci abstrakcyjnej

$$\beta^{(\pm)}\Psi(E, \rho) = -\gamma^{(\mp)}\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)[i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}\hat{b}^{(\pm)}(E)]\Psi(E, \rho) \quad (5.1.74)$$

lub w równoważnej jej postaci całkowej

$$\beta^{(\pm)}\Psi(E, \rho) = -\gamma^{(\mp)} \int_{\mathcal{S}} d^2\rho' \mathcal{R}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho')[i\alpha_n^{(\pm)}(\rho') - \gamma^{(\pm)}\hat{b}^{(\pm)}(E)]\Psi(E, \rho'). \quad (5.1.75)$$

W dalszym ciągu naszych rozważań będziemy wykorzystywali także operatory $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$. Pierwszy z nich, $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$ z jądrem całkowym $\mathcal{R}^{(+)}(E, \rho, \rho')$, definiujemy jako szczególny przypadek operatora $\hat{\mathcal{R}}_b^{(+)}(E)$ w sytuacji, gdy $\hat{b}^{(+)}(E)$ jest operatorem zerowym, $\hat{b}^{(+)}(E) = \hat{o}$. Analogicznie, operator $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$ z jądrem całkowym $\mathcal{R}^{(-)}(E, \rho, \rho')$ definiujemy jako szczególny przypadek operatora $\hat{\mathcal{R}}_b^{(-)}(E)$ w sytuacji, gdy $\hat{b}^{(-)}(E) = \hat{o}$. Z równania (5.1.71) wynika, że zachodzi

$$\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)\hat{B}^{(\pm)}(E) = \hat{B}^{(\pm)}(E)\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E) = \hat{I}\beta^{(\pm)}, \quad (5.1.76)$$

to znaczy operatory $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$ i $\hat{B}^{(+)}(E)$ oraz $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$ i $\hat{B}^{(-)}(E)$ są, w uogólnionym sensie (patrz uwaga następująca po równaniu (5.1.63)), wzajemnie odwrotne. Odpowiednia relacja dla jąder całkowych ma postać

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{S}} d^2\rho'' \mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho'')\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho'', \rho') \\ &= \int_{\mathcal{S}} d^2\rho'' \mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho, \rho'')\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho'', \rho') = \delta^{(2)}(\rho - \rho')\beta^{(\pm)}. \end{aligned} \quad (5.1.77)$$

Jako operatory wzajemnie odwrotne, $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$ i $\hat{B}^{(+)}(E)$ mają wspólne funkcje własne, podobnie jak operatory $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$ i $\hat{B}^{(-)}(E)$. Z równań (5.1.32), (5.1.40) i (5.1.76) otrzymuje się następujące równania własne dla operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$

$$\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)\Psi_i(E, \rho) = b_i^{-1}(E)\beta^{(+)}\Psi_i(E, \rho), \quad (5.1.78)$$

$$\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)\Psi_i(E, \rho) = b_i(E)\beta^{(-)}\Psi_i(E, \rho) \quad (5.1.79)$$

oraz ich odpowiedniki całkowe

$$\int_{\mathcal{S}} d^2\rho' \mathcal{R}^{(+)}(E, \rho, \rho')\Psi_i(E, \rho') = b_i^{-1}(E)\beta^{(+)}\Psi_i(E, \rho), \quad (5.1.80)$$

$$\int_S d^2 \rho' \mathcal{R}^{(-)}(E, \rho, \rho') \Psi_i(E, \rho') = b_i(E) \beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho). \quad (5.1.81)$$

Stąd, a także z relacji zupełności (5.1.36) i (5.1.44) oraz z relacji ortogonalności (5.1.35) i (5.1.42), wynikają następujące postacie rozwinięć spektralnych jąder $\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$

$$\mathcal{R}^{(+)}(E, \rho, \rho') = \sum_i \beta^{(+)} \Psi_i(E, \rho) b_i^{-1}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(+)}, \quad (5.1.82)$$

$$\mathcal{R}^{(-)}(E, \rho, \rho') = (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \rho) b_i^{-1}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(-)}, \quad (5.1.83)$$

które, po uwzględnieniu równań (5.1.31) oraz (5.1.39), można przepisać w następujących równoważnych postaciach^{5F}

$$\mathcal{R}^{(+)}(E, \rho, \rho') = (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \alpha_n^{(+)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) b_i^{-3}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \alpha_n^{(-)}(\rho'), \quad (5.1.84)$$

$$\mathcal{R}^{(-)}(E, \rho, \rho') = \sum_i \alpha_n^{(-)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) b_i(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \alpha_n^{(+)}(\rho'). \quad (5.1.85)$$

Z rozwinięć (5.1.38), (5.1.46), (5.1.82) i (5.1.83) oraz z równań własnych (5.1.31) i (5.1.39) wynika, że jądra całkowe $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ i $\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ są związane relacjami

^{5F} Czytelnik zechce zwrócić uwagę na asymetrię pomiędzy równaniami (5.1.35) i (5.1.42), (5.1.36) i (5.1.44), (5.1.64) i (5.1.65), (5.1.38) i (5.1.46), (5.1.66) i (5.1.67), (5.1.82) i (5.1.83), (5.1.84) i (5.1.85), będącą konsekwencją przyjętej przez nas konwencji normalizacyjnej w równaniu (5.1.34). Konwencję tę zastosowaliśmy po to, by warunki ortogonalności (3.1.17) i (5.1.35) miały podobną postać. Gdybyśmy jednak unormowali funkcje własne $\{\Psi_i(E, \rho)\}$ w taki sposób, by

$$(\Psi_i | \beta^{(+)} \Psi_i) = -\gamma^{(-)} |b_i(E)|^{-1}, \quad (5F.I)$$

wówczas wymienione wyżej pary równań przyjęłyby następujące symetryczne postacie

$$(\Psi_i | \beta^{(\pm)} \Psi_j) = \mp \gamma^{(\mp)} |b_i(E)|^{\mp 1} \delta_{ij}, \quad (5F.II)$$

$$\pm \gamma^{(\pm)} \sum_i \beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho) |b_i(E)|^{\pm 1} \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(\pm)} = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(\pm)}, \quad (5F.III)$$

$$\mp \gamma^{(\mp)} \sum_i \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) |b_i(E)|^{\mp 1} \Psi_i^\dagger(E, \rho') \alpha_n^{(\mp)}(\rho') = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(\pm)}, \quad (5F.IV)$$

$$\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = \pm \gamma^{(\pm)} \sum_i \beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho) \operatorname{sgn}[b_i(E)] b_i^{\pm 2}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(\pm)}, \quad (5F.V)$$

$$\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = \mp \gamma^{(\mp)} \sum_i \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) \operatorname{sgn}[b_i(E)] \Psi_i^\dagger(E, \rho') \alpha_n^{(\mp)}(\rho'), \quad (5F.VI)$$

$$\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = \pm \gamma^{(\pm)} \sum_i \beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho) \operatorname{sgn}[b_i(E)] \Psi_i^\dagger(E, \rho') \beta^{(\pm)}, \quad (5F.VII)$$

$$\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = \mp \gamma^{(\mp)} \sum_i \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) \operatorname{sgn}[b_i(E)] b_i^{\mp 2}(E) \Psi_i^\dagger(E, \rho') \alpha_n^{(\mp)}(\rho'). \quad (5F.VIII)$$

$$\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \mathcal{B}^{(\mp)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}'). \quad (5.1.86)$$

Operatorowymi odpowiednikami relacji (5.1.86) są związki

$$\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E) = \alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\mp)}(E) \alpha_n^{(\mp)}, \quad (5.1.87)$$

które wynikają także z równań (5.1.61), (5.1.63) oraz (5.1.76).

5.1.4 Związek pomiędzy operatorowym i macierzowym sformułowaniem teorii

Niech $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$ będzie pewną spinorową bazą w przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$, ortonormalną względem powierzchniowego iloczynu skalarnego $(|)$. Jądra całkowe operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$, $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ oraz $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ posiadają w tej bazie następujące rozwinięcia biliniowe

$$\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \sum_{i,j} \beta^{(\pm)} \Phi_i(\boldsymbol{\rho}) (\Phi_i | \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi_j) \Phi_j^\dagger(\boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}, \quad (5.1.88)$$

$$\mathbf{b}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \sum_{i,j} \beta^{(\pm)} \Phi_i(\boldsymbol{\rho}) (\Phi_i | \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \Phi_j) \Phi_j^\dagger(\boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}, \quad (5.1.89)$$

$$\mathcal{R}_b^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \sum_{i,j} \beta^{(\pm)} \Phi_i(\boldsymbol{\rho}) (\Phi_i | \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)} \Phi_j) \Phi_j^\dagger(\boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}. \quad (5.1.90)$$

Występujące w tych rozwinięciach współczynniki

$$(\Phi_i | \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi_j) \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \Phi_i^\dagger(\boldsymbol{\rho}) \mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Phi_j(\boldsymbol{\rho}'), \quad (5.1.91)$$

$$(\Phi_i | \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \Phi_j) \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \Phi_i^\dagger(\boldsymbol{\rho}) \mathbf{b}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Phi_j(\boldsymbol{\rho}') \quad (5.1.92)$$

oraz

$$(\Phi_i | \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)} \Phi_j) \equiv \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \Phi_i^\dagger(\boldsymbol{\rho}) \mathcal{R}_b^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Phi_j(\boldsymbol{\rho}'), \quad (5.1.93)$$

będące elementami macierzowymi operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$, $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ oraz $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ w bazie $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$, tworzą macierze $\mathbf{B}^{(\pm)}(E)$, $\mathbf{b}^{(\pm)}(E)$ oraz $\mathbf{R}_b^{(\pm)}(E)$ związane zależnościami

$$\mathbf{R}_b^{(\pm)}(E) [\mathbf{B}^{(\pm)}(E) - \mathbf{b}^{(\pm)}(E)] = [\mathbf{B}^{(\pm)}(E) - \mathbf{b}^{(\pm)}(E)] \mathbf{R}_b^{(\pm)}(E) = \mathbf{I}^{(\pm)}, \quad (5.1.94)$$

przy czym $\mathbf{I}^{(\pm)}$ są macierzami kwadratowymi o elementach $\{I_{ij}^{(\pm)} = (\Phi_i | \beta^{(\pm)} \Phi_j)\}$. Równanie (5.1.94) otrzymuje się, rzutując obustronnie równanie (5.1.71) na funkcje bazowe. Macierze $\mathbf{R}_b^{(+)}(E)$ i $\mathbf{R}_b^{(-)}(E)$ noszą nazwę R -macierzy dla równania Diraca (5.1.17) w reprezentacji $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$.

W szczególnym przypadku, gdy $\mathbf{b}^{(+)}(E)$ jest macierzą zerową, $\mathbf{b}^{(+)}(E) = 0$, R -macierz $\mathbf{R}^{(+)}(E) \equiv \mathbf{R}_b^{(+)}(E)$ jest macierzą operatora $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$ w bazie $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$. Podobnie, w szczególnym przypadku, gdy $\mathbf{b}^{(-)}(E)$ jest macierzą zerową, $\mathbf{b}^{(-)}(E) = 0$,

R -macierz $\mathbf{R}^{(-)}(E) \equiv \mathbf{R}_b^{(-)}(E)$ jest macierzą operatora $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$ w bazie $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$. Macierze $\mathbf{R}^{(\pm)}(E)$ i $\mathbf{B}^{(\pm)}(E)$ są wzajemnie odwrotne w sensie równania

$$\mathbf{R}^{(\pm)}(E)\mathbf{B}^{(\pm)}(E) = \mathbf{B}^{(\pm)}(E)\mathbf{R}^{(\pm)}(E) = \mathbf{I}^{(\pm)}. \quad (5.1.95)$$

Zwracamy przy tym uwagę, że nie istnieją macierze odwrotne do macierzy $\mathbf{R}^{(\pm)}(E)$ i $\mathbf{B}^{(\pm)}(E)$ w zwykłym sensie, gdyż, ze względu na warunki (5.1.30) oraz (5.1.70), powyższe macierze są silnie osobliwe. Poniżej przedyskutujemy ten problem bardziej szczegółowo.

Rzutuując warunek brzegowy (5.1.74) z obu stron na funkcje bazowe $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$, otrzymujemy jego postać macierzową

$$\mathbf{P}^{(\pm)}(E) = \mathbf{R}_b^{(\pm)}(E) \left[\pm \left(\frac{2mc}{\hbar} \right)^{\pm 1} \mathbf{Q}^{(\pm)}(E) - \mathbf{b}^{(\pm)}(E)\mathbf{P}^{(\pm)}(E) \right], \quad (5.1.96)$$

przy czym $\mathbf{P}^{(\pm)}(E)$ i $\mathbf{Q}^{(\pm)}(E)$ są macierzami jednokolumnowymi o elementach odpowiednio $\{P_i^{(\pm)}(E) = (\Phi_i | \beta^{(\pm)} \Psi)\}$ i $\{Q_i^{(\pm)}(E) = (\Phi_i | i\alpha_n^{(\pm)} \Psi)\}$.

W powyższej dyskusji nie narzucaliśmy żadnych ograniczeń na bazę funkcyjną $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$ rozpinającą przestrzeń $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$. Załóżmy teraz, że wybieramy taką bazę, która jest sumą dwóch zbiorów funkcyjnych $\{\Phi_i^{(+)}(\boldsymbol{\rho})\}$ oraz $\{\Phi_i^{(-)}(\boldsymbol{\rho})\}$, stanowiących bazy ortonormalne odpowiednio w $L^2_{(1)}^{(+)}(\mathcal{S})$ i $L^2_{(1)}^{(-)}(\mathcal{S})$, to znaczy

$$\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\} = \{\Phi_i^{(+)}(\boldsymbol{\rho})\} \cup \{\Phi_i^{(-)}(\boldsymbol{\rho})\}. \quad (5.1.97)$$

Funkcje $\{\Phi_i^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\}$ posiadają następujące własności

$$\beta^{(+)}\Phi_i^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi_i^{(+)}(\boldsymbol{\rho}), \quad \beta^{(-)}\Phi_i^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (5.1.98)$$

$$\beta^{(+)}\Phi_i^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad \beta^{(-)}\Phi_i^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi_i^{(-)}(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.1.99)$$

Jeżeli funkcje bazowe ponumerujemy w taki sposób, aby dla dowolnego operatora $\hat{\mathcal{O}}$ działającego w przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$ jego macierz \mathbf{O} w bazie (5.1.97) miała postać blokową

$$\mathbf{O} = \begin{pmatrix} \mathbf{O}^{(++)} & \mathbf{O}^{(+-)} \\ \mathbf{O}^{(-+)} & \mathbf{O}^{(--) } \end{pmatrix}, \quad (5.1.100)$$

gdzie $\mathbf{O}^{(++)}$ jest macierzą kwadratową z elementami $\{O_{ij}^{(++)} = (\Phi_i^{(+)} | \hat{\mathcal{O}}\Phi_j^{(+)})\}$ i podobnie dla macierzy $\mathbf{O}^{(+-)}$, $\mathbf{O}^{(-+)}$ oraz $\mathbf{O}^{(--)}$, wówczas macierze $\mathbf{B}^{(\pm)}(E)$, $\mathbf{b}^{(\pm)}(E)$, $\mathbf{R}_b^{(\pm)}(E)$, $\mathbf{I}^{(\pm)}$ mają w tej bazie odpowiednio postacie

$$\mathbf{B}^{(+)}(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(+)}(E) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}^{(-)}(E) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{B}^{(-)}(E) \end{pmatrix}, \quad (5.1.101)$$

$$\mathbf{b}^{(+)}(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(+)}(E) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(-)}(E) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{b}^{(-)}(E) \end{pmatrix}, \quad (5.1.102)$$

$$\mathbf{R}_b^{(+)}(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_b^{(+)}(E) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_b^{(-)}(E) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{R}_b^{(-)}(E) \end{pmatrix}, \quad (5.1.103)$$

$$\mathbf{I}^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{I}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.1.104)$$

gdzie 1 jest macierzą jednostkową, natomiast macierze jednokolumnowe $P^{(\pm)}(E)$ i $Q^{(\pm)}(E)$ mają odpowiednio postacie

$$P^{(+)}(E) = \begin{pmatrix} P^{(+)}(E) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad P^{(-)}(E) = \begin{pmatrix} 0 \\ P^{(-)}(E) \end{pmatrix}, \quad (5.1.105)$$

$$Q^{(+)}(E) = \begin{pmatrix} Q^{(+)}(E) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad Q^{(-)}(E) = \begin{pmatrix} 0 \\ Q^{(-)}(E) \end{pmatrix}. \quad (5.1.106)$$

Jak widać z równań (5.1.101)–(5.1.104), macierze $\mathbf{B}^{(\pm)}(E)$, $\mathbf{b}^{(\pm)}(E)$, $\mathbf{R}_b^{(\pm)}(E)$ i $\mathbf{I}^{(\pm)}$ są silnie osobliwe (własność ta oczywiście nie zależy od wyboru bazy $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$). Jest to bezpośrednią konsekwencją równań (5.1.30), (5.1.68), (5.1.70) oraz osobliwości projektorów $\hat{I}\beta^{(\pm)}$. W przeciwieństwie, zredukowane macierze $\mathbf{B}^{(\pm)}(E)$ i $\mathbf{R}_b^{(\pm)}(E)$, związane relacjami

$$\mathbf{R}_b^{(\pm)}(E)[\mathbf{B}^{(\pm)}(E) - \mathbf{b}^{(\pm)}(E)] = [\mathbf{B}^{(\pm)}(E) - \mathbf{b}^{(\pm)}(E)]\mathbf{R}_b^{(\pm)}(E) = 1, \quad (5.1.107)$$

w ogólności *nie* są osobliwe. W szczególnym przypadku, gdy $\mathbf{b}^{(+)}(E) = 0$, macierz $\mathbf{R}^{(+)}(E) \equiv \mathbf{R}_0^{(+)}(E)$ jest odwrotna (w zwykłym sensie) do macierzy $\mathbf{B}^{(+)}(E)$. Podobnie, w przypadku, gdy $\mathbf{b}^{(-)}(E) = 0$, macierz $\mathbf{R}^{(-)}(E) \equiv \mathbf{R}_0^{(-)}(E)$ jest odwrotna (również w zwykłym sensie) do macierzy $\mathbf{B}^{(-)}(E)$. Mamy zatem

$$\mathbf{R}^{(\pm)}(E)\mathbf{B}^{(\pm)}(E) = \mathbf{B}^{(\pm)}(E)\mathbf{R}^{(\pm)}(E) = 1. \quad (5.1.108)$$

Zredukowaną postacią równania (5.1.96) w bazie (5.1.97) jest

$$P^{(\pm)}(E) = \mathbf{R}_b^{(\pm)}(E) \left[\pm \left(\frac{2mc}{\hbar} \right)^{\pm 1} Q^{(\pm)}(E) - \mathbf{b}^{(\pm)}(E)P^{(\pm)}(E) \right]. \quad (5.1.109)$$

Należy podkreślić, że, pomimo formalnego podobieństwa, równania (5.1.96) i (5.1.109) *nie* są identyczne, gdyż występujące w nich macierze różnią się wymiarami.

Przedyskutujemy teraz szczególny przypadek, w którym funkcje bazowe w zbiorach $\{\Phi_i^{(+)}(\boldsymbol{\rho})\}$ oraz $\{\Phi_i^{(-)}(\boldsymbol{\rho})\}$ wybieramy w postaci

$$\Phi_i^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) = \Omega_{\kappa m_j}^{(+)}(\boldsymbol{\rho}), \quad \Phi_i^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) = \Omega_{\kappa m_j}^{(-)}(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.1.110)$$

gdzie funkcje $\{\Omega_{\kappa m_j}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\}$ zostały zdefiniowane równaniem (4.29). W tej bazie $i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\beta^{(\pm)}$ są reprezentowane odpowiednio przez macierze

$$\text{mat}_{\{\Omega_i^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\}} [i\alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho})] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{mat}_{\{\Omega_i^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\}} [i\alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho})] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.111)$$

$$\text{mat}_{\{\Omega_i^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\}} [\beta^{(+)}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{mat}_{\{\Omega_i^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\}} [\beta^{(-)}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.1.112)$$

przy założeniu, że elementy zbiorów $\{\Omega_i^{(+)}(\rho)\}$ i $\{\Omega_i^{(-)}(\rho)\}$ zostały uporządkowane w tej samej kolejności ze względu na pary indeksów (κ, m_j) . Stąd oraz z reprezentacji macierzowej równania (5.1.69) możemy wywnioskować, że

$$\mathbf{b}^{(\pm)}(E)\mathbf{b}^{(\mp)}(E) = \mathbf{1}, \quad (5.1.113)$$

co oznacza, że macierze $\mathbf{b}^{(+)}(E)$ i $\mathbf{b}^{(-)}(E)$ są wzajemnie odwrotne. Ponadto, zachodzą relacje

$$P^{(+)}(E) = P(E, \rho), \quad P^{(-)}(E) = Q(E, \rho), \quad (5.1.114)$$

$$Q^{(+)}(E) = Q(E, \rho), \quad Q^{(-)}(E) = -P(E, \rho), \quad (5.1.115)$$

gdzie $P(E, \rho)$ i $Q(E, \rho)$ są macierzami jednokolumnowymi wprowadzonymi w rozdziale 4. Utożsamiając macierz $\mathbf{b}^{(+)}(E)$ z macierzą $\mathbf{b}(E)$ z rozdziału 4, możemy przepisać równania składające się na (5.1.109) następująco

$$P(E, \rho) = R_b^{(+)}(E) \left[\left(\frac{2mc}{\hbar} \right) Q(E, \rho) - \mathbf{b}(E)P(E, \rho) \right], \quad (5.1.116)$$

$$Q(E, \rho) = R_b^{(-)}(E) \left[\left(\frac{2mc}{\hbar} \right)^{-1} P(E, \rho) - \mathbf{b}^{-1}(E)Q(E, \rho) \right]. \quad (5.1.117)$$

Jeżeli pominąć nieistotne różnice w oznaczeniach R -macierzy, równania (5.1.116) i (5.1.117) są identyczne z równaniami odpowiednio (4.37) i (4.38).

5.2 Związek jąder całkowych $\mathcal{R}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$, $\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ i $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ z funkcjami Greena

Rozważmy następujące zagadnienie brzegowe składające się z jednorodnego, niezależnego od czasu równania Diraca

$$[-i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 + \hat{V} - E]\Psi(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (5.2.1)$$

z niejednorodnymi warunkami brzegowymi

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\rho)\Psi(E, \rho) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)\Psi(E, \rho) = \Xi^{(\pm)}(\rho) \quad (\rho \in \mathcal{S}) \quad (5.2.2)$$

narzuconymi na rozwiązania równania (5.2.1). Hermitowskie operatory $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ są tymi samymi operatorami, które zostały zdefiniowane w podrozdziale 5.1.3 i spełniają relacje (5.1.68) i (5.1.69). Jeżeli spinory $\Xi^{(\pm)}(\rho)$ występujące po prawej stronie warunku (5.2.2) są powiązane ze sobą w następujący sposób

$$\Xi^{(\pm)}(\rho) = \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)i\alpha_n^{(\pm)}(\rho)\Xi^{(\mp)}(\rho), \quad (5.2.3)$$

wówczas, korzystając z własności (5.1.13)–(5.1.15) macierzy $\alpha_n^{(\pm)}(\rho)$, z definicji (5.1.24) oraz z relacji (5.1.68) i (5.1.69), można pokazać, że oba warunki brzegowe

(5.2.2), odpowiadające wyborowi górnego lub dolnego znaku, są równoważne. Innymi słowy, jeżeli zachodzi związek (5.2.3), wówczas równania (5.2.2) stanowią jeden i ten sam warunek brzegowy. W dalszym ciągu będziemy zakładali, że relacja (5.2.3) jest spełniona.

Funkcja (a właściwie *macierz* o wymiarach 4×4) Greena $\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dla zagadnienia brzegowego (5.2.1) i (5.2.2) jest zdefiniowana jako rozwiązanie niejednorodnego równania różniczkowego

$$[-i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 + \hat{V} - E]\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathcal{I} \quad (\mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathcal{V}; \mathbf{r}' \text{ ustalone}), \quad (5.2.4)$$

spełniające na powierzchni \mathcal{S} jednorodny warunek brzegowy

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{r}') - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{r}') = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}, \mathbf{r}' \in \mathcal{V}). \quad (5.2.5)$$

Funkcja $\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ jest hermitowska w tym sensie, że spełnia relację symetrii

$$\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{G}_{\hat{b}}^\dagger(E, \mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (5.2.6)$$

Przemnożmy teraz równanie (5.2.1) z lewej strony przez $\mathcal{G}_{\hat{b}}^\dagger(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, a sprzężenie hermitowskie równania (5.2.4) z prawej strony przez $\Psi(E, \mathbf{r})$. Odejmując otrzymane równania stronami, całkując wynik po objętości \mathcal{V} i korzystając z hermitowskości operatora potencjału \hat{V} , otrzymujemy

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \Psi(E, \mathbf{r})\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = c\hbar \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \boldsymbol{\nabla} \cdot [\mathcal{G}_{\hat{b}}^\dagger(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')i\boldsymbol{\alpha}\Psi(E, \mathbf{r})]. \quad (5.2.7)$$

Lewa strona powyższego równania jest oczywiście równa $\Psi(E, \mathbf{r}')$, natomiast prawą można przekształcić, używając twierdzenia całkowego Gaussa; otrzymujemy

$$\Psi(E, \mathbf{r}') = c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho} \mathcal{G}_{\hat{b}}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{r}')i\alpha_n(\boldsymbol{\rho})\Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.2.8)$$

Skorzystamy teraz w równaniu (5.2.8) z relacji (5.1.10) wiążącej ze sobą macierze $\alpha_n(\boldsymbol{\rho})$ i $\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz z pierwszego z równań (5.1.11). Dokonując dodatkowo zamiany oznaczeń $\mathbf{r}' \rightsquigarrow \mathbf{r}$ i $\boldsymbol{\rho} \rightsquigarrow \boldsymbol{\rho}'$, dostajemy

$$\begin{aligned} \Psi(E, \mathbf{r}) &= c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho}' \mathcal{G}_{\hat{b}}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}', \mathbf{r})i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}')\Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \\ &\quad - c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho}' [i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}')\mathcal{G}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}', \mathbf{r})]^\dagger \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

Uwzględniając w drugim członie po prawej stronie powyższego równania warunek brzegowy (5.2.5) i korzystając z hermitowskości operatorów $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ względem powierzchniowego iloczynu skalarnego, przekształcamy równanie (5.2.9) do postaci

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho}' \mathcal{G}_{\hat{b}}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}', \mathbf{r})[i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]\Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.2.10)$$

Powyższa relacja jest spełniona dla dowolnego punktu \boldsymbol{r} w objętości \mathcal{V} , w szczególności dla punktów leżących na powierzchni \mathcal{S} . Dokonując we wzorze (5.2.10) przejścia granicznego $\boldsymbol{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}$ i korzystając z relacji symetrii (5.2.6), znajdujemy

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{G}_{\hat{\mathfrak{b}}} (E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') [i\alpha_{\mathfrak{n}}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.2.11)$$

Aby otrzymać związek pomiędzy jądrami całkowymi $\mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ zdefiniowanymi w podrozdziale 5.1.4 i funkcją Greena zagadnienia brzegowego (5.2.1) i (5.2.2), działamy na obie strony równania (5.2.11) macierzami $\beta^{(\pm)}$, otrzymując

$$\beta^{(\pm)} \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \beta^{(\pm)} \mathcal{G}_{\hat{\mathfrak{b}}} (E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)} [i\alpha_{\mathfrak{n}}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.2.12)$$

(Pojawienie się macierzy $\beta^{(\pm)}$ po prawej stronie funkcji Greena jest uzasadnione równaniem (5.1.14) oraz równaniem (5.1.68).) Z porównania (5.1.75) i (5.2.12) znajdujemy szukaną relację

$$\mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = c\hbar \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \mathcal{G}_{\hat{\mathfrak{b}}} (E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}. \quad (5.2.13)$$

Z powyższego równania wynika, że w szczególnych przypadkach, gdy $\hat{\mathfrak{b}}^{(+)}(E) = \hat{\delta}$ albo $\hat{\mathfrak{b}}^{(-)}(E) = \hat{\delta}$ (oczywiście, oba przypadki nie mogą zachodzić jednocześnie, patrz równanie (5.1.69)), jądra $\mathcal{R}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}^{(+)} = \hat{\delta}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ i $\mathcal{R}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}^{(-)} = \hat{\delta}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ są odpowiednio równe

$$\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = c\hbar \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \mathcal{G}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}, \quad (5.2.14)$$

gdzie zdefiniowaliśmy

$$\mathcal{G}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{G}_{\hat{\mathfrak{b}}^{(+)} = \hat{\delta}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'), \quad \mathcal{G}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{G}_{\hat{\mathfrak{b}}^{(-)} = \hat{\delta}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.2.15)$$

Znajdziemy teraz związek pomiędzy jądrami $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ a funkcjami Greena $\mathcal{G}^{(\mp)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ zdefiniowanymi równaniami (5.2.15). W szczególnych przypadkach, gdy $\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) = \hat{\delta}$ (patrz uwaga poprzedzająca równanie (5.2.14)), równanie (5.2.11) przyjmuje postać

$$\Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{G}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') i\alpha_{\mathfrak{n}}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.2.16)$$

Działając na obie strony powyższej równości macierzami $i\alpha_{\mathfrak{n}}^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho})$, znajdujemy

$$i\alpha_{\mathfrak{n}}^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}) \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = -c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \alpha_{\mathfrak{n}}^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}) \mathcal{G}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \alpha_{\mathfrak{n}}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'), \quad (5.2.17)$$

skąd, przez porównanie z (5.1.26), otrzymujemy szukaną relację

$$\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = c\hbar \gamma^{(\mp)} \alpha_{\mathfrak{n}}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \mathcal{G}^{(\mp)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \alpha_{\mathfrak{n}}^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}'). \quad (5.2.18)$$

Kończąc ten podrozdział, zauważymy jeszcze, że z relacji (5.2.14) oraz (5.2.18) wynika następujący związek pomiędzy jądrami $\mathcal{B}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ i $\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$

$$\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \mathcal{B}^{(\mp)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}'). \quad (5.2.19)$$

Równanie (5.2.19) jest identyczne z równaniem (5.1.86) otrzymanym przez nas w podrozdziale 5.1.4, gdzie korzystaliśmy z rozwinięć spektralnych rozważanych jąder.

5.3 Granica nierelatywistyczna

W celu powiązania ze sobą relatywistycznego i nierelatywistycznego operatorowego sformułowania teorii R -macierzy, zbadamy granicę nierelatywistyczną tego z równań (5.1.74), które odpowiada wyborowi górnego indeksu. Postępując zgodnie ze standardową procedurą, wyrazimy relatywistyczną czteroskładnikową funkcję falową $\Psi(E, \mathbf{r})$ przez funkcje dwuskładnikowe $\psi_U(E, \mathbf{r})$ oraz $\psi_L(E, \mathbf{r})$ w następujący sposób

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_U(E, \mathbf{r}) \\ \psi_L(E, \mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (5.3.1)$$

Jak łatwo pokazać, jeżeli operator potencjału \hat{V} jest taki, że dla dowolnej funkcji z $L^2_{(1)}(\mathcal{V})$ o postaci

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \phi_U(\mathbf{r}) \\ \phi_L(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (5.3.2)$$

zachodzi

$$\beta^{(+)} \hat{V} \beta^{(+)} \Phi(\mathbf{r}) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} \hat{V}' \phi_U(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta^{(+)} \hat{V} \beta^{(-)} \Phi(\mathbf{r}) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} 0, \quad (5.3.3)$$

$$\beta^{(-)} \hat{V} \beta^{(+)} \Phi(\mathbf{r}) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} 0, \quad \beta^{(-)} \hat{V} \beta^{(-)} \Phi(\mathbf{r}) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} 0, \quad (5.3.4)$$

gdzie \hat{V}' jest operatorem działającym w przestrzeni funkcji dwuskładnikowych, wówczas w granicy nierelatywistycznej funkcja $\psi_U(E, \mathbf{r})$ spełnia równanie Schrödingera

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}' - E \right] \psi_U(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (c \rightarrow \infty) \quad (5.3.5)$$

(porównaj (3.1.4) i (3.1.5)), podczas gdy

$$\psi_L(E, \mathbf{r}) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} -\left(\frac{\hbar}{2mc} \right) i \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi_U(E, \mathbf{r}), \quad (5.3.6)$$

gdzie $\boldsymbol{\sigma}$ jest wektorem skonstruowanym z macierzy Pauliego. Relacja (5.3.6) zachodzi dla dowolnego punktu \mathbf{r} , w szczególności jest ona również spełniona na powierzchni \mathcal{S} , to znaczy dla $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}$. Dalej, z równań (5.1.70) i (5.1.68) wynika, że operatory $\hat{\mathcal{R}}_0^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E)$ działają na dowolną funkcję z $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$ o postaci

$$\Phi(\boldsymbol{\rho}) = \begin{pmatrix} \phi_U(\boldsymbol{\rho}) \\ \phi_L(\boldsymbol{\rho}) \end{pmatrix} \quad (5.3.7)$$

w następujący sposób

$$\hat{\mathcal{R}}_6^{(+)}(E)\Phi(\boldsymbol{\rho}) = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{R}}_6'(E)\phi_U(\boldsymbol{\rho}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E)\Phi(\boldsymbol{\rho}) = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{b}}'(E)\phi_U(\boldsymbol{\rho}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.3.8)$$

gdzie $\hat{\mathcal{R}}_6'(E)$ i $\hat{\mathbf{b}}'(E)$ są operatorami działającymi na funkcje *dwuskładnikowe*. Korzystając ze związków (5.3.8), znajdujemy, że to z równań (5.1.74), które zawiera operator $\hat{\mathcal{R}}_6^{(+)}(E)$, można przepisać w postaci zawierającej w sposób jawny górną i dolną składową spinora $\Psi(E, \boldsymbol{\rho})$ oraz operatory $\hat{\mathcal{R}}_6'(E)$ i $\hat{\mathbf{b}}'(E)$

$$\psi_U(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathcal{R}}_6'(E) \left[\left(\frac{2mc}{\hbar} \right) \mathbf{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}(\boldsymbol{\rho})\psi_L(E, \boldsymbol{\rho}) - \hat{\mathbf{b}}'(E)\psi_U(E, \boldsymbol{\rho}) \right]. \quad (5.3.9)$$

Równanie (5.3.9) jest ściśle. Przechodząc w nim do granicy nierelatywistycznej, korzystając z równania (5.3.6) oraz z dobrze znanych własności macierzy Pauliego, z których wynika, iż

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}(\boldsymbol{\rho})] [\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla] = \nabla_n + \mathbf{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{n}(\boldsymbol{\rho}) \times \nabla], \quad (5.3.10)$$

otrzymujemy

$$\psi_U(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathcal{R}}_6'(E) [\nabla_n + \mathbf{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{n}(\boldsymbol{\rho}) \times \nabla] - \hat{\mathbf{b}}'(E)] \psi_U(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (c \rightarrow \infty). \quad (5.3.11)$$

W równaniu (5.3.11) $\psi_U(E, \boldsymbol{\rho})$, $\hat{\mathcal{R}}_6'(E)$ oraz $\hat{\mathbf{b}}'(E)$ oznaczają granice nierelatywistyczne wielkości oznaczanych powyżej tymi samymi symbolami przed dokonaniem przejścia granicznego. Porównanie (5.3.11) z (3.1.26) prowadzi do wniosku, że jeżeli

$$\hat{V}' \xrightarrow{c \rightarrow \infty} \hat{V}\hat{\mathcal{I}}, \quad (5.3.12)$$

gdzie \hat{V} jest operatorem potencjału występującym w teorii nierelatywistycznej i zdefiniowanym równaniem (3.1.6), a $\hat{\mathcal{I}}$ jest operatorem jednostkowym w przestrzeni funkcji dwuskładnikowych, wówczas w granicy nierelatywistycznej zachodzi

$$\hat{\mathcal{R}}_6'(E) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} \hat{\mathcal{R}}_6(E)\hat{\mathcal{I}}, \quad (5.3.13)$$

pod warunkiem, że operator $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E)$ wybierzemy w taki sposób, aby zachodziło

$$\hat{\mathbf{b}}'(E) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} \hat{\mathbf{b}}(E)\hat{\mathcal{I}} + \mathbf{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{n}(\boldsymbol{\rho}) \times \nabla], \quad (5.3.14)$$

gdzie $\hat{\mathbf{b}}(E)$ jest operatorem wykorzystywanym w nierelatywistycznym sformułowaniu teorii prezentowanym w rozdziale 3. Wynik zawarty w równaniu (5.3.14) jest zgodny z wcześniejszymi obserwacjami poczynionymi przez Norringtona i Granta [55, 57] oraz przez Thumma i Norcrossa [68], którzy badali granicę nierelatywistyczną macierzowego sformułowania teorii w szczególnym przypadku sferycznie symetrycznego obszaru \mathcal{V} .

5.4 Konstrukcja operatorów $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E)$: metoda Kapura–Peierlsa–Wignera

W tym podrozdziale przeprowadzimy konstrukcję jąder R -operatorów $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E)$, modyfikując w taki sposób metodę Kapura–Peierlsa–Wignera omówioną w podrozdziale 3.3, aby można ją było zastosować do przypadku, gdy równanie falowe jest równaniem Diraca, a jądra R -operatorów są macierzami o wymiarach 4×4 .

W rozważaniach przedstawionych poniżej będziemy wykorzystywali zbiór funkcji czteroskładnikowych $\{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r})\}$, zdefiniowanych jako funkcje własne zagadnienia brzegowego składającego się z równania Diraca

$$[\hat{H} - E_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E)]\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (5.4.1)$$

(porównaj (5.1.17)) oraz z jednorodnego warunku brzegowego

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)}\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (5.4.2)$$

narzuconego na rozwiązania równania (5.4.1) na powierzchni \mathcal{S} otaczającej objętość \mathcal{V} . Funkcja $\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r})$ jest funkcją własną zagadnienia odpowiadającą wartości własnej $E_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E)$. Operator Hamiltona \hat{H} użyty w równaniu (5.4.1) został zdefiniowany równaniem (5.1.18). Analizując postać równania (5.4.2), można by odnieść wrażenie, że zawiera ono dwa różne warunki brzegowe, zależnie od wyboru jednego z dwóch możliwych indeksów. Tak jednak nie jest i w rzeczywistości oba warunki w równaniu (5.4.2) są równoważne, stanowiąc tylko *jeden* warunek brzegowy. Wynika to bezpośrednio z podziałania na równanie (5.4.2) z lewej strony operatorami $\hat{\mathfrak{b}}^{(\mp)}(E)i\alpha_n^{(\mp)}$ i skorzystania następnie z równań (5.1.13), (5.1.69) i (5.1.25).

Mając na względzie późniejsze zastosowania, zauważymy, że warunek brzegowy (5.4.2) można, po podziałaniu na niego z lewej strony macierzami $-i\alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho})$, przepisać w równoważnej postaci

$$\beta^{(\mp)}\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\pm)}i\alpha_n^{(\mp)}\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (5.4.3)$$

z której wynika, że

$$\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)}\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) + \beta^{(\mp)}\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = [\beta^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}i\alpha_n^{(\mp)}\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.4)$$

W dalszym ciągu rozważań założymy, że operatory całkowe $\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ są takie, iż funkcje własne $\{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r})\}$ zagadnienia brzegowego (5.4.1) i (5.4.2) tworzą układ zupełny w przestrzeni $L^2_{(|\cdot|)}(\mathcal{V})$. Z równań (5.4.1) i (5.4.2), ze skończoności objętości \mathcal{V} oraz z własności operatorów $\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ wynika, że wszystkie wartości własne $\{E_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E)\}$ są rzeczywiste i tworzą zbiór dyskretny, a funkcje własne odpowiadające różnym wartościom własnym są wzajemnie ortogonalne względem objętościowego iloczynu skalarnego $\langle |\cdot| \rangle$. Rzeczywiście, mnożąc równanie (5.4.1) (z k zastąpionym przez k') z lewej strony przez $\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r})$, macierzowe sprzężenie hermitowskie równania (5.4.1) z prawej strony przez $\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}(E, \mathbf{r})$, odejmując otrzymane

równania stronami, całkując wynik po objętości \mathcal{V} , stosując twierdzenie całkowe Gaussa oraz wykorzystując warunek brzegowy (5.4.2) i własność hermitowskości operatorów $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$, otrzymujemy

$$[E_{\hat{\mathbf{b}}k}^*(E) - E_{\hat{\mathbf{b}}k'}(E)] \langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k'} \rangle = 0, \quad (5.4.5)$$

skąd natychmiast wynika prawdziwość powyższego stwierdzenia. W dalszym ciągu przyjmiemy, że funkcje należące do zdegenerowanych wartości własnych (jeżeli takie występują) zostały również zortogonalizowane i że wszystkie funkcje własne zostały znormalizowane w taki sposób, iż

$$\langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k'} \rangle = \delta_{kk'}. \quad (5.4.6)$$

Na mocy założenia o zupełności, funkcje własne $\{\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r})\}$ spełniają relację domknięcia

$$\sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathcal{I} \quad (\mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}) \quad (5.4.7)$$

we wnętrzu objętości \mathcal{V} . Ponieważ na powierzchni \mathcal{S} funkcje bazowe $\{\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r})\}$ spełniają sztywny warunek brzegowy (5.4.2), relacja (5.4.7) nie musi być (poniżej pokażemy wręcz, że *nie jest*) spełniona na tej powierzchni.

Rozważymy teraz problem rozwinięcia funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$, spełniającej równanie Diraca (5.1.17), w szereg funkcji własnych $\{\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r})\}$. Oznaczając rozwinięcie przez $\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r})$, mamy

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (5.4.8)$$

lub równoważnie

$$\bar{\Psi}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \mathbf{r}) = \int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r}') \right\} \Psi(E, \mathbf{r}') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}). \quad (5.4.9)$$

Współczynniki rozwinięcia $\langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle$ znajdziemy w sposób podobny do zastosowanego wcześniej w podrozdziale 3.3. W tym celu przemnożmy równanie (5.1.17) z lewej strony przez $\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r})$, macierzowe sprzężenie hermitowskie równania (5.4.1) z prawej strony przez $\Psi(E, \mathbf{r})$, odejmijmy otrzymane równania stronami i scałkujmy wynik po objętości \mathcal{V} . Dostajemy

$$i\hbar \int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r} \nabla \cdot [\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \Psi(E, \mathbf{r})] = [E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E) - E] \langle \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k} | \Psi \rangle. \quad (5.4.10)$$

Stosując twierdzenie Gaussa o dywergencji, możemy przekształcić całkę objętościową znajdującą się po lewej stronie powyższego równania w całkę powierzchniową

$$\int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r} \nabla \cdot [\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r}) \boldsymbol{\alpha} \Psi(E, \mathbf{r})] = \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho} \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}) \alpha_n(\boldsymbol{\rho}) \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.11)$$

Uwzględniając ten wynik w równaniu (5.4.10), otrzymujemy

$$\langle \Psi_{\hat{b}k} | \Psi \rangle = \frac{(\Psi_{\hat{b}k} | i c \hbar \alpha_n \Psi)}{E_{\hat{b}k}(E) - E}. \quad (5.4.12)$$

W kolejnym kroku transformujemy prawą stronę równania (5.4.12), korzystając przy tym z własności (5.1.10) i (5.1.11) macierzy $\alpha_n(\boldsymbol{\rho})$ i $\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, z warunku brzegowego (5.4.2), a także z własności hermitowskości operatorów $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$. Prowadzi to do równania

$$\langle \Psi_{\hat{b}k} | \Psi \rangle = \frac{c \hbar (\Psi_{\hat{b}k} | [i \alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}] \Psi)}{E_{\hat{b}k}(E) - E}. \quad (5.4.13)$$

Ostatecznie mamy

$$\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}) = \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \frac{c \hbar (\Psi_{\hat{b}k} | [i \alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}] \Psi)}{E_{\hat{b}k}(E) - E} \quad (5.4.14)$$

lub równoważnie

$$\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}) = \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' c \hbar \sum_k \frac{\Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{b}k}(E) - E} [i \alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.4.15)$$

W szczególności, jeżeli punkt \mathbf{r} leży na powierzchni \mathcal{S} ograniczającej objętość \mathcal{V} , mamy

$$\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}) = \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' c \hbar \sum_k \frac{\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{b}k}(E) - E} [i \alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \quad (5.4.16)$$

Zdefiniujmy dwa operatory całkowe $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E)$ takie, że

$$\beta^{(\pm)} \bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\mp)} \hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E) [i \alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (5.4.17)$$

(porównaj (5.1.74)). Z analizy równań (5.4.16) i (5.4.17) wynika, że operatory $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E)$ posiadają jądra całkowe

$$\bar{\mathcal{R}}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = c \hbar \gamma^{(\pm)} \sum_k \frac{\beta^{(\pm)} \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}}{E_{\hat{b}k}(E) - E}. \quad (5.4.18)$$

Na mocy relacji zupełności (5.4.7), we wnętrzu objętości \mathcal{V} zachodzi

$$\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \mathbf{r}) = \int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \mathbf{r}') \right\} \Psi(E, \mathbf{r}') = \Psi(E, \mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}), \quad (5.4.19)$$

co oznacza, że rozwinięcie $\overline{\Psi}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \mathbf{r})$ zbiega do funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ i w konsekwencji

$$\Psi(E, \mathbf{r}) = \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' c \hbar \sum_k \frac{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E) - E} [i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}). \quad (5.4.20)$$

Relacja (5.4.20) jest prawdziwa dla punktu \mathbf{r} leżącego dowolnie blisko powierzchni \mathcal{S} i dlatego, uwzględniając ciągłość funkcji $\Psi(E, \mathbf{r})$ przy przekraczaniu powierzchni \mathcal{S} , mamy

$$\begin{aligned} \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) &= \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' c \hbar \sum_k \frac{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}')}{E_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E) - E} \\ &\times [i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}), \end{aligned} \quad (5.4.21)$$

skąd znajdujemy, że

$$\begin{aligned} \beta^{(\pm)} \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) &= \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' c \hbar \sum_k \frac{\beta^{(\pm)} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}}{E_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E) - E} \\ &\times [i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}). \end{aligned} \quad (5.4.22)$$

Z równań (5.4.22) oraz (5.1.75) wynika, że

$$\mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}} \left\{ c \hbar \gamma^{(\pm)} \sum_k \frac{\beta^{(\pm)} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}}{E_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E) - E} \right\}. \quad (5.4.23)$$

Równanie (5.4.23) należy porównać z równaniem (5.4.18).

Postać równania (5.4.23) nasuwa następujące pytanie: czy można w tym równaniu w sposób dowolny dokonać zamiany kolejności operacji $\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}}$ oraz \sum_k ? Opierając się na podobieństwie powyższych rozważań do dyskusji przeprowadzonej w podrozdziale 3.3, można by przypuszczać, że odpowiedź na tak postawione pytanie jest twierdząca. Tak jednak *nie* jest. W teorii relatywistycznej operacje $\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \boldsymbol{\rho}}$ oraz \sum_k *nie* komutują, w związku z czym w ogólności mamy $\mathcal{R}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \neq \overline{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ oraz $\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) \neq \overline{\hat{\mathcal{R}}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E)$. Aby to pokazać (i poznać konsekwencje zamiany kolejności wspomnianych operacji), znajdziemy bezpośrednią relację pomiędzy funkcjami powierzchniowymi $\overline{\Psi}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho})$ i $\Psi(E, \boldsymbol{\rho})$. Rozpoczniemy od poczynienia spostrzeżenia, że relacja zupełności (5.4.7) nie może być spełniona w przypadku, gdy którykolwiek z punktów \mathbf{r} lub \mathbf{r}' leży na powierzchni \mathcal{S} , gdyż górne i dolne składowe funkcji spinorowych $\{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho})\}$ są związane warunkiem brzegowym (5.4.2). Dlatego w dalszym ciągu naszych rozważań założymy, że

$$\sum_k \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r}') = \mathcal{A}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \delta_s^{(1)}(\mathbf{r}') \quad (\mathbf{r}' \in \mathcal{V}), \quad (5.4.24)$$

$$\sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') = \mathcal{A}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \delta_s^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (5.4.25)$$

(porównaj (5.4.7) i pierwsze z równań (A.5)), mając nadzieję, że uda nam się znaleźć postać jądra całkowego $\mathcal{A}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. Podstawiając relację (5.4.24) do definicji (5.4.9), otrzymujemy

$$\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}) = \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{A}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'), \quad (5.4.26)$$

skąd wynika, że jądro $\mathcal{A}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ definiuje operator całkowy $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E)$ działający w przestrzeni $L^2_{(|)}(S)$ i przekształcający funkcję powierzchniową $\Psi(E, \boldsymbol{\rho})$ w funkcję $\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho})$

$$\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E) \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.27)$$

Z definicji (5.4.24) i (5.4.25) oraz z relacji (5.4.4) wynika ważna własność operatora $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E)$. Z jednej strony, z równania (5.4.4) znajdujemy, że

$$\sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \mathbf{r}') = [\hat{\mathcal{I}} - \gamma^{(\pm)} i \alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \beta^{(\pm)} \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \mathbf{r}') \right\}, \quad (5.4.28)$$

gdzie $\hat{\mathcal{I}}$ jest operatorem jednostkowym. Z drugiej strony, jeżeli $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ jest dowolną odpowiednio regularną funkcją spinorową zdefiniowaną na powierzchni S , wówczas z równania (5.4.25) oraz z hermitowskości operatorów $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ względem powierzchniowego iloczynu skalarnego $(|)$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} & \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \right\} \Phi(\boldsymbol{\rho}') \\ &= \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' \left\{ [\beta^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} i \alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}') \right\}^\dagger \Phi(\boldsymbol{\rho}') \\ &= \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \right\} \beta^{(\pm)} [\hat{\mathcal{I}} + \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E) i \alpha_n^{(\pm)}] \Phi(\boldsymbol{\rho}'). \end{aligned} \quad (5.4.29)$$

Z równań (5.4.24) i (5.4.25) oraz (5.4.28) i (5.4.29) wynika, że operator $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E)$ można zapisać w jednej z dwóch równoważnych postaci

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E) = [\hat{\mathcal{I}} - \gamma^{(\pm)} i \alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E) [\hat{\mathcal{I}} + \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E) i \alpha_n^{(\pm)}], \quad (5.4.30)$$

gdzie operatory

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E) = \beta^{(\pm)} \hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E) \beta^{(\pm)} \quad (5.4.31)$$

posiadają jądra całkowe $\mathcal{A}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \beta^{(\pm)} \mathcal{A}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}$ zdefiniowane formalnie równaniem

$$\sum_k \beta^{(\pm)} \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \mathbf{r}') \beta^{(\pm)} = \mathcal{A}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \delta_s^{(1)}(\mathbf{r}') \quad (\mathbf{r}' \in \mathcal{V}). \quad (5.4.32)$$

Operatory $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(-)}(E)$ są ze sobą powiązane, z równań (5.4.30) i (5.4.31) wynika bowiem, że

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) = (\gamma^{(\mp)})^2 \alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\mp)}(E) \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\mp)}(E) \hat{\mathfrak{b}}^{(\mp)}(E) \alpha_n^{(\mp)}. \quad (5.4.33)$$

Poniżej podamy dwie metody znalezienia jawnej postaci operatora $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$.

Metoda I

Przemnożmy jądro

$$\sum_{k'} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}^\dagger(E, \mathbf{r}')$$

z prawej strony przez dowolną funkcję bazową $\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}')$ i scałkujemy wynik po objętości \mathcal{V} . Z relacji ortogonalności (5.4.6) wnioskujemy, że

$$\int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r}' \left\{ \sum_{k'} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}^\dagger(E, \mathbf{r}') \right\} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}') = \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.34)$$

Z drugiej strony, z równania (5.4.24) mamy

$$\int_{\mathcal{V}} d^3 \mathbf{r}' \left\{ \sum_{k'} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k'}^\dagger(E, \mathbf{r}') \right\} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \mathbf{r}') = \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.35)$$

Przyrównując prawe strony równań (5.4.34) i (5.4.35), dostajemy

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.36)$$

Pozornie mogłoby się wydawać, że z równania (5.4.36) wynika, iż, podobnie jak w teorii nierelatywistycznej, operator $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E)$ jest operatorem jednostkowym. Tak jednak *nie* jest, gdyż prowadziłoby to do sprzeczności z równaniem (5.4.30). Przepisując równanie (5.4.36) z pomocą równania (5.4.30), otrzymujemy

$$[\hat{\mathcal{I}} - \gamma^{(\pm)} i \alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) [\hat{\mathcal{I}} + \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) i \alpha_n^{(\pm)}] \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.37)$$

Działając na obie strony tego równania macierzami $\beta^{(\pm)}$ i korzystając z warunku brzegowego (5.4.2), dostajemy

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) [\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2] \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)} \Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}), \quad (5.4.38)$$

a stąd

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}^{(\pm)}(E) = \beta^{(\pm)} [\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2]^{-1} \beta^{(\pm)}, \quad (5.4.39)$$

gdź relacja (5.4.38) jest spełniona dla dowolnej z funkcji $\{\Psi_{\hat{\mathfrak{b}}k}\}$. Zakładamy przy tym, że operatory $\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2$ są nieosobliwe. Z równań (5.4.30) oraz (5.4.39) dostajemy ostatecznie

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E) &= [\beta^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} i \alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] [\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2]^{-1} \\ &\times [\beta^{(\pm)} + \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) i \alpha_n^{(\pm)}]. \end{aligned} \quad (5.4.40)$$

Przyczyna różnicy pomiędzy wynikami (3.3.28) oraz (5.4.40) leży w tym, że w teorii dla równania Schrödingera funkcje $\{\Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho})\}$ są funkcjami skalarnymi, natomiast ich odpowiedniki w teorii dla równania Diraca są czteroskładnikowe, przy czym ich składowe górna i dolna są ze sobą powiązane zależnością (5.4.2).

Metoda II

Działając na obie strony równania (5.4.14) operatorem $\hat{H} - E$, otrzymujemy niejednorodne równanie Diraca

$$[\hat{H} - E]\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}) = c\hbar \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{r}) (\Psi_{\hat{b}k} | [i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}] \Psi) \quad (\boldsymbol{r} \in \mathcal{V}) \quad (5.4.41)$$

spełniane przez funkcję $\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r})$ w objętości \mathcal{V} . Przepiszemy to równanie w jawnej postaci

$$\begin{aligned} & [-ic\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 + \hat{V} - E]\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}) \\ &= c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \left\{ \sum_k \Psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{r}) \Psi_{\hat{b}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \right\} [i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}'). \end{aligned} \quad (5.4.42)$$

Zgodnie ze wzorem (5.4.25), równanie (5.4.42) można zastąpić przez

$$\begin{aligned} & [-ic\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 + \hat{V} - E]\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}) \\ &= \delta_s^{(1)}(\boldsymbol{r}) c\hbar \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}' \mathcal{A}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') [i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}') - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}') \end{aligned} \quad (5.4.43)$$

lub równoważnie

$$[-ic\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 + \hat{V} - E]\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r}) = \delta_s^{(1)}(\boldsymbol{r}) c\hbar \hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E) [i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.44)$$

Postąpimy teraz podobnie, jak w podrozdziale 3.3 i utworzymy nieskończenie mały walec o wysokości ε i polu podstawy $d^2 \boldsymbol{\rho}$. Niech jedna podstawa walca leży na powierzchni \mathcal{S} w punkcie $\boldsymbol{\rho}$ w taki sposób, że skierowany na zewnątrz walca jednostkowy wektor normalny do tej podstawy jest identyczny z wektorem $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{\rho})$ i niech druga podstawa walca znajduje się we wnętrzu objętości \mathcal{V} . Całkując obustronnie równanie (5.4.44) po objętości walca, korzystając z twierdzenia Gaussa, przechodząc z wysokości walca do zera i uwzględniając, że dla $\boldsymbol{r} \in \mathcal{V} \setminus \mathcal{S}$ funkcja $\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{r})$ przyjmuje te same wartości, co funkcja $\Psi(E, \boldsymbol{r})$ (patrz równanie (5.4.19)), otrzymujemy

$$-ic\hbar \alpha_n(\boldsymbol{\rho}) [\bar{\Psi}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}) - \Psi(E, \boldsymbol{\rho})] = c\hbar \hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E) [i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.45)$$

Działając na obie strony równania (5.4.45) macierzami $\beta^{(\pm)}$ oraz stosując równanie (5.4.27), znajdujemy

$$\alpha_n^{(\pm)} [\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}(E) - \hat{\mathcal{I}}] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}) = i\hat{\mathcal{A}}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E) [i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.4.46)$$

Podstawiając do lewej strony powyższego równania w miejsce operatora $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}(E)$ wyrażenia wynikające z równania (5.4.30) oraz przedstawiając funkcję $\Psi(E, \rho)$ w postaci

$$\Psi(E, \rho) = \beta^{(\pm)} \Psi(E, \rho) + \beta^{(\mp)} \Psi(E, \rho), \quad (5.4.47)$$

po uporządkowaniu dostajemy

$$\begin{aligned} & [\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) + (\gamma^{(\pm)})^2 \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) - \hat{\mathcal{I}}] \alpha_n^{(\pm)} \Psi(E, \rho) \\ &= i\gamma^{(\pm)} [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) - \hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] \beta^{(\pm)} \Psi(E, \rho). \end{aligned} \quad (5.4.48)$$

Równania (5.4.48) są spełnione dla dowolnej funkcji $\Psi(E, \rho) \in \mathcal{D}_S(E)$, to znaczy mają charakter tożsamości ze względu na $\Psi(E, \rho)$. Fakt ten pozwoli nam na wyznaczenie operatorów $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$. Ponieważ prawa strona równania (5.4.48) zawiera komutator operatorów $\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$, nasuwa to myśl, aby sprawdzić, czy równanie (5.4.48) nie posiada rozwiązań w postaci operatorów $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$, które komutowałyby z operatorami $\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$. Załóżmy więc, że

$$\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) - \hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) = \hat{\delta}. \quad (5.4.49)$$

Przy tym założeniu prawa strona równania (5.4.48) znika i mamy

$$\left[[\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2] \hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) - \hat{\mathcal{I}} \right] \alpha_n^{(\pm)} \Psi(E, \rho) = 0, \quad (5.4.50)$$

a stąd

$$[\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2] \hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \alpha_n^{(\pm)} \Psi(E, \rho) = \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \Psi(E, \rho). \quad (5.4.51)$$

Zakładając, że operatory $\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2$ są nieosobliwe, otrzymujemy

$$\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) \alpha_n^{(\pm)} \Psi(E, \rho) = [\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2]^{-1} \alpha_n^{(\pm)} \Psi(E, \rho), \quad (5.4.52)$$

skąd wnioskujemy, że

$$\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) = \beta^{(\pm)} [\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2]^{-1} \beta^{(\pm)}. \quad (5.4.53)$$

Tak zdefiniowane operatory $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ spełniają oczywiście relacje komutacyjne (5.4.49) i pozostaje tylko sprawdzić przez bezpośrednie podstawienie, że rozwiązanie równania (5.4.48) rzeczywiście dane jest wzorem (5.4.53). Korzystając wreszcie z relacji (5.4.30), łączącej operatory $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}(E)$, dochodzimy do równania (5.4.40) stanowiącego rozwiązanie zagadnienia polegającego na znalezieniu jawnej postaci operatora $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}(E)$.

Powróćmy do głównego celu rozważań przeprowadzanych w tym rozdziale, to znaczy do znalezienia operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$. Znając operator $\hat{\mathcal{A}}_{\mathfrak{b}}(E)$, możemy przepisać równanie (5.4.27) w postaci

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_{\mathfrak{b}}(E, \rho) &= [\beta^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} i \alpha_n^{(\mp)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)] [\hat{\mathcal{I}} + (\gamma^{(\pm)})^2 [\hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)]^2]^{-1} \\ &\times [\beta^{(\pm)} + \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) i \alpha_n^{(\pm)}] \Psi(E, \rho). \end{aligned} \quad (5.4.54)$$

Podstawiając ten związek do równania (5.4.17), po prostych przekształceniach znajdujemy

$$\begin{aligned} \beta^{(\pm)} \Psi(E, \rho) &= -\gamma^{(\mp)} \left[\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E) - \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E) [(\gamma^{(\mp)})^2 \hat{\mathcal{I}} + [\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]^2]^{-1} \right] \\ &\times [\mathbf{i}\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi(E, \rho). \end{aligned} \quad (5.4.55)$$

Porównując (5.1.74) i (5.4.55), otrzymujemy ostatecznie związek pomiędzy operatorami $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ i $\overline{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$

$$\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E) = \overline{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E) - \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E) [(\gamma^{(\mp)})^2 \hat{\mathcal{I}} + [\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]^2]^{-1}. \quad (5.4.56)$$

Przejdziemy do dyskusji otrzymanych wyników. Przede wszystkim zwrócimy uwagę, że równanie (5.4.55) można traktować jako układ dwóch *jednorodnych* równań dla funkcji $\beta^{(+)} \Psi(E, \rho)$ i $\beta^{(-)} \Psi(E, \rho)$. Rzeczywiście, wykorzystując własności macierzy $\alpha_n^{(\pm)}(\rho)$ oraz $\beta^{(\pm)}$, równania składające się na wzór (5.4.55) można przepisać jawnie w postaci

$$\beta^{(+)} \Psi(E, \rho) = -\gamma^{(-)} \hat{\mathcal{R}}_b^{(+)}(E) \mathbf{i}\alpha_n^{(+)} \beta^{(-)} \Psi(E, \rho) - \hat{\mathcal{R}}_b^{(+)}(E) \hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) \beta^{(+)} \Psi(E, \rho), \quad (5.4.57)$$

$$\beta^{(-)} \Psi(E, \rho) = -\gamma^{(+)} \hat{\mathcal{R}}_b^{(-)}(E) \mathbf{i}\alpha_n^{(-)} \beta^{(+)} \Psi(E, \rho) - \hat{\mathcal{R}}_b^{(-)}(E) \hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) \beta^{(-)} \Psi(E, \rho), \quad (5.4.58)$$

z operatorami $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ danymi równaniem (5.4.56). Ponieważ równania (5.4.57) i (5.4.58) są sprzężone i jednorodne, nasuwa się następujące pytanie: czy są one między sobą zgodne? Odpowiedź powinna być twierdząca, o ile zależności (5.4.56) są prawdziwe. Wynika stąd, że poszukując odpowiedzi na tak postawione pytanie, testujemy jednocześnie poprawność opisanej w tym podrozdziale metody konstrukcji operatorów $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$.^{5G} Aby znaleźć odpowiedź, rozwiążmy równanie (5.4.58) ze względu na $\beta^{(-)} \Psi(E, \rho)$. Otrzymujemy

$$\beta^{(-)} \Psi(E, \rho) = -\gamma^{(+)} \beta^{(-)} [\hat{\mathcal{I}} + \hat{\mathcal{R}}_b^{(-)}(E) \hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E)]^{-1} \hat{\mathcal{R}}_b^{(-)}(E) \mathbf{i}\alpha_n^{(-)} \beta^{(+)} \Psi(E, \rho). \quad (5.4.59)$$

Podstawiając tę relację do prawej strony równania (5.4.57), wykorzystując równanie (5.4.56) oraz związku^{5H}

$$\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E) = -\alpha_n^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\mp)}(E) \overline{\mathcal{R}}_b^{(\mp)}(E) \hat{\mathbf{b}}^{(\mp)}(E) \alpha_n^{(\mp)}, \quad (5.4.60)$$

wynikające z jawnych postaci (5.4.18) jąder całkowych $\overline{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$, z warunków (5.4.3) oraz z własności hermitowskości operatorów $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$, uwzględniając wreszcie własności macierzy $\alpha_n^{(\pm)}(\rho)$ i $\beta^{(\pm)}$ oraz równanie (5.1.69), możemy przetransformować prawą stronę równania (5.4.57), otrzymując $\beta^{(+)} \Psi(E, \rho)$. Podobnie,

^{5G} Sprawdzając w analogiczny sposób zgodność macierzowych odpowiedników równań (5.4.57) i (5.4.58), autor [121, 122] znalazł, wspomniany już we wstępie do rozprawy, błąd we wcześniejszych sformułowaniach [49, 52] macierzowej wersji metody R -macierzy dla równania Diraca.

^{5H} Należy w tym miejscu podkreślić, że *nie* zachodzą relacje analogiczne do (5.4.60), lecz z operatorami $\overline{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ zastąpionymi przez operatory $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$.

wyznaczając z równania (5.4.57) funkcję $\beta^{(+)}\Psi(E, \rho)$,

$$\beta^{(+)}\Psi(E, \rho) = -\gamma^{(-)}\beta^{(+)}[\hat{\mathcal{I}} + \hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)\hat{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)]^{-1}\hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)i\alpha_n^{(+)}\beta^{(-)}\Psi(E, \rho), \quad (5.4.61)$$

i podstawiając następnie wynik do prawej strony równania (5.4.58), możemy przekształcić tę ostatnią, otrzymując $\beta^{(-)}\Psi(E, \rho)$. Na tej podstawie możemy stwierdzić, że równania (5.4.57) i (5.4.58) rzeczywiście są ze sobą zgodne.

Znając związek (5.4.56) pomiędzy operatorami $\hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$, możemy znaleźć reprezentacje macierzowe operatorów $\hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ w dowolnej ortonormalnej bazie spinorowej $\{\Phi_i(\rho)\}$ rozpinającej przestrzeń $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$. Rzutując równanie (5.4.56) z prawej i z lewej strony na funkcje bazowe $\{\Phi_i(\rho)\}$ i uwzględniając definicję (5.4.18), otrzymujemy

$$\mathbf{R}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E) = c\hbar\gamma^{(\pm)} \sum_k \frac{\mathbf{P}_{\mathfrak{b}k}^{(\pm)}(E)\mathbf{P}_{\mathfrak{b}k}^{(\pm)\dagger}(E)}{E_{\mathfrak{b}k}(E) - E} - \frac{\mathbf{b}^{(\pm)}(E)}{(\gamma^{(\mp)})^2 \mathbf{I} + [\mathbf{b}^{(\pm)}(E)]^2}, \quad (5.4.62)$$

gdzie $\{E_{\mathfrak{b}k}(E) = E_{\mathfrak{b}k}(E)\}$, $\{\mathbf{P}_{\mathfrak{b}k}^{(\pm)}(E)\}$ są macierzami kolumnowymi z elementami $\{P_{i,\mathfrak{b}k}^{(\pm)} = (\Phi_i | \beta^{(\pm)} \Psi_{\mathfrak{b}k})\}$, $\{\mathbf{P}_{\mathfrak{b}k}^{(\pm)\dagger}(E)\}$ są macierzami wierszowymi z elementami $\{P_{i,\mathfrak{b}k}^{(\pm)*} = (\beta^{(\pm)} \Psi_{\mathfrak{b}k} | \Phi_i)\}$, \mathbf{I} jest macierzą jednostkową o elementach $\{I_{ij} = \delta_{ij}\}$, natomiast $\mathbf{b}^{(\pm)}(E)$ są macierzami kwadratowymi z elementami zdefiniowanymi równaniem (5.1.92).

Przeanalizujmy bliżej postać prawej strony równania (5.4.62). W przypadku macierzy $\mathbf{R}_{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)$ jej pierwszy składnik jest macierzą reprezentacją operatora $\hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)$ w bazie $\{\Phi_i(\rho)\}$. Jego postać jest formalnie identyczna z postacią nierelatywistycznej macierzy $\mathbf{R}_{\mathfrak{b}}(E)$ daną równaniem (3.3.41) (w tym kontekście patrz jednak podrozdział 5.3). W przeciwieństwie do składnika pierwszego, drugi składnik prawej strony równania (5.4.62) nie ma swojego odpowiednika w teorii nierelatywistycznej. Przyczyną pojawienia się tego składnika jest fakt, że, w odróżnieniu od równania Schrödingera, będącego równaniem różniczkowym cząstkowym drugiego rzędu, równanie Diraca stanowi układ równań różniczkowych cząstkowych rzędu pierwszego. Dodatkowy człon występujący w równaniu dla macierzy $\mathbf{R}_{\mathfrak{b}}^{(+)}(E)$ znika w przypadku, gdy $\gamma^{(+)} = 0$ (to znaczy, gdy $\gamma^{(-)} = \infty$), odpowiadającym przejściu do granicy nierelatywistycznej $c \rightarrow \infty$ (z zastrzeżeniem, że $c\hbar\gamma^{(+)} = \hbar^2/2m$, porównaj (5.1.24)), a także w szczególnym przypadku $\mathbf{b}^{(+)}(E) = \mathbf{0}$. Z kolei, w równaniu dla macierzy $\mathbf{R}_{\mathfrak{b}}^{(-)}(E)$ drugi składnik prawej strony relacji (5.4.62) znika w szczególnym przypadku, gdy $\mathbf{b}^{(-)}(E) = \mathbf{0}$.

Równanie (5.4.62) jest macierzowym odpowiednikiem równania operatorowego (5.4.56) i pozostaje słuszne dla dowolnej ortonormalnej bazy $\{\Phi_i(\rho)\}$ rozpinającej przestrzeń $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$. W konkretnych zastosowaniach metody R -macierzy może się okazać, że wygodnie jest wybrać bazę o postaci (5.1.97)–(5.1.99), z funkcjami bazowymi uporządkowanymi w taki sposób, by spełnione było równanie (5.1.100).

W takiej bazie macierze kolumnowe $\{P_{\mathbf{b}k}^{(\pm)}(E)\}$ mają odpowiednio postaci

$$P_{\mathbf{b}k}^{(+)}(E) = \begin{pmatrix} P_{\mathbf{b}k}^{(+)}(E) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad P_{\mathbf{b}k}^{(-)}(E) = \begin{pmatrix} 0 \\ P_{\mathbf{b}k}^{(-)}(E) \end{pmatrix}, \quad (5.4.63)$$

macierze wierszowe $\{P_{\mathbf{b}k}^{(\pm)\dagger}(E)\}$ są ich sprzężeniami hermitowskimi, a macierze $R_{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ przyjmują postaci (5.1.103) ze zredukowanymi R -macierzami $R_{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ danymi, jak wynika z równań (5.4.62), (5.1.102) i (5.4.63), przez

$$R_{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E) = c\hbar\gamma^{(\pm)} \sum_k \frac{P_{\mathbf{b}k}^{(\pm)}(E)P_{\mathbf{b}k}^{(\pm)\dagger}(E)}{E_{\mathbf{b}k}(E) - E} - \frac{\mathbf{b}^{(\pm)}(E)}{(\gamma^{(\mp)})^2 I + [\mathbf{b}^{(\pm)}(E)]^2}, \quad (5.4.64)$$

przy czym $\{E_{\mathbf{b}k}(E) = E_{\mathbf{b}k}(E) = E_{\hat{\mathbf{b}}k}(E)\}$, macierz I jest macierzą jednostkową, a macierze $\mathbf{b}^{(\pm)}(E)$ zostały zdefiniowane równaniem (5.1.102). Podobnie jak uczyniliśmy to w przypadku równań (5.1.96) oraz (5.1.109), tak i teraz należy podkreślić, że pomimo pozornego podobieństwa równania (5.4.62) i (5.4.64) nie są identyczne, gdyż występujące w nich macierze mają różne wymiary.

Równanie (5.4.64) zostało po raz pierwszy podane przez Szymtkowskiego i Hinzego [121, 122] w szczególnym przypadku sferycznie symetrycznej powierzchni \mathcal{S} i pewnej szczególnej bazy $\{\Phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$ o postaci (5.1.97).⁵¹

Na zakończenie tej części rozważań zwrócimy jeszcze uwagę, że, znając postać (5.4.40) operatora $\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E)$, możemy otrzymać jawne postacie relacji (5.4.24) oraz (5.4.25). Nie będziemy tutaj dyskutowali przypadku ogólnego, kiedy to operatory $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)$ są dowolne (lecz nadal związane relacją (5.1.69)), rozważymy natomiast trzy przypadki szczególne: (i) $\gamma^{(+)} = 0$, (ii) $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) = \hat{\mathbf{o}}$, (iii) $\hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) = \hat{\mathbf{o}}$ (tu i poniżej $\hat{\mathbf{o}}$ oznacza operator zerowy).

Pierwszy z rozważanych przypadków, $\gamma^{(+)} = 0$, odpowiada granicy nierelatywistycznej $c \rightarrow \infty$. Z równania (5.4.40) wynika, że

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathbf{b}}}(E) = \hat{\mathcal{I}}\beta^{(+)} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{A}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')\beta^{(+)} \quad (c \rightarrow \infty). \quad (5.4.65)$$

Uwzględniając ten rezultat w równaniach (5.4.24) i (5.4.25), otrzymujemy

$$\sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}') \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^{\dagger}(E, \mathbf{r}) = \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^{\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}')\beta^{(+)} \\ (\mathbf{r} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{\rho}' \in \mathcal{S}; c \rightarrow \infty). \quad (5.4.66)$$

Wynik (5.4.66) jest zgodny z relacją (3.3.42) otrzymaną przez nas wcześniej w teorii nierelatywistycznej.

Rozważmy z kolei przypadek, gdy $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) = \hat{\mathbf{o}}$. Z warunku brzegowego (5.4.3) można wywnioskować, że w tym przypadku funkcje bazowe $\{\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r})\}$ są takie, iż

$$\beta^{(-)} \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) = \hat{\mathbf{o}}), \quad (5.4.67)$$

⁵¹ W równaniu dla $R_{\mathbf{b}}^{(+)}(E)$ podanym niezależnie przez Goertzela [49] i przez Changa [52], powielanym w późniejszych pracach (patrz, na przykład, [55, 57, 66, 68, 70]), brakuje drugiego wyrazu po prawej stronie równania (5.4.64).

to znaczy, że dolne składowe tych funkcji znikają tożsamościowo na powierzchni \mathcal{S} . Z równania (5.4.40) otrzymujemy

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathbf{b}}}(\mathbf{E}) = \hat{\mathcal{I}}\beta^{(+)} \Rightarrow \mathcal{A}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')\beta^{(+)} \quad (\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) = \hat{\delta}), \quad (5.4.68)$$

a w konsekwencji

$$\sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}') \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r}) = \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}')\beta^{(+)} \\ (\mathbf{r} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{\rho}' \in \mathcal{S}; \hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) = \hat{\delta}). \quad (5.4.69)$$

Zwracamy uwagę, że chociaż relacje (5.4.66) i (5.4.69) wyglądają podobnie, to jednak każda z nich odpowiada zupełnie innej sytuacji. W przypadku równania (5.4.66) operator $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E)$ jest dowolny i $c = \infty$, natomiast w przypadku równania (5.4.69) operator $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E)$ jest operatorem zerowym, a prędkość światła c ma wartość skończoną.

Pozostaje rozważyć trzeci szczególny przypadek, gdy $\hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) = \hat{\delta}$. Tym razem na powierzchni \mathcal{S} znikają tożsamościowo górne składowe funkcji bazowych $\{\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r})\}$,

$$\beta^{(+)}\Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) = \hat{\delta}). \quad (5.4.70)$$

Z równania (5.4.40) wynika, że

$$\hat{\mathcal{A}}_{\hat{\mathbf{b}}}(\mathbf{E}) = \hat{\mathcal{I}}\beta^{(-)} \Rightarrow \mathcal{A}_{\hat{\mathbf{b}}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')\beta^{(-)} \quad (\hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) = \hat{\delta}) \quad (5.4.71)$$

i w konsekwencji

$$\sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \boldsymbol{\rho}') \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \mathbf{r}) = \sum_k \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}(E, \mathbf{r}) \Psi_{\hat{\mathbf{b}}k}^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}')\beta^{(-)} \\ (\mathbf{r} \in \mathcal{V}, \boldsymbol{\rho}' \in \mathcal{S}; \hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) = \hat{\delta}). \quad (5.4.72)$$

Czytelnik powinien zwrócić uwagę na różnice pomiędzy związkami (5.4.66), (5.4.69) i (5.4.72) a relacją zupełności (5.4.7).

5.5 Konstrukcja zasad wariacyjnych związanych z relatywistyczną teorią R -macierzy

5.5.1 Zasady wariacyjne dla wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$

Celem tego podrozdziału będzie skonstruowanie zasad wariacyjnych dla wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$. Operatory te zostały przez nas zdefiniowane równaniami (5.1.23) oraz (5.1.76). Przypominamy, że z dyskusji przeprowadzonej w podrozdziałach 5.1.2 i 5.1.4 wynika, że cztery wymienione operatory mają wspólne funkcje własne. Ponadto, operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$ mają wspólne wartości własne, podobnie jak operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$, przy czym wartości własne operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$ są odwrotnościami wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$.

Dla przejrzystości notacji, w całym podrozdziale 5.5.1 pomijając będziemy indeksy numerujące wartości własne i funkcje własne wymienionych operatorów oraz związane z nimi wielkości.

Konstrukcję szukanych zasad wariacyjnych rozpoczniemy od potraktowania równań (5.1.17), (5.1.31) i (5.1.39) jako więzów i rozważymy funkcjonały

$$F^{(\pm)}[\bar{b}^{\pm 1}, \bar{\lambda}^{(\pm)}, \bar{\Lambda}^{(\pm)}, \bar{\Psi}] = \bar{b}^{\pm 1} + (\bar{\lambda}^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \bar{\Psi} - \gamma^{(\pm)} \bar{b}^{\pm 1} \beta^{(\pm)} \bar{\Psi}) + \langle \bar{\Lambda}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle. \quad (5.5.1)$$

W równaniu (5.5.1) $\bar{b}^{\pm 1} \equiv \bar{b}$ oraz \bar{b}^{-1} są liczbami (w ogólności zespolonymi), $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ są odpowiednio regularnymi funkcjami zdefiniowanymi na powierzchni \mathcal{S} , natomiast $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ są wystarczająco regularnymi funkcjami zdefiniowanymi w objętości \mathcal{V} . Funkcje $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ są funkcjami Lagrange'a dla rozpatrywanego przez nas problemu i są odpowiedzialne za uwzględnienie odpowiednio warunków (5.1.31) i (5.1.17) (jeżeli wybierzemy górny indeks) lub warunków (5.1.39) i (5.1.17) (jeżeli wybierzemy dolny indeks).

Funkcjonały (5.5.1) posiadają następującą własność: jeżeli liczba \bar{b} jest równa jednej z wartości własnych, powiedzmy $b(E)$, operatorów $\hat{B}^{(+)}(E)$ oraz $\hat{R}^{(-)}(E)$ i jeżeli jednocześnie funkcja $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ jest identyczna z odpowiednią funkcją własną tych operatorów, $\Psi(E, \mathbf{r})$, wówczas funkcjonał $F^{(+)}$ przyjmuje wartość liczbową $b(E)$, niezależnie od wyboru postaci funkcji Lagrange'a $\bar{\lambda}^{(+)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}^{(+)}(\mathbf{r})$. Podobnie, jeżeli $\bar{b}^{-1} = b^{-1}(E)$ oraz $\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \Psi(E, \mathbf{r})$, wówczas wartością funkcjonału $F^{(-)}$ jest $b^{-1}(E)$, niezależnie od postaci funkcji $\bar{\lambda}^{(-)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}^{(-)}(\mathbf{r})$. Mamy więc

$$F^{(\pm)}[b^{\pm 1}(E), \bar{\lambda}^{(\pm)}, \bar{\Lambda}^{(\pm)}, \Psi] = b^{\pm 1}(E) \quad (5.5.2)$$

dla dowolnych funkcji Lagrange'a $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$. Wykorzystamy tę własność po to, aby znaleźć takie optymalne postacie funkcji Lagrange'a, oznaczymy je odpowiednio przez $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$, by funkcjonały (5.5.1) były stacjonarne ze względu na nieskończenie małe wariacje $\bar{b}^{\pm 1}$, $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ odpowiednio wokół $b^{\pm 1}(E)$, $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ oraz $\Psi(E, \mathbf{r})$. W celu znalezienia funkcji $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$, obliczamy pierwsze wariacje funkcjonałów w równaniu (5.5.1), otrzymując

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[b^{\pm 1}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi] &= \delta b^{\pm 1} + (\delta \lambda^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \Psi - \gamma^{(\pm)} b^{\pm 1} \beta^{(\pm)} \Psi) \\ &\quad - \gamma^{(\pm)} \delta b^{\pm 1} (\lambda^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \Psi) + (\lambda^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \delta \Psi - \gamma^{(\pm)} b^{\pm 1} \beta^{(\pm)} \delta \Psi) \\ &\quad + \langle \delta \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \Psi \rangle + \langle \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \delta \Psi \rangle \end{aligned} \quad (5.5.3)$$

(tutaj i poniżej $\delta b^{\pm 1}$ oznacza $\delta(b^{\pm 1})$, nie zaś $(\delta b)^{\pm 1}$). Ze względu na równania (5.1.17), (5.1.31) oraz (5.1.39), te człony po prawej stronie równania (5.5.3), które zawierają wariacje $\delta \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\delta \Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ znikają i równanie (5.5.3) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[b^{\pm 1}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi] &= \delta b^{\pm 1} [1 - \gamma^{(\pm)} (\lambda^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \Psi)] \\ &\quad + (\lambda^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \delta \Psi - \gamma^{(\pm)} b^{\pm 1} \beta^{(\pm)} \delta \Psi) + \langle \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \delta \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.4)$$

Ostatni wyraz po prawej stronie równania (5.5.4) można przekształcić do wygodniejszej postaci, wykorzystując twierdzenie Gaussa, z którego wynika, że

$$\langle \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \delta \Psi \rangle = \langle [\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi \rangle - (\Lambda^{(\pm)} | i\hbar \alpha_n \delta \Psi). \quad (5.5.5)$$

W rezultacie otrzymujemy

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[b^{\pm 1}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi] &= \delta b^{\pm 1} [1 - \gamma^{(\pm)}(\lambda^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \Psi)] \\ &+ (i\hbar\alpha_n \Lambda^{(\pm)} - i\alpha_n^{(\mp)} \lambda^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} b^{\pm 1} \beta^{(\pm)} \lambda^{(\pm)} | \delta \Psi) + \langle [\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.6)$$

Z równania (5.5.6) wynika, że aby funkcjonały (5.5.1) były stacjonarne, to znaczy

$$\delta F^{(\pm)}[b^{\pm 1}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi] = 0, \quad (5.5.7)$$

wystarczy zażądać

$$1 - \gamma^{(\pm)}(\lambda^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \Psi) = 0, \quad (5.5.8)$$

$$[\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (5.5.9)$$

oraz

$$i\hbar\alpha_n(\boldsymbol{\rho}) \Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - i\alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}) \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} b^{\pm 1}(E) \beta^{(\pm)} \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (5.5.10)$$

Równanie (5.5.10) można rozbić, przemnażając je z lewej strony przez odpowiednio dobrane macierze. I tak, działając na to równanie macierzami $\beta^{(\pm)}$, otrzymujemy

$$i\hbar\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} b^{\pm 1}(E) \beta^{(\pm)} \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (5.5.11)$$

działając natomiast macierzami $\alpha_n^{(\pm)}$, dostajemy

$$i\hbar\beta^{(\pm)} \Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - i\beta^{(\pm)} \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0. \quad (5.5.12)$$

Z równań (5.5.11) i (5.5.12) wynikają warunki brzegowe spełniane na powierzchni \mathcal{S} przez funkcje $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} b^{\pm 1}(E) \beta^{(\pm)} \Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0. \quad (5.5.13)$$

Porównanie (5.5.13) z (5.1.31) i (5.1.39) prowadzi do wniosku, że funkcje Lagrange'a $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ spełniają na powierzchni \mathcal{S} te same warunki brzegowe, co funkcje własne $\Psi(E, \mathbf{r})$. Ponadto, z równań (5.1.17) i (5.5.9) wynika, że funkcje $\Psi(E, \mathbf{r})$ oraz $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ są rozwiązaniami tego samego liniowego jednorodnego równania różniczkowo-całkowego. Wobec tego funkcje $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ można wybrać w postaci

$$\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \eta^{(\pm)} \Psi(E, \mathbf{r}), \quad (5.5.14)$$

przy czym występujące w powyższym równaniu współczynniki proporcjonalności $\eta^{(\pm)}$ należy jeszcze wyznaczyć. Dokonuje się tego, korzystając z równania (5.5.12) oraz z warunku (5.5.8). W rezultacie otrzymujemy

$$\eta^{(\pm)} = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \frac{1}{(\Psi | \beta^{(\pm)} \Psi)}, \quad (5.5.15)$$

a w konsekwencji

$$\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \frac{1}{(\Psi|\beta^{(\pm)}\Psi)} \Psi(E, \mathbf{r}). \quad (5.5.16)$$

Ponadto, z równań (5.5.16) i (5.5.12) dostajemy

$$\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\mp)} \frac{1}{(\Psi|\beta^{(\pm)}\Psi)} \beta^{(\pm)}\Psi(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.17)$$

Opisana powyżej procedura nie prowadzi do wyznaczenia dolnej składowej spinora $\lambda^{(+)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz górnej składowej spinora $\lambda^{(-)}(\boldsymbol{\rho})$. Poniżej pokażemy jednak, że znajomość tych składowych nie jest potrzebna.

Znalezione przez nas zależności (5.5.16) i (5.5.17) pomiędzy funkcjami $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ a funkcją własną $\Psi(E, \mathbf{r})$ sugerują, że w obliczeniach wariacyjnych wygodnie będzie przyjąć następujące próbne postacie funkcji Lagrange'a

$$\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \frac{1}{(\bar{\Psi}|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi})} \bar{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (5.5.18)$$

$$\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\mp)} \frac{1}{(\bar{\Psi}|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi})} \beta^{(\pm)}\bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.19)$$

Uwzględniając równania (5.5.18) i (5.5.19) w równaniu (5.5.1) definiującym funkcjonały $F^{(\pm)}$ oraz korzystając z następującego związku

$$(\bar{\lambda}^{(\pm)}|\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}) = (\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}|\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}), \quad (5.5.20)$$

wynikającego z własności macierzy $\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\beta^{(\pm)}$ (relacja (5.5.20) potwierdza, że znajomość dolnej składowej spinora $\bar{\lambda}^{(+)}(\boldsymbol{\rho})$ i górnej składowej spinora $\bar{\lambda}^{(-)}(\boldsymbol{\rho})$ rzeczywiście nie jest potrzebna; funkcje $\beta^{(-)}\bar{\lambda}^{(+)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\beta^{(+)}\bar{\lambda}^{(-)}(\boldsymbol{\rho})$ mogą być dowolne), otrzymujemy następujące funkcjonały

$$F^{(\pm)}[\bar{\Psi}] = -\gamma^{(\mp)} \frac{(\bar{\Psi}|\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi})}{(\bar{\Psi}|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi})} - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\bar{\Psi}|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi})}, \quad (5.5.21)$$

posiadające własność rzeczywistości

$$F^{(\pm)}[\bar{\Psi}] = \overline{F^{(\pm)*}[\bar{\Psi}]}, \quad (5.5.22)$$

pożądaną ze względu na fakt, że wartości przyjmowane przez funkcjonały (5.5.21) są oszacowaniami wartości własnych hermitowskich operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$. Poszukiwane przez nas zasady wariacyjne, będące odpowiednikami nierelatywistycznych zasad (3.4.25) i (3.4.51), mają postaci

$$b(E) = \text{stat}_{\bar{\Psi}} \left\{ \frac{2mc}{\hbar} \frac{(\bar{\Psi}|\alpha_n^{(+)}\bar{\Psi})}{(\bar{\Psi}|\beta^{(+)}\bar{\Psi})} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\bar{\Psi}|\beta^{(+)}\bar{\Psi})} \right\}, \quad (5.5.23)$$

$$b^{-1}(E) = \text{stat}_{\bar{\Psi}} \left\{ -\frac{\hbar}{2mc} \frac{(\bar{\Psi} | i\alpha_n^{(-)} \bar{\Psi})}{(\bar{\Psi} | \beta^{(-)} \bar{\Psi})} - \frac{1}{2mc^2} \frac{\langle \bar{\Psi} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi} \rangle}{(\bar{\Psi} | \beta^{(-)} \bar{\Psi})} \right\}, \quad (5.5.24)$$

przy czym w obu przypadkach funkcjonały przyjmują wartości stacjonarne dla tych funkcji spinorowych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$, które są (jednoczesnymi) funkcjami własnymi operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ oraz $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$. Zasada wariacyjna (5.5.23) została po raz pierwszy podana przez Hamachera i Hinzego [71].

W rozdziale 6 pokażemy, w jaki sposób można wykorzystać zasady wariacyjne (5.5.23) i (5.5.24) oraz liniowe funkcje próbne typu Rayleigha–Ritza do znajdowania przybliżonych wartości własnych operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$.

5.5.2 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności

W tym podrozdziale skonstruujemy zasady wariacyjne dla elementów macierzowych $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')$ i ich odwrotności, $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')^{-1}$, gdzie $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$ są operatorami całkowymi zdefiniowanymi w podrozdziale 5.1.4, a $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ i $\Phi'(\boldsymbol{\rho})$ są odpowiednio regularnymi funkcjami zdefiniowanymi na powierzchni \mathcal{S} . W tym celu będziemy potrzebowali pomocniczych funkcji spinorowych $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ oraz $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$, zdefiniowanych jako te szczególne rozwiązania relatywistycznego równania falowego (5.1.17), które na powierzchni \mathcal{S} spełniają niejednorodne warunki brzegowe

$$[i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.25)$$

$$[i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)] \Psi'^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.26)$$

Warunki (5.5.25) i (5.5.26) są odpowiednikami niejednorodnych mieszanych warunków brzegowych (warunków brzegowych trzeciego rodzaju) (3.4.54) występujących w teorii nierelatywistycznej. Ponieważ funkcje $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ są rozwiązaniami równania Diraca (5.1.17), możemy skorzystać z równania (5.1.74) i przepisać warunki (5.5.25) i (5.5.26) w postaci zawierającej operatory całkowite $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$

$$\beta^{(\pm)} \Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E) \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad \beta'^{(\pm)} \Psi'^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E) \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.27)$$

W pierwszej kolejności znajdziemy funkcjonały, których wartościami stacjonarnymi są elementy macierzowe $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')$. Traktując równania (5.1.17), (5.5.26) i drugie z równań (5.5.27) jako więzy, budujemy funkcjonały

$$\begin{aligned} F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}, \bar{\lambda}^{(\pm)}, \bar{\lambda}'^{(\pm)}, \bar{\Lambda}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] &= (\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi') + (\bar{\lambda}^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi') \\ &+ (\bar{\lambda}'^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \Phi') + \langle \bar{\Lambda}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.28)$$

Występujące w równaniu (5.5.28) operatory $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}$ są dowolnymi (w ogólności niehermitowskimi) liniowymi operatorami całkowymi działającymi na funkcje z prze-

strzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$,^{5j} funkcje $\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ są odpowiednio regularnymi funkcjami określonymi na powierzchni \mathcal{S} , natomiast $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r})$ są odpowiednio regularnymi funkcjami zdefiniowanymi w objętości \mathcal{V} . Funkcje $\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ są funkcjami Lagrange'a dla rozpatrywanego przez nas zagadnienia i zostały wprowadzone w celu uwzględnienia równań więzów odpowiednio (5.5.27), (5.5.26) i (5.1.17). W dalszym ciągu rozważań będziemy poszukiwali takich funkcji $\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$, aby zniknęły pierwsze wariacje funkcjonalów (5.5.28) wywołane infinitesimalnymi wariacjami $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}$, $\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r})$ wokół $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$, $\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$. Mamy

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] &= (\Phi | \delta \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)} \Phi') \\ &+ (\chi^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)} - \delta \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)} \Phi') + (\lambda^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)}) \\ &+ \langle \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \delta \Psi'^{(\pm)} \rangle, \end{aligned} \quad (5.5.29)$$

gdzie wykorzystaliśmy fakt, że człony zawierające wariacje $\delta \chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\delta \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\delta \Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ znikają ze względu na równania więzów (5.5.27), (5.5.26) i (5.1.17). Zastosowanie twierdzenia Gaussa do całki objętościowej po prawej stronie równania (5.5.29) przekształca to równanie do postaci

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] &= (\Phi - \chi^{(\pm)} | \delta \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)} \Phi') \\ &+ (\beta^{(\pm)} \chi^{(\pm)} - i\alpha_n^{(\mp)} \lambda^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \lambda^{(\pm)} + ic\hbar\alpha_n \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi'^{(\pm)}) \\ &+ \langle [\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.30)$$

Aby spełniony był warunek

$$\delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] = 0, \quad (5.5.31)$$

wystarczy przyjąć, że

$$[\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (5.5.32)$$

$$\Phi(\boldsymbol{\rho}) - \chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}) \quad (5.5.33)$$

oraz

$$\begin{aligned} \beta^{(\pm)} \chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - i\alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}) \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E) \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n(\boldsymbol{\rho}) \Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) &= 0 \\ (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \end{aligned} \quad (5.5.34)$$

Działając na równanie (5.5.34) z lewej strony macierzami $\beta^{(\pm)}$, otrzymujemy

$$\beta^{(\pm)} \chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E) \lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (5.5.35)$$

^{5j} Nie należy mylić operatorów $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}$ pojawiających się w tym podrozdziale z operatorami $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ zdefiniowanymi równaniem (5.4.18) i wykorzystywanymi przez nas w podrozdziale 5.4.

natomiast działając macierzami $\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, dostajemy

$$-i\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + i\hbar\beta^{(\pm)}\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0. \quad (5.5.36)$$

Z równania (5.5.33) wynika, że

$$\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.37)$$

natomiast równania (5.5.35)–(5.5.37) implikują

$$[i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{c\hbar}\beta^{(\pm)}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.38)$$

Porównując (5.5.32) i (5.5.38) z (5.1.17) i (5.5.25), stwierdzamy, że funkcje Lagrange'a $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ spełniają w objętości \mathcal{V} to samo równanie różniczkowo-całkowe co funkcje $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$, a ponadto spełniają na powierzchni \mathcal{S} niejednorodne warunki brzegowe różniące się od warunków spełnianych przez $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ jedynie stałymi czynnikiem w członach niejednorodnych. Wynika stąd, że możemy przyjąć

$$\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r}), \quad (5.5.39)$$

a w konsekwencji (patrz równanie (5.5.36))

$$\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\mp)}\beta^{(\pm)}\Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.40)$$

Związki (5.5.37), (5.5.40) oraz (5.5.39) pomiędzy funkcjami $\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ a funkcjami $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ i $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ sugerują, że w dalszym ciągu rozważań możemy ograniczyć się do rozpatrywania tylko następujących próbnych postaci funkcji Lagrange'a

$$\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.41)$$

$$\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\mp)}\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.42)$$

$$\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}). \quad (5.5.43)$$

Podstawiając te szczególne postacie funkcji $\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ do równania (5.5.28) definiującego funkcjonały $F^{(\pm)}$, otrzymujemy

$$\begin{aligned} F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] &= (\Phi|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}) + (\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\Phi') \\ &+ \gamma^{(\mp)}(\bar{\Psi}^{(\pm)}|[i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}]\bar{\Psi}'^{(\pm)}) + \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\langle\bar{\Psi}^{(\pm)}|[\hat{H} - E]\bar{\Psi}'^{(\pm)}\rangle. \end{aligned} \quad (5.5.44)$$

Stosując do całki objętościowej po prawej stronie równania (5.5.44) twierdzenie Gaussa, można pokazać, że zdefiniowane tym równaniem funkcjonały posiadają następującą własność symetrii

$$F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] = F^{(\pm)*}[\Phi', \Phi; \bar{\Psi}'^{(\pm)}, \bar{\Psi}^{(\pm)}]. \quad (5.5.45)$$

Funkcjonały (5.5.44) są stacjonarne ze względu na małe, gładkie i poza tym zupełnie dowolne wariacje funkcji $\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r})$ odpowiednio wokół $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$, a ich wartościami stacjonarnymi są elementy macierzowe $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')$. Mamy więc następujące zasady wariacyjne

$$\begin{aligned} (\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi') = \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ (\Phi | \beta^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)}) + (\beta^{(\pm)} \bar{\Psi}^{(\pm)} | \Phi') \right. \\ \left. + \gamma^{(\mp)} (\bar{\Psi}^{(\pm)} | [i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}] \bar{\Psi}'^{(\pm)}) + \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \bar{\Psi}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (5.5.46)$$

będące odpowiednikami nierelatywistycznej zasady wariacyjnej (3.4.73).

Przejdźmy teraz do znalezienia zasad wariacyjnych dla odwrotności elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$, to znaczy dla $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')^{-1}$. W tym celu skonstruujemy funkcyjonały

$$\begin{aligned} F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}, \bar{\chi}^{(\pm)}, \bar{\lambda}^{(\pm)}, \bar{\Lambda}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] = \frac{1}{(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')} \\ + (\bar{\chi}^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi') + (\bar{\lambda}^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \Phi') \\ + \langle \bar{\Lambda}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.47)$$

Będziemy szukali takich szczególnych postaci $\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ funkcji Lagrange'a $\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ (uwzględniających odpowiednio warunki więzów (5.5.27), (5.5.26) i (5.1.17)), aby funkcyjonały (5.5.47) były stacjonarne dla małych wariacji $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}$, $\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ oraz $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r})$ wokół $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$, $\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$. Wariując równanie (5.5.47), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] = - \frac{(\Phi | \delta \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')}{(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')^2} \\ + (\chi^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)} - \delta \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi') + (\lambda^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)}) \\ + \langle \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \delta \Psi'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.48)$$

Prawą stronę równania (5.5.48) można uprościć, stosując twierdzenie Gaussa do występującej tam całki objętościowej. Prowadzi to do równania

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] = - \left[\frac{(\Phi | \delta \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')}{(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi')^2} + (\chi^{(\pm)} | \delta \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)} \Phi') \right] \\ + (\beta^{(\pm)} \chi^{(\pm)} - i\alpha_n^{(\mp)} \lambda^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} \lambda^{(\pm)} + ic\hbar\alpha_n \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi'^{(\pm)}) \\ + \langle [\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.49)$$

Aby zapewnić, że równość

$$\delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] = 0 \quad (5.5.50)$$

zachodzi dla dowolnych wariacji $\delta\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}$ i $\delta\Psi'^{(\pm)}(\mathbf{r})$, zażądamy, by

$$[\hat{H} - E]\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (5.5.51)$$

$$\frac{1}{(\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}\Phi'|\Phi)^2}\Phi(\boldsymbol{\rho}) + \chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (5.5.52)$$

$$\beta^{(\pm)}\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - i\alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho})\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n(\boldsymbol{\rho})\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (5.5.53)$$

Podziałanie na równanie (5.5.53) z lewej strony macierzami $\beta^{(\pm)}$ daje

$$\beta^{(\pm)}\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (5.5.54)$$

zaś podziałanie macierzami $\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ prowadzi do relacji

$$-i\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\beta^{(\pm)}\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0. \quad (5.5.55)$$

Z równania (5.5.52) wnioskujemy, że

$$\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}\Phi'|\Phi)^2}\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.56)$$

natomiast z równań (5.5.54)–(5.5.56) otrzymujemy

$$[i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{c\hbar} \frac{1}{(\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}\Phi'|\Phi)^2} \beta^{(\pm)}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.57)$$

Wykorzystując warunki brzegowe (5.5.27) oraz własność hermitowskości operatorów $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$, wygodnie jest przepisać równania (5.5.56) i (5.5.57) w postaciach

$$\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\beta^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)(\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}\Phi'|\Phi)}\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.58)$$

$$[i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{c\hbar} \frac{1}{(\Phi'|\beta^{(\pm)}\Psi^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)}\beta^{(\pm)}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.59)$$

Porównanie (5.5.51), (5.5.59), (5.1.17) i (5.5.25) upoważnia nas do przyjęcia

$$\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \frac{1}{(\Phi'|\beta^{(\pm)}\Psi^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)}\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r}), \quad (5.5.60)$$

a w konsekwencji (porównaj (5.5.55))

$$\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\mp)} \frac{1}{(\Phi'|\beta^{(\pm)}\Psi^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)}\beta^{(\pm)}\Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.61)$$

Relacje (5.5.58), (5.5.60) i (5.5.61) sugerują następujący naturalny wybór oszacowań funkcji $\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$

$$\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi)(\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}\Phi'|\Phi)}\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.62)$$

$$\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\mp)}\frac{1}{(\Phi'|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi)}\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.63)$$

$$\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\frac{1}{(\Phi'|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi)}\bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}). \quad (5.5.64)$$

Wykorzystanie równań (5.5.62)–(5.5.64) w definicji (5.5.47) prowadzi do następujących funkcjonałów

$$\begin{aligned} & F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] \\ &= -\gamma^{(\mp)}\frac{(\bar{\Psi}^{(\pm)}|[i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}]\bar{\Psi}'^{(\pm)})}{(\Phi|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi')} - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\frac{\langle\bar{\Psi}^{(\pm)}|[\hat{H} - E]\bar{\Psi}'^{(\pm)}\rangle}{(\Phi|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi')}, \end{aligned} \quad (5.5.65)$$

posiadających własność symetrii (5.5.45). Poszukiwane przez nas zasady wariacyjne dla odwrotności elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$, będące odpowiednikami nierelatywistycznej zasady (3.4.92), mają postać

$$\begin{aligned} (\Phi|\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}\Phi')^{-1} &= \text{st at}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ -\gamma^{(\mp)}\frac{(\bar{\Psi}^{(\pm)}|[i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}]\bar{\Psi}'^{(\pm)})}{(\Phi|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi')} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\frac{\langle\bar{\Psi}^{(\pm)}|[\hat{H} - E]\bar{\Psi}'^{(\pm)}\rangle}{(\Phi|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi')} \right\}. \end{aligned} \quad (5.5.66)$$

Funkcjonały stojące po prawej stronie równania (5.5.66) przyjmują wartości stacjonarne dla $\bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = \eta\Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{r})$ i $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = \eta'\Psi'^{(\pm)}(E, \boldsymbol{r})$, gdzie η i η' są dowolnymi liczbami zespolonymi różnymi od zera, a $\Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \boldsymbol{r})$ są rozwiązaniami równania Diraca (5.1.17) spełniającymi na powierzchni \mathcal{S} warunki brzegowe odpowiednio (5.5.25) i (5.5.26).

W rozdziale 6 omówimy zastosowanie zasad wariacyjnych (5.5.46) i (5.5.66) do znajdowania przybliżonych wartości elementów macierzowych operatorów i $\hat{\mathcal{R}}_6^{(\pm)}(E)$ oraz przybliżonych wartości odwrotności tych elementów metodą Rayleigha–Ritza.

5.5.3 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności

Celem tego podrozdziału będzie znalezienie zasad wariacyjnych dla elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')$ i ich odwrotności, $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')^{-1}$, gdzie $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ są operatorami całkowymi zdefiniowanymi równaniem (5.1.23), natomiast $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ i $\Phi'(\boldsymbol{\rho})$

są dowolnymi odpowiednio regularnymi funkcjami spinorowymi zdefiniowanymi na powierzchni \mathcal{S} . Postąpimy podobnie jak w podrozdziale poprzednim i wprowadzimy pomocnicze funkcje spinorowe $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ należące do $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$, to znaczy spełniające w objętości \mathcal{V} równanie (5.1.17). Jednakże, w odróżnieniu od funkcji wykorzystywanych w podrozdziale 5.5.2, tym razem na powierzchni \mathcal{S} na funkcje $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ narzucamy niejednorodne warunki brzegowe o postaci

$$\beta^{(\pm)} \Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad \beta^{(\pm)} \Psi'^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)} \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.67)$$

Warunki (5.5.67) są odpowiednikami niejednorodnych warunków brzegowych Dirichleta (3.4.94) wykorzystywanych przez nas w teorii nierelatywistycznej dyskutowanej w podrozdziale 3.4.4. Ponieważ z założenia funkcje $\Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho})$ oraz $\Psi'^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho})$ należą do $\mathcal{D}_{\mathcal{S}}(E)$, uwzględniając równanie (5.1.23), warunki (5.5.67) można przepisać w postaci

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \Psi'^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E) \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.68)$$

Konstrukcję zasad wariacyjnych dla elementów macierzowych $(\Phi | \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi')$ rozpoczniemy od zdefiniowania funkcyjałów

$$\begin{aligned} F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \bar{\chi}^{(\pm)}, \bar{\lambda}^{(\pm)}, \bar{\Lambda}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] &= (\Phi | \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') \\ &+ (\bar{\chi}^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') + (\bar{\lambda}^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)} - \beta^{(\pm)} \Phi') \\ &+ \langle \bar{\Lambda}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.69)$$

Notacja zastosowana przez nas w równaniu (5.5.69) jest analogiczna do używanej w podrozdziale 5.5.2. Pierwsza wariacja funkcyjału (5.5.69) ma postać

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] &= (\Phi | \delta \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') \\ &+ (\chi^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \delta \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') + (\lambda^{(\pm)} | \beta^{(\pm)} \delta \Psi'^{(\pm)}) \\ &+ \langle \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \delta \Psi'^{(\pm)} \rangle \end{aligned} \quad (5.5.70)$$

i, po skorzystaniu z twierdzenia Gaussa, może zostać przekształcona do postaci

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] &= (\Phi - \gamma^{(\pm)} \chi^{(\pm)} | \delta \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') \\ &+ (-i\alpha_n^{(\mp)} \chi^{(\pm)} + \beta^{(\pm)} \lambda^{(\pm)} + ic\hbar\alpha_n \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi'^{(\pm)}) + \langle [\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)} | \delta \Psi'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.71)$$

Aby prawa strona równania (5.5.71) zniknęła dla dowolnych wariacji $\delta \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}$ oraz $\delta \Psi'^{(\pm)}(\mathbf{r})$, to znaczy

$$\delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] = 0, \quad (5.5.72)$$

zaządamy

$$[\hat{H} - E] \Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (5.5.73)$$

$$\Phi(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)} \chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}) \quad (5.5.74)$$

oraz

$$-i\alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho})\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + \beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n(\boldsymbol{\rho})\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (5.5.75)$$

Równanie (5.5.75) implikuje

$$\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (5.5.76)$$

$$-i\beta^{(\pm)}\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\beta^{(\pm)}\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (5.5.77)$$

zaś z równań (5.5.74) i (5.5.77) otrzymujemy

$$\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\mp)}\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.78)$$

$$\beta^{(\pm)}\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\beta^{(\pm)}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.79)$$

Z równań (5.5.73), (5.5.79), (5.1.17) oraz (5.5.67) wynika, że możemy przyjąć

$$\Lambda^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r}) \quad (5.5.80)$$

i w konsekwencji (patrz równanie (5.5.76))

$$\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\mp)}i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.81)$$

Wybierając jako oszacowania funkcji Lagrange'a

$$\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\gamma^{(\mp)}\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.82)$$

$$\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\mp)}i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.83)$$

$$\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = -\frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \quad (5.5.84)$$

i podstawiając równania (5.5.82)–(5.5.84) do definicji (5.5.69), dochodzimy do funkcjonałów

$$\begin{aligned} F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] &= -\gamma^{(\mp)}(\Phi|i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}) - \gamma^{(\mp)}(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\Phi') \\ &+ \gamma^{(\mp)}(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\bar{\Psi}'^{(\pm)}) - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\langle\bar{\Psi}^{(\pm)}|[\hat{H} - E]\bar{\Psi}'^{(\pm)}\rangle, \end{aligned} \quad (5.5.85)$$

posiadających własność symetrii (5.5.45). Szukane przez nas zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ mają postać

$$\begin{aligned} (\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi') &= \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ -\gamma^{(\mp)}(\Phi|i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}) - \gamma^{(\mp)}(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\Phi') \right. \\ &\left. + \gamma^{(\mp)}(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\bar{\Psi}'^{(\pm)}) - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\langle\bar{\Psi}^{(\pm)}|[\hat{H} - E]\bar{\Psi}'^{(\pm)}\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (5.5.86)$$

przy czym wartości stacjonarne są osiągnane dla tych wariacyjnych funkcji próbnych, które spełniają równanie Diraca (5.1.17) w objętości \mathcal{V} oraz warunki brzegowe (5.5.67) na powierzchni \mathcal{S} . Zasady (5.5.86) są odpowiednikami nierelatywistycznej zasady wariacyjnej (3.4.112).

Pozostaje nam skonstruować zasady wariacyjne dla odwrotności elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')$. Punktem wyjścia dla naszych rozważań będą funkcjonały

$$\begin{aligned} F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \bar{\chi}^{(\pm)}, \bar{\lambda}^{(\pm)}, \bar{\Lambda}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] &= \frac{1}{(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')} \\ &+ (\bar{\chi}^{(\pm)}|i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi') + (\bar{\lambda}^{(\pm)}|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)} - \beta^{(\pm)}\Phi') \\ &+ \langle \bar{\Lambda}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle, \end{aligned} \quad (5.5.87)$$

w których warunki (5.5.68), (5.5.67) oraz (5.1.17) uwzględniono jako równania więzów. Dokonując wariacji równania (5.5.87) i biorąc pod uwagę fakt, że ze względu na równania więzów człony zawierające wariacje $\delta\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\delta\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i $\delta\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$ znikają, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] &= -\frac{(\Phi|\delta\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')}{(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')^2} \\ &+ (\chi^{(\pm)}|i\alpha_n^{(\pm)}\delta\Psi'^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}\delta\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi') + (\lambda^{(\pm)}|\beta^{(\pm)}\delta\Psi'^{(\pm)}) \\ &+ \langle \Lambda^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \delta\Psi'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.88)$$

Po zastosowaniu twierdzenia Gaussa, równanie (5.5.88) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] &= -\left[\frac{(\Phi|\delta\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')}{(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')^2} + \gamma^{(\pm)}(\chi^{(\pm)}|\delta\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi') \right] \\ &+ (-i\alpha_n^{(\mp)}\chi^{(\pm)} + \beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)} + ic\hbar\alpha_n\Lambda^{(\pm)}|\delta\Psi'^{(\pm)}) + \langle [\hat{H} - E]\Lambda^{(\pm)}|\delta\Psi'^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5.89)$$

Warunkiem wystarczającym na to, by pierwsze wariacje funkcjonałów (5.5.87) zniknęły, to znaczy

$$\delta F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}, \chi^{(\pm)}, \lambda^{(\pm)}, \Lambda^{(\pm)}, \Psi'^{(\pm)}] = 0, \quad (5.5.90)$$

jest założenie, iż

$$[\hat{H} - E]\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = 0 \quad (\boldsymbol{r} \in \mathcal{V}), \quad (5.5.91)$$

$$\frac{1}{(\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi'|\Phi)}\Phi(\boldsymbol{\rho}) + \gamma^{(\pm)}\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (5.5.92)$$

$$-i\alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho})\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + \beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n(\boldsymbol{\rho})\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (5.5.93)$$

Działając z lewej strony na równanie (5.5.93) macierzami $\beta^{(\pm)}$ lub $\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, otrzymujemy odpowiednio

$$\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0, \quad (5.5.94)$$

$$-i\beta^{(\pm)}\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) + ic\hbar\beta^{(\pm)}\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = 0. \quad (5.5.95)$$

Z równań (5.5.92) i (5.5.95) znajdujemy

$$\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\mp)} \frac{1}{(\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi'|\Phi)^2} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.96)$$

$$\beta^{(\pm)}\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \frac{1}{(\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi'|\Phi)^2} \beta^{(\pm)}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.97)$$

Własność hermitowskości operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ oraz równanie (5.5.68) pozwalają nam przepisać zależności (5.5.96) oraz (5.5.97) w następujących wygodniejszych postaciach

$$\chi^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(i\alpha_n^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)(\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi'|\Phi)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.98)$$

$$\beta^{(\pm)}\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{\gamma^{(\pm)}}{c\hbar} \frac{1}{(\Phi'|i\alpha_n^{(\pm)}\Psi^{(\pm)})(i\alpha_n^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)} \beta^{(\pm)}\Phi(\boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.99)$$

Jak wynika z porównania (5.5.91), (5.5.99), (5.1.17) i (5.5.67), możemy przyjąć, że

$$\Lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{\gamma^{(\pm)}}{c\hbar} \frac{1}{(\Phi'|i\alpha_n^{(\pm)}\Psi^{(\pm)})(i\alpha_n^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)} \Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{r}), \quad (5.5.100)$$

a w konsekwencji (porównaj (5.5.94))

$$\beta^{(\pm)}\lambda^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \frac{1}{(\Phi'|i\alpha_n^{(\pm)}\Psi^{(\pm)})(i\alpha_n^{(\pm)}\Psi'^{(\pm)}|\Phi)} i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\Psi^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}). \quad (5.5.101)$$

Przyjmując w równaniu (5.5.87) funkcje $\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$, $\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ oraz $\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$ w postaciach

$$\bar{\chi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi)(\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi'|\Phi)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.102)$$

$$\beta^{(\pm)}\bar{\lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \frac{1}{(\Phi'|i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi)} i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.103)$$

$$\bar{\Lambda}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{\gamma^{(\pm)}}{c\hbar} \frac{1}{(\Phi'|i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)})(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}|\Phi)} \bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}), \quad (5.5.104)$$

sugerowanych relacjami (5.5.98), (5.5.101) i (5.5.100), otrzymujemy symetryczne (w sensie równania (5.5.45)) funkcjonały

$$F^{(\pm)}[\Phi, \Phi'; \bar{\Psi}^{(\pm)}, \bar{\Psi}'^{(\pm)}] = \gamma^{(\pm)} \frac{(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\bar{\Psi}'^{(\pm)})}{(\Phi|i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)})(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\Phi')} - \frac{\gamma^{(\pm)}}{c\hbar} \frac{\langle \bar{\Psi}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle}{(\Phi|i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)})(i\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\Phi')}, \quad (5.5.105)$$

których wartościami stacjonarnymi, jak wynika z przedstawionej powyżej metody konstrukcji, są odwrotności elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')$. Szukane zasady wariacyjne, będące odpowiednikami nierelatywistycznej zasady (3.4.131), mają więc postać

$$\begin{aligned} (\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi')^{-1} = \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ \gamma^{(\pm)} \frac{(\text{i}\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\bar{\Psi}'^{(\pm)})}{(\Phi|\text{i}\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)})(\text{i}\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\Phi')} \right. \\ \left. - \frac{\gamma^{(\pm)}}{c\hbar} \frac{\langle \bar{\Psi}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle}{(\Phi|\text{i}\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)})(\text{i}\alpha_n^{(\pm)}\bar{\Psi}^{(\pm)}|\Phi')} \right\}. \end{aligned} \quad (5.5.106)$$

W obu zasadach wartości stacjonarne są przyjmowane dla funkcji próbnych postaci $\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \eta\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$, $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \eta'\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$, gdzie η i η' są dowolnymi liczbami zespolonymi różnymi od zera, a $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ oraz $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ są tymi rozwiązaniami równania Diraca (5.1.17), które na powierzchni \mathcal{S} spełniają niejednorodne warunki brzegowe (5.5.67).

Zastosowanie liniowych funkcji próbnych oraz zasad wariacyjnych (5.5.86) i (5.5.106) do znajdowania przybliżonych wartości elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ oraz przybliżonych wartości odwrotności tych elementów zostanie przedstawione w rozdziale 6.

5.5.4 Zasady wariacyjne z więzami nałożonymi na funkcje próbne

Konstruując w podrozdziałach 5.5.2 i 5.5.3 zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów występujących w teorii R -macierzy dla równania Diraca, przyjęliśmy milczące założenie, iż zarówno górne, jak i dolne składowe funkcje wariacyjnych są ciągłe wewnątrz objętości \mathcal{V} . Poza tym warunkiem, funkcje wariacyjne mogły być dowolne. Celem tego podrozdziału będzie pokazanie, że narzucenie na funkcje wariacyjne pewnych dodatkowych ograniczeń może prowadzić do prostszych zasad wariacyjnych (porównaj podrozdział 3.4.5).

Zacniemy od dyskusji zasad wariacyjnych (5.5.46) dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$. Jeżeli dopuścimy do rozważań jedynie takie funkcje próbne $\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r})$, które spełniają warunki brzegowe typu (5.5.25) i (5.5.26), to znaczy

$$[\text{i}\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]\bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)}\beta^{(\pm)}\Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.107)$$

$$[\text{i}\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}(E)]\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)}\beta^{(\pm)}\Phi'(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.108)$$

wówczas człony drugi i trzeci po prawej stronie równania (5.5.46) znoszą się wzajemnie i w wyniku otrzymujemy odpowiedniki nierelatywistycznej zasady wariacyjnej Jacksona (3.4.137)

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}\Phi') = \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ (\Phi|\beta^{(\pm)}\bar{\Psi}'^{(\pm)}) + \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \bar{\Psi}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle \right\}. \quad (5.5.109)$$

Podobnie, jeżeli w zasadach wariacyjnych (5.5.86) dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ zastosujemy funkcje próbne $\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r})$ spełniające na powierzchni \mathcal{S} warunki brzegowe typu Dirichleta (porównaj (5.5.67)),

$$\beta^{(\pm)} \bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad \beta^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)} \Phi'(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.5.110)$$

w rezultacie otrzymamy zasady wariacyjne

$$(\Phi | \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') = \text{stat}_{\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'} \left\{ -\gamma^{(\mp)} (\Phi | i\alpha_n^{(\pm)} \bar{\Psi}'^{(\pm)}) - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \bar{\Psi}^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \bar{\Psi}'^{(\pm)} \rangle \right\}, \quad (5.5.111)$$

będące odpowiednikami nierelatywistycznej zasady (3.4.139).

Rozdział 6

ZASTOSOWANIE FUNKCJI PRÓBNYCH TYPU RAYLEIGHA–RITZA W ZASADACH WARIACYJNYCH ZWIĄZANYCH Z METODĄ R -MACIERZY

Zasady wariacyjne skonstruowane przez nas w podrozdziałach 3.4 i 5.5 mogą być wykorzystywane w praktyce do obliczania przybliżonych wartości własnych operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}(E)$, $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}^{(\pm)}(E)$ oraz elementów macierzowych operatorów $\hat{B}_b(E)$, $\hat{R}_b(E)$, $\hat{B}_b^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_b^{(\pm)}(E)$. Aby znaleźć przybliżoną wartość własną lub element macierzowy, należy wybrać klasę funkcji próbnych zależnych od pewnych parametrów wariacyjnych, a następnie wyznaczyć optymalne wartości parametrów z warunku stacjonarności odpowiedniego funkcjonału ze względu na ich małe wariacje. Podstawiając znaną w ten sposób najlepszą (w rozważanej klasie) postać funkcji próbnej do wykorzystanego funkcjonału, otrzymujemy wariacyjne oszacowanie poszukiwanej wielkości.

Spośród nieskończenie wielu klas dopuszczalnych funkcji próbnych, w zastosowaniach praktycznych rachunku wariacyjnego w fizyce szczególną popularnością cieszą się liniowe funkcje próbne typu Rayleigha–Ritza [136, 139–143] o postaci

$$\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \bar{c}_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (6.0.1)$$

W równaniu (6.0.1) zakłada się, że liniowo niezależne funkcje $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ są znane, natomiast współczynniki $\{\bar{c}_i\}$, stanowiące “współrzędne” funkcji $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ w bazie $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$, są parametrami wariacyjnymi, których optymalne wartości $\{\bar{c}_i\}$ należy wyznaczyć. Poniżej omówimy zastosowanie funkcji typu (6.0.1) w wariacyjnych obliczeniach przybliżonych wartości elementów macierzowych operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}_b(E)$, $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_b^{(\pm)}(E)$ oraz przybliżonych wartości własnych operatorów $\hat{R}(E)$, $\hat{B}(E)$, $\hat{R}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{B}^{(\pm)}(E)$.

6.1 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{R}_b^{(\pm)}(E)$, $\hat{B}(E)$, $\hat{R}_b^{(\pm)}(E)$ i $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ oraz ich odwrotności

6.1.1 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{R}_b(E)$ i ich odwrotności

Jako pierwszy przykład, zastosujemy funkcje próbne typu Rayleigha–Ritza

$$\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \bar{c}_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \bar{c}'_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (6.1.1)$$

w zasadzie wariacyjnej (3.4.73) dla elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')$. W równaniu (6.1.1) N jest liczbą użytych funkcji bazowych $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$, taką samą dla obu funkcji próbnych. Podstawienie szczególnych postaci (6.1.1) funkcji wariacyjnych $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ do funkcjonału (3.4.71) daje

$$F[\Phi, \Phi'; \{\bar{c}_i^*\}, \{\bar{c}'_i\}] = \sum_{i=1}^N \bar{c}'_i (\Phi|\phi_i) + \sum_{i=1}^N \bar{c}_i^* (\phi_i|\Phi') - \sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i^* \bar{c}'_j (\phi_i|[\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}]\phi_j) - \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i^* \bar{c}'_j \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle. \quad (6.1.2)$$

Zastosowanie notacji macierzowej pozwala przepisać równanie (6.1.2) w zwartej postaci

$$F[\mathbf{f}^\dagger, \mathbf{f}'; \bar{\mathbf{c}}^\dagger, \bar{\mathbf{c}}'] = \mathbf{f}^\dagger \bar{\mathbf{c}}' + \bar{\mathbf{c}}^\dagger \mathbf{f}' - \bar{\mathbf{c}}^\dagger \mathbf{S}_b \bar{\mathbf{c}}', \quad (6.1.3)$$

gdzie \mathbf{f}^\dagger oraz $\bar{\mathbf{c}}^\dagger$ są N -składnikowymi macierzami jednowierszowymi z elementami odpowiednio $\{f_i^* = (\Phi|\phi_i)\}$ i $\{\bar{c}_i^*\}$, \mathbf{f}' oraz $\bar{\mathbf{c}}'$ są N -składnikowymi macierzami jednokolumnowymi z elementami odpowiednio $\{f'_i = (\phi_i|\Phi')\}$ i $\{\bar{c}'_i\}$, a $\mathbf{S}_b(E)$ jest kwadratową macierzą hermitowską o wymiarach $N \times N$ z elementami

$$S_{bij}(E) = (\phi_i|[\nabla_n - \hat{\mathbf{b}}]\phi_j) + \frac{2m}{\hbar^2} \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle. \quad (6.1.4)$$

Wartością stacjonarną funkcjonału (6.1.3) ze względu na wariacje składowych wektorów $\bar{\mathbf{c}}^\dagger$ oraz $\bar{\mathbf{c}}'$ jest przybliżona wartość elementu macierzowego $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')$, którą będziemy oznaczali przez $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi')$. Mamy zatem

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathbf{b}}}\Phi') = \text{stat}_{\bar{\mathbf{c}}^\dagger, \bar{\mathbf{c}}'} \left\{ \mathbf{f}^\dagger \bar{\mathbf{c}}' + \bar{\mathbf{c}}^\dagger \mathbf{f}' - \bar{\mathbf{c}}^\dagger \mathbf{S}_b \bar{\mathbf{c}}' \right\}. \quad (6.1.5)$$

Te wektory $\bar{\mathbf{c}}^\dagger$ oraz $\bar{\mathbf{c}}'$, dla których funkcjonał (6.1.3) osiąga wartość stacjonarną oznaczymy odpowiednio przez $\tilde{\mathbf{c}}^\dagger$ oraz $\tilde{\mathbf{c}}'$. Pierwsza wariacja funkcjonału (6.1.3), wywołana nieskończenie małymi wariacjami macierzy $\bar{\mathbf{c}}^\dagger$ i $\bar{\mathbf{c}}'$ wokół $\tilde{\mathbf{c}}^\dagger$ i $\tilde{\mathbf{c}}'$, jest równa

$$\delta F[\mathbf{f}^\dagger, \mathbf{f}'; \tilde{\mathbf{c}}^\dagger, \tilde{\mathbf{c}}'] = [\mathbf{f}^\dagger - \tilde{\mathbf{c}}^\dagger \mathbf{S}_b] \delta \mathbf{c}' + \delta \mathbf{c}^\dagger [\mathbf{f}' - \mathbf{S}_b \tilde{\mathbf{c}}']. \quad (6.1.6)$$

Ponieważ z założenia zachodzi

$$\delta F[\mathbf{f}^\dagger, \mathbf{f}'; \tilde{\mathbf{c}}^\dagger, \tilde{\mathbf{c}}'] = 0, \quad (6.1.7)$$

z równania (6.1.6) otrzymujemy

$$\mathbf{f}^\dagger - \tilde{\mathbf{c}}^\dagger \mathbf{S}_b = 0, \quad \mathbf{f}' - \mathbf{S}_b \tilde{\mathbf{c}}' = 0, \quad (6.1.8)$$

skąd wynika, że

$$\tilde{\mathbf{c}}^\dagger = \mathbf{f}^\dagger \mathbf{S}_b^{-1}, \quad \tilde{\mathbf{c}}' = \mathbf{S}_b^{-1} \mathbf{f}'. \quad (6.1.9)$$

Ponieważ macierz S_b jest funkcją energii (porównaj (6.1.4)), od energii zależą również wektory \tilde{c}^\dagger oraz \tilde{c}' .

Podstawienie optymalnych postaci (6.1.9) wektorów \tilde{c}^\dagger oraz \tilde{c}' do równania (6.1.3) i skorzystanie z równania (6.1.5) prowadzi do następującego wariacyjnego oszacowania wartości elementu macierzowego^{6A} $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_b\Phi')$

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_b\Phi') \stackrel{\text{var}}{=} f^\dagger S_b^{-1} f' = \sum_{i,j=1}^N (\Phi|\phi_i)[S_b^{-1}]_{ij}(\phi_j|\Phi'). \quad (6.1.10)$$

Ponieważ funkcje $\Phi(\rho)$ i $\Phi'(\rho')$ są dowolne, z równania (6.1.10) otrzymujemy wariacyjne oszacowanie jądra $\mathcal{R}_b(E, \rho, \rho')$

$$\tilde{\mathcal{R}}_b(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_{i,j=1}^N \phi_i(\rho)[S_b^{-1}(E)]_{ij}\phi_j^*(\rho'). \quad (6.1.11)$$

Jak widać, jądro (6.1.11) jest hermitowskie; należało tego oczekiwać, gdyż funkcjonal (3.4.71) posiada własność symetrii (3.4.72). Jądro to definiuje hermitowski operator całkowy $\tilde{\mathcal{R}}_b(E)$ aproksymujący operator $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$.

Warto zauważyć, że zarówno element macierzowy $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_b\Phi')$, jak i jądro $\tilde{\mathcal{R}}_b(E, \rho, \rho')$ można przedstawić w postaci ilorazów dwóch wyznaczników. Wykorzystując relację (D.9) wyprowadzoną w uzupełnieniu D, z równań (6.1.10) i (6.1.11) znajdujemy

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_b\Phi') = -\frac{\det \begin{pmatrix} S_b & f' \\ f^\dagger & 0 \end{pmatrix}}{\det S_b} \quad (6.1.12)$$

oraz

$$\tilde{\mathcal{R}}_b(E, \rho, \rho') = -\frac{\det \begin{pmatrix} S_b(E) & \phi^*(\rho') \\ \phi^T(\rho) & 0 \end{pmatrix}}{\det S_b(E)}, \quad (6.1.13)$$

gdzie $\phi^T(\rho)$ jest N -składnikową macierzą jednowierszową z elementami $\{\phi_i(\rho)\}$, natomiast $\phi^*(\rho')$ jest N -składnikową macierzą jednokolumnową z elementami $\{\phi_i^*(\rho')\}$.

Jeżeli zbiór funkcji $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ wykorzystanych w rozwinięciach (6.1.1) stanowi bazę w zbiorze $\mathcal{D}_V(E)$, z równania (6.1.11) otrzymujemy ściśle rozwinięcie jądra $\mathcal{R}_b(E, \rho, \rho')$

$$\mathcal{R}_b(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_{i,j} \phi_i(\rho)[S_b^{-1}(E)]_{ij}\phi_j^*(\rho'). \quad (6.1.14)$$

Pokażemy, że zastosowanie funkcji próbnych (6.1.1) w zasadzie wariacyjnej (3.4.92) dla odwrotności elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}_b\Phi')$ również prowadzi do

^{6A} Tutaj i dalej znak $\stackrel{\text{var}}{=}$ oznacza, że dana równość jest końcowym wynikiem rozważań opartych na zastosowaniu odpowiedniej zasady wariacyjnej.

równań (6.1.10) i (6.1.11) (porównaj także [23, 46]). Podstawiając funkcje (6.1.1) do funkcjonału (3.4.91), otrzymujemy (w notacji macierzowej)

$$F[f^\dagger, f'; \tilde{c}^\dagger, \tilde{c}'] = \frac{\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}'}{(\tilde{c}^\dagger f')(f^\dagger \tilde{c}')}. \quad (6.1.15)$$

Warunek znikania pierwszej wariacji funkcjonału (6.1.15) spowodowanej infinitezymalnymi wariacjami wektorów \tilde{c}^\dagger i \tilde{c}' odpowiednio wokół \tilde{c}^\dagger oraz \tilde{c}' , danej przez

$$\delta F[f^\dagger, f'; \tilde{c}^\dagger, \tilde{c}'] = \delta c^\dagger \frac{(\tilde{c}^\dagger f') S_b \tilde{c}' - (\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}') f'}{(\tilde{c}^\dagger f')^2 (f^\dagger \tilde{c}')} - \frac{(f^\dagger \tilde{c}') \tilde{c}^\dagger S_b - (\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}') f^\dagger}{(\tilde{c}^\dagger f')(f^\dagger \tilde{c}')^2} \delta c', \quad (6.1.16)$$

prowadzi do następujących relacji

$$(\tilde{c}^\dagger f') S_b \tilde{c}' - (\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}') f' = 0, \quad (f^\dagger \tilde{c}') \tilde{c}^\dagger S_b - (\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}') f^\dagger = 0, \quad (6.1.17)$$

z których wynika, że

$$\tilde{c}^\dagger = \frac{\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}'}{f^\dagger \tilde{c}'} f^\dagger S_b^{-1}, \quad \tilde{c}' = \frac{\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}'}{\tilde{c}^\dagger f'} S_b^{-1} f'. \quad (6.1.18)$$

(Zwracamy uwagę, że współczynniki (6.1.18) są po prostu dowolnymi wielokrotnościami współczynników (6.1.9).) Mnożąc pierwsze z równań (6.1.18) z prawej strony przez f' , zaś drugie z lewej strony przez f^\dagger , z którejkolwiek z otrzymanych w ten sposób równości, po prostych przekształceniach, dostajemy

$$\frac{\tilde{c}^\dagger S_b \tilde{c}'}{(\tilde{c}^\dagger f')(f^\dagger \tilde{c}')} = (f^\dagger S_b^{-1} f')^{-1}. \quad (6.1.19)$$

Porównując wynik (6.1.19) z postacią funkcjonału (6.1.15) oraz biorąc pod uwagę, że wartości przyjmowane przez ten funkcjonał są oszacowaniami wartości odwrotności elementu macierzowego $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}} \Phi)$, dochodzimy do równania (6.1.10), a w konsekwencji do równania (6.1.11).

Interesującym jest, że definicję (6.1.11) jądra $\tilde{\mathcal{R}}_{\hat{\mathfrak{b}}}(E, \rho, \rho')$ można zapisać w postaci przypominającej równanie (3.3.39). Aby to pokazać, zauważmy przede wszystkim, że zachodzi

$$S_b(E) = \frac{2m}{\hbar^2} [Y_b(E) - EO], \quad (6.1.20)$$

gdzie $Y_b(E)$ oraz O są hermitowskimi macierzami kwadratowymi o wymiarach $N \times N$ z elementami

$$Y_{bij}(E) = \frac{\hbar^2}{2m} (\phi_i | [\nabla_n - \hat{\mathfrak{b}}] \phi_j) + \langle \phi_i | \hat{H} \phi_j \rangle, \quad (6.1.21)$$

$$O_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle. \quad (6.1.22)$$

Macierz O jest macierzą Grama układu funkcji $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ i w związku z tym jest nieujemnie określona. Rozważmy teraz macierzowe zagadnienie na wartości własne

$$Y_b(E) u_{bk}(E) = \mathcal{E}_{bk}(E) O u_{bk}(E), \quad (6.1.23)$$

w którym $\mathcal{E}_{bk}(E)$ oznacza k -tą wartość własną, a $u_{bk}(E)$ jest odpowiadającym jej wektorem własnym z elementami $\{u_{bik}(E)\}$, $i = 1, 2, \dots, N$. Jeżeli macierze $Y_b(E)$ oraz O są nieosobliwe, wówczas zagadnienie (6.1.23) ma dokładnie N rozwiązań. Z hermitowskości macierzy $Y_b(E)$ i O wynika, że wszystkie wartości własne $\{\mathcal{E}_{bk}(E)\}$ są rzeczywiste, a wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne w sensie równania

$$u_{bk}^\dagger(E) O u_{bl}(E) = 0 \quad (\mathcal{E}_{bk}(E) \neq \mathcal{E}_{bl}(E)). \quad (6.1.24)$$

Ponieważ wektory odpowiadające zdegenerowanym wartościom własnym (o ile takie występują) można zawsze zortogonalizować, w dalszym ciągu założymy, że dla dowolnych dwóch wektorów własnych $u_{bk}(E)$ i $u_{bl}(E)$ zachodzi

$$u_{bk}^\dagger(E) O u_{bl}(E) = \delta_{kl} \quad (k, l = 1, 2, \dots, N). \quad (6.1.25)$$

Jeżeli z wektorów własnych $\{u_{bk}(E)\}$ utworzymy macierz kwadratową $U_b(E)$ w taki sposób, że wektor $u_{bk}(E)$ stanowi jej k -tą kolumnę,^{6B} z równań (6.1.23) oraz (6.1.25) mamy wówczas

$$Y_b(E) U_b(E) = O U_b(E) \mathcal{E}_b(E), \quad (6.1.26)$$

$$U_b^\dagger(E) O U_b(E) = I, \quad (6.1.27)$$

przy czym $\mathcal{E}_b(E)$ jest macierzą diagonalną o wymiarach $N \times N$ z wyrazami

$$\mathcal{E}_{bij}(E) = \mathcal{E}_{bi}(E) \delta_{ij}, \quad (6.1.28)$$

a I oznacza jednostkową macierz $N \times N$. Z równań (6.1.26) oraz (6.1.27) wynika, że

$$U_b^\dagger(E) Y_b(E) U_b(E) = \mathcal{E}_b(E), \quad (6.1.29)$$

natomiast równania (6.1.20), (6.1.29) oraz (6.1.27) implikują

$$U_b^\dagger(E) S_b(E) U_b(E) = \frac{2m}{\hbar^2} [\mathcal{E}_b(E) - E I], \quad (6.1.30)$$

skąd, po prostych przekształceniach, otrzymujemy

$$S_b^{-1}(E) = \frac{\hbar^2}{2m} U_b(E) [\mathcal{E}_b(E) - E I]^{-1} U_b^\dagger(E). \quad (6.1.31)$$

Z równania (6.1.31) wnioskujemy, że element ij macierzy $S_b^{-1}(E)$ ma postać

$$[S_b^{-1}(E)]_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^N \frac{u_{bik}(E) u_{bjk}^*(E)}{\mathcal{E}_{bk}(E) - E}. \quad (6.1.32)$$

^{6B} Nie należy mylić macierzy $U_b(E)$ z macierzą rozpraszania $U(E)$.

Uwzględniając ten rezultat w równaniu (6.1.11) i oznaczając

$$\psi_{\hat{b}k}(E, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N u_{bik}(E)\phi_i(\mathbf{r}), \quad \mathcal{E}_{\hat{b}k}(E) = \mathcal{E}_{bk}(E) \quad (k = 1, 2, \dots, N), \quad (6.1.33)$$

otrzymujemy^{6c}

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^N \frac{\psi_{\hat{b}k}(E, \boldsymbol{\rho})\psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}')}{\mathcal{E}_{\hat{b}k}(E) - E}. \quad (6.1.34)$$

Czytelnik zechce porównać wynik (6.1.34) z równaniem (3.3.39). Wykorzystując wzór (D.9) oraz biorąc pod uwagę fakt, że wyznacznik macierzy diagonalnej jest iloczynem wyrazów położonych na jej diagonalu, możemy przepisać równanie (6.1.34) w postaci

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\det \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{\hat{b}}(E) - E & \boldsymbol{\psi}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}') \\ \boldsymbol{\psi}_{\hat{b}}^T(E, \boldsymbol{\rho}) & 0 \end{pmatrix}}{\prod_{k=1}^N [\mathcal{E}_{\hat{b}k}(E) - E]}, \quad (6.1.35)$$

gdzie $\boldsymbol{\psi}_{\hat{b}}^T(E, \boldsymbol{\rho})$ jest N -składnikową macierzą jednowierszową z elementami $\{\psi_{\hat{b}k}^T(E, \boldsymbol{\rho})\}$, natomiast $\boldsymbol{\psi}_{\hat{b}}^*(E, \boldsymbol{\rho}')$ jest N -składnikową macierzą jednokolumnową z elementami $\{\psi_{\hat{b}k}^*(E, \boldsymbol{\rho}')\}$.

6.1.2 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatora $\hat{B}(E)$ i ich odwrotności

Postępując podobnie jak w podrozdziale 6.1.1, możemy znaleźć oszacowania wariacyjne elementów macierzowych $(\Phi|\hat{B}\Phi')$ oraz jądra całkowego $\mathcal{B}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$. Podstawienie funkcji próbnych o postaci (6.1.1) do funkcjonału (3.4.111) daje

$$F[\mathbf{g}^\dagger, \mathbf{g}'; \bar{\mathbf{c}}^\dagger, \bar{\mathbf{c}}'] = \mathbf{g}^\dagger \bar{\mathbf{c}}' + \bar{\mathbf{c}}^\dagger \mathbf{g}' - \bar{\mathbf{c}}^\dagger \mathbb{T} \bar{\mathbf{c}}', \quad (6.1.36)$$

gdzie symbol \mathbf{g}^\dagger oznacza N -składnikową macierz jednowierszową o wyrazach $\{g_i^* = (\Phi|\nabla_n \phi_i)\}$, \mathbf{g}' jest N -składnikową macierzą jednokolumnową o wyrazach $\{g'_i = (\nabla_n \phi_i|\Phi')\}$, natomiast $\mathbb{T}(E)$ jest kwadratową macierzą hermitowską o wymiarach $N \times N$ z elementami

$$T_{ij}(E) = (\nabla_n \phi_i|\phi_j) - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle. \quad (6.1.37)$$

Wartość stacjonarna funkcjonału (6.1.36) ze względu na wariacje składowych wektorów $\bar{\mathbf{c}}^\dagger$ oraz $\bar{\mathbf{c}}'$ jest elementem macierzowym, pomiędzy funkcjami $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ oraz

^{6c} Rozwinięcie (6.1.34) *nie* jest rozwinięciem spektralnym jądra $\tilde{\mathcal{R}}_{\hat{b}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$!

$\Phi'(\rho)$, operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ będącego wariacyjnym oszacowaniem operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$,

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi') = \text{stat}_{\bar{c}^\dagger, \bar{c}'} \left\{ g^\dagger \bar{c}' + \bar{c}^\dagger g' - \bar{c}^\dagger \mathbb{T} \bar{c}' \right\}, \quad (6.1.38)$$

przy czym wartość stacjonarna jest osiągnięta dla $\bar{c}^\dagger = \tilde{c}^\dagger$, $\bar{c}' = \tilde{c}'$. Warunek stacjonarności

$$\delta F[g^\dagger, g'; \tilde{c}^\dagger, \tilde{c}'] = 0 \quad (6.1.39)$$

proceedzi do następujących optymalnych (dla rozważanego zagadnienia) postaci wektorów zawierających współczynniki rozwinięć (6.1.1)

$$\tilde{c}^\dagger = g^\dagger \mathbb{T}^{-1}, \quad \tilde{c}' = \mathbb{T}^{-1} g'. \quad (6.1.40)$$

Podstawiając wyrażenia (6.1.40) do funkcjonału (6.1.36), otrzymujemy następujące wariacyjne oszacowania dla elementów macierzowych $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi')$

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi') \stackrel{\text{var}}{=} g^\dagger \mathbb{T}^{-1} g' = \sum_{i,j=1}^N (\Phi|\nabla_n \phi_i)[\mathbb{T}^{-1}]_{ij} (\nabla_n \phi_j|\Phi') \quad (6.1.41)$$

oraz dla jądra całkowego $\mathcal{B}(E, \rho, \rho')$

$$\tilde{\mathcal{B}}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_{i,j=1}^N \nabla_n \phi_i(\rho)[\mathbb{T}^{-1}(E)]_{ij} \nabla_n \phi_j^*(\rho'). \quad (6.1.42)$$

Jak należało oczekiwać na podstawie relacji symetrii (3.4.72) spełnianej przez funkcjonał (3.4.111), jądro $\tilde{\mathcal{B}}(E, \rho, \rho')$ dane wzorem (6.1.42) jest hermitowskie.

Element macierzowy $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi')$ oraz jądro całkowe $\tilde{\mathcal{B}}(E, \rho, \rho')$, określone odpowiednio wzorami (6.1.41) i (6.1.42), można przedstawić jako ilorazy dwóch wyznaczników. Wykorzystując równania (D.9), (6.1.41) oraz (6.1.42), otrzymujemy

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi') = - \frac{\det \begin{pmatrix} \mathbb{T} & g' \\ g^\dagger & 0 \end{pmatrix}}{\det \mathbb{T}} \quad (6.1.43)$$

oraz

$$\tilde{\mathcal{B}}(E, \rho, \rho') = - \frac{\det \begin{pmatrix} \mathbb{T}(E) & \nabla_n \phi^*(\rho') \\ \nabla_n \phi^T(\rho) & 0 \end{pmatrix}}{\det \mathbb{T}(E)}, \quad (6.1.44)$$

gdzie $\nabla_n \phi^T(\rho)$ jest N -składnikową macierzą jednowierszową z elementami $\{\nabla_n \phi_i(\rho)\}$, a $\nabla_n \phi^*(\rho')$ jest N -składnikową macierzą jednokolumnową z elementami $\{\nabla_n \phi_i^*(\rho')\}$.

Jeżeli funkcje $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ wykorzystane w rozwinięciach (6.1.1) rozpinają zbiór $\mathcal{D}_V(E)$, równanie (6.1.42) przyjmuje postać

$$\mathcal{B}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_{i,j} \nabla_n \phi_i(\rho)[\mathbb{T}^{-1}(E)]_{ij} \nabla_n \phi_j^*(\rho'). \quad (6.1.45)$$

Oszacowania (6.1.41) oraz (6.1.42) można również otrzymać, stosując funkcje próbne typu (6.1.1) w zasadzie wariacyjnej (3.4.131) dla odwrotności elementów macierzowych $(\Phi|\hat{B}\Phi')$. Sposób postępowania jest przy tym identyczny z przedstawionym w drugiej części podrozdziału 6.1.1.

Jądro $\tilde{B}(E, \rho, \rho')$ można przedstawić w postaci do pewnego stopnia analogicznej do równania (6.1.34). Niech Z oznacza hermitowską macierz kwadratową $N \times N$ z elementami

$$Z_{ij} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_n \phi_i | \phi_j) + \langle \phi_i | \hat{H} \phi_j \rangle \quad (6.1.46)$$

i niech O jest macierzą z elementami zdefiniowanymi równaniem (6.1.22). Wówczas

$$T(E) = -\frac{2m}{\hbar^2}[Z - EO]. \quad (6.1.47)$$

Oznaczając przez \mathcal{E} macierz spektralną (z elementami $\{\mathcal{E}_k \delta_{kl}\}$), a przez V macierz modalną (z elementami $\{v_{ik}\}$) dla macierzowego zagadnienia własnego

$$ZV = OV\mathcal{E}, \quad (6.1.48)$$

przy czym

$$V^\dagger OV = I, \quad (6.1.49)$$

oraz zakładając, że macierze Z i O są nieosobliwe, po przekształceniach podobnych do zamieszczonych w końcu podrozdziału 6.1.1 znajdujemy

$$T^{-1}(E) = -\frac{\hbar^2}{2m}V[\mathcal{E} - E]^{-1}V^\dagger, \quad (6.1.50)$$

czyli element ij macierzy $T^{-1}(E)$ jest równy

$$[T^{-1}(E)]_{ij} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^N \frac{v_{ik} v_{jk}^*}{\mathcal{E}_k - E}. \quad (6.1.51)$$

Wprowadzając oznaczenie

$$\varphi_k(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N v_{ik} \phi_i(\mathbf{r}) \quad (k = 1, 2, \dots, N) \quad (6.1.52)$$

i uwzględniając w równaniu (6.1.42) wynik (6.1.51), otrzymujemy^{6D}

$$\tilde{B}(E, \rho, \rho') = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^N \frac{\nabla_n \varphi_k(\rho) \nabla_n \varphi_k^*(\rho')}{\mathcal{E}_k - E} \quad (6.1.53)$$

^{6D} Rozwinięcie (6.1.53) *nie* jest rozwinięciem spektralnym jądra $\tilde{B}(E, \rho, \rho')$!

lub równoważnie

$$\tilde{\mathcal{B}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\det \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mathcal{E}} - E\mathbf{1} & \nabla_{\mathbf{n}} \boldsymbol{\varphi}^*(\boldsymbol{\rho}') \\ \nabla_{\mathbf{n}} \boldsymbol{\varphi}^T(\boldsymbol{\rho}) & 0 \end{pmatrix}}{\prod_{k=1}^N [\mathcal{E}_k - E]}, \quad (6.1.54)$$

gdzie $\nabla_{\mathbf{n}} \boldsymbol{\varphi}^T(\boldsymbol{\rho})$ jest N -składnikową macierzą jednowierszową z elementami $\{\nabla_{\mathbf{n}} \varphi_k(\boldsymbol{\rho})\}$, a $\nabla_{\mathbf{n}} \boldsymbol{\varphi}^*(\boldsymbol{\rho}')$ jest N -składnikową macierzą jednokolumnową z elementami $\{\nabla_{\mathbf{n}} \varphi_k^*(\boldsymbol{\rho}')\}$.

6.1.3 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności

Postępując zgodnie ze schematem przedstawionym w podrozdziale 6.1.1 i stosując w którejkolwiek z zasad wariacyjnych (5.5.46) lub (5.5.66) funkcje próbne o postaci

$$\overline{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \bar{c}_i^{(\pm)} \phi_i(\mathbf{r}), \quad \overline{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \bar{c}'^{(\pm)} \phi_i(\mathbf{r}), \quad (6.1.55)$$

z czteroskładnikowymi spinorowymi funkcjami bazowymi $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$, dochodzi się do następujących oszacowań elementów macierzowych i jąder całkowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$

$$\langle \Phi | \hat{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)} | \Phi' \rangle \stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{i,j=1}^N \langle \Phi | \beta^{(\pm)} \phi_i \rangle [(\mathbf{S}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)})^{-1}]_{ij} \langle \beta^{(\pm)} \phi_j | \Phi' \rangle, \quad (6.1.56)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{i,j=1}^N \beta^{(\pm)} \phi_i(\boldsymbol{\rho}) [(\mathbf{S}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E))^{-1}]_{ij} \phi_j^\dagger(\boldsymbol{\rho}') \beta^{(\pm)}, \quad (6.1.57)$$

gdzie $\mathbf{S}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)}(E)$ są kwadratowymi macierzami hermitowskimi o wymiarach $N \times N$ z elementami

$$S_{\mathfrak{b}ij}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)} \langle \phi_i | [\mathfrak{i}\alpha_{\mathfrak{n}}^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)} \hat{\mathfrak{b}}^{(\pm)}] \phi_j \rangle - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle. \quad (6.1.58)$$

Optymalne wartości współczynników $\{\bar{c}_i^{(\pm)}\}$ i $\{\bar{c}'^{(\pm)}\}$ w rozwinięciach (6.1.55) są elementami macierzy jednokolumnowych $\tilde{\mathfrak{c}}^{(\pm)}$ oraz $\tilde{\mathfrak{c}}'^{(\pm)}$ danych przez

$$\tilde{\mathfrak{c}}^{(\pm)} = (\mathbf{S}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)})^{-1} \mathbf{f}^{(\pm)}, \quad \tilde{\mathfrak{c}}'^{(\pm)} = (\mathbf{S}_{\mathfrak{b}}^{(\pm)})^{-1} \mathbf{f}'^{(\pm)}, \quad (6.1.59)$$

gdzie $\mathbf{f}^{(\pm)}$ oraz $\mathbf{f}'^{(\pm)}$ są macierzami jednokolumnowymi z elementami odpowiednio $\{f_i^{(\pm)} = \langle \beta^{(\pm)} \phi_i | \Phi \rangle\}$ oraz $\{f_i'^{(\pm)} = \langle \beta^{(\pm)} \phi_i | \Phi' \rangle\}$.

Oznaczmy przez $\mathbf{Y}_b^{(\pm)}(E)$ i \mathbf{O} hermitowskie macierze kwadratowe $N \times N$ z elementami

$$Y_{bij}^{(\pm)}(E) = c\hbar(\phi_i|[i\alpha_n^{(\pm)} - \gamma^{(\pm)}\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)}]\phi_j) + \langle\phi_i|\hat{H}\phi_j\rangle, \quad (6.1.60)$$

$$O_{ij} = \langle\phi_i|\phi_j\rangle, \quad (6.1.61)$$

przez $\mathcal{E}_b^{(\pm)}(E)$ macierze spektralne (z elementami $\{\mathcal{E}_{bk}^{(\pm)}(E)\delta_{kl}\}$), a przez $\mathbf{U}_b^{(\pm)}(E)$ macierze modalne (z elementami $\{u_{bik}^{(\pm)}(E)\}$) dla zagadnień własnych

$$\mathbf{Y}_b^{(\pm)}(E)\mathbf{U}_b^{(\pm)}(E) = \mathbf{O}\mathbf{U}_b^{(\pm)}(E)\mathcal{E}_b^{(\pm)}(E), \quad (6.1.62)$$

przy czym

$$\mathbf{U}_b^{(\pm)\dagger}(E)\mathbf{O}\mathbf{U}_b^{(\pm)}(E) = \mathbf{I}, \quad (6.1.63)$$

gdzie \mathbf{I} jest macierzą jednostkową. Wówczas rozważania analogiczne do przedstawionych w zakończeniu podrozdziału 6.1.1 prowadzą do rozwinięć^{6E}

$$\tilde{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = c\hbar\gamma^{(\pm)} \sum_{k=1}^N \frac{\beta^{(\pm)}\psi_{bk}^{(\pm)}(E, \rho)\psi_{bk}^{(\pm)\dagger}(E, \rho')\beta^{(\pm)}}{\mathcal{E}_{bk}^{(\pm)}(E) - E}, \quad (6.1.64)$$

gdzie

$$\psi_{bk}^{(\pm)}(E, \rho) = \sum_{i=1}^N u_{bik}^{(\pm)}(E)\phi_i(\rho), \quad \mathcal{E}_{bk}^{(\pm)}(E) = \mathcal{E}_{bk}^{(\pm)}(E) \quad (k = 1, 2, \dots, N). \quad (6.1.65)$$

6.1.4 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i ich odwrotności

Funkcje próbne typu (6.1.55) można również zastosować w zasadach wariacyjnych (5.5.86) lub (5.5.106). Postępując podobnie jak w poprzednich podrozdziałach, otrzymujemy w rezultacie następujące oszacowania dla elementów macierzowych i jąder całkowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}\Phi') \stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(\mp)})^2 \sum_{i,j=1}^N (\Phi|i\alpha_n^{(\pm)}\phi_i)[(\mathbf{T}^{(\pm)})^{-1}]_{ij}(i\alpha_n^{(\pm)}\phi_j|\Phi'), \quad (6.1.66)$$

$$\tilde{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(\mp)})^2 \sum_{i,j=1}^N \alpha_n^{(\pm)}(\rho)\phi_i(\rho)[[\mathbf{T}^{(\pm)}(E)]^{-1}]_{ij}\phi_j^\dagger(\rho')\alpha_n^{(\mp)}(\rho'), \quad (6.1.67)$$

gdzie $\mathbf{T}^{(\pm)}(E)$ są kwadratowymi macierzami hermitowskimi o wymiarach $N \times N$ z elementami

$$T_{ij}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)}(i\alpha_n^{(\pm)}\phi_i|\phi_j) + \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar}\langle\phi_i|[\hat{H} - E]\phi_j\rangle = (\gamma^{(\mp)})^2 S_{ij}^{(\mp)}(E), \quad (6.1.68)$$

^{6E} Rozwinięcia (6.1.64) *nie* są rozwinięciami spektralnymi jąder $\tilde{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$!

przy czym $S_{ij}^{(+)}(E)$ (odpowiednio $S_{ij}^{(-)}(E)$) jest elementem macierzy $\mathbf{S}^{(+)}(E)$ (odpowiednio $\mathbf{S}^{(-)}(E)$) zdefiniowanej równaniem (6.1.58) w szczególnym przypadku $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) = \hat{\delta}$ (odpowiednio $\hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) = \hat{\delta}$). Znajomość macierzy $\mathbf{T}^{(\pm)}(E)$ pozwala na znalezienie optymalnych, dla rozważanego przypadku, wartości współczynników rozwinięć (6.1.55); wartości te są elementami składowymi macierzy jednokolumnowych

$$\tilde{\mathbf{c}}^{(\pm)} = (\mathbf{T}^{(\pm)})^{-1} \mathbf{g}^{(\pm)}, \quad \tilde{\mathbf{c}}'^{(\pm)} = (\mathbf{T}^{(\pm)})^{-1} \mathbf{g}'^{(\pm)}, \quad (6.1.69)$$

przy czym $\mathbf{g}^{(\pm)}$ i $\mathbf{g}'^{(\pm)}$ są macierzami jednokolumnowymi z elementami równymi odpowiednio $\{g_i^{(\pm)} = -\gamma^{(\mp)}(i\alpha_n^{(\pm)}\phi_i|\Phi)\}$ i $\{g_i'^{(\pm)} = -\gamma^{(\mp)}(i\alpha_n^{(\pm)}\phi_i|\Phi')\}$.

Niech $\mathbf{Z}^{(\pm)}$ będą hermitowskimi macierzami kwadratowymi $N \times N$ z wyrazami

$$Z_{ij}^{(\pm)} = -c\hbar(i\alpha_n^{(\pm)}\phi_i|\phi_j) + \langle\phi_i|\hat{H}\phi_j\rangle \quad (6.1.70)$$

i niech $\mathcal{E}^{(\pm)}$ oraz $\mathbf{V}^{(\pm)}$ oznaczają odpowiednio macierze spektralne (z wyrazami $\{\mathcal{E}_k^{(\pm)}\delta_{kl}\}$) oraz macierze modalne (z wyrazami $\{v_{ik}^{(\pm)}\}$) zagadnień własnych

$$\mathbf{Z}^{(\pm)}\mathbf{V}^{(\pm)} = \mathbf{0}\mathbf{V}^{(\pm)}\mathcal{E}^{(\pm)}, \quad (6.1.71)$$

przy czym

$$\mathbf{V}^{(\pm)\dagger}\mathbf{0}\mathbf{V}^{(\pm)} = \mathbf{I}, \quad (6.1.72)$$

gdzie $\mathbf{0}$ jest macierzą zdefiniowaną równaniem (6.1.61). Postępując podobnie, jak w podrozdziałach 6.1.1 i 6.1.2, można pokazać, że^{6f}

$$\tilde{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = c\hbar\gamma^{(\mp)} \sum_{k=1}^N \frac{\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\varphi_k^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})\varphi_k^{(\pm)\dagger}(\boldsymbol{\rho}')\alpha_n^{(\mp)}(\boldsymbol{\rho}')}{\mathcal{E}_k^{(\pm)} - E}, \quad (6.1.73)$$

gdzie

$$\varphi_k^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{i=1}^N v_{ik}^{(\pm)}\phi_i(\boldsymbol{\rho}) \quad (k = 1, 2, \dots, N). \quad (6.1.74)$$

6.2 Zastosowanie funkcji własnych operatorów $\hat{\mathcal{R}}(E)$, $\hat{\mathcal{B}}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ jako baz Rayleigha–Ritza w zasadach wariacyjnych dla elementów macierzowych tych operatorów

Jako pierwszy przykład wykorzystania wyników otrzymanych w podrozdziale 6.1, pokażemy poniżej, że stosując w zasadach wariacyjnych (3.4.73), (3.4.112), (5.5.46), (5.5.86) liniowe funkcje próbne typu (6.1.1) lub (6.1.55) z funkcjami bazowymi $\{\phi_i(\mathbf{r}) = \Psi_i(E, \mathbf{r})\} \subset \mathcal{D}_V(E)$ takimi, że ich części powierzchniowe $\{\phi_i(\boldsymbol{\rho}) = \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})\} \subset \mathcal{D}_S(E)$ są funkcjami własnymi operatorów $\hat{\mathcal{R}}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}(E)$ lub $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$, otrzymuje się znalezione przez nas w podrozdziałach 3.1 i 5.1 reprezentacje spektralne jąder całkowych tych operatorów.

^{6f} Rozwinięcia (6.1.73) *nie* są rozwinięciami spektralnymi jąder $\tilde{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$!

Dla prostoty, w dalszym ciągu podrozdziału 6.2 będziemy nazywali funkcje objętościowe $\{\Psi_i(E, \mathbf{r})\}$ funkcjami własnymi operatorów $\hat{\mathcal{R}}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}(E)$ lub $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$, pamiętając przy tym jednak, że, ściśle rzecz biorąc, funkcjami własnymi wymienionych operatorów są jedynie *części powierzchniowe* tych funkcji. Ta wygodna w użyciu niekonsekwencja terminologiczna nie powinna prowadzić do jakichkolwiek nieporozumień.

6.2.1 Zasada wariacyjna dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$

Przyjmijmy, że funkcje próbne $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ mają postać kombinacji liniowych (wspólnych) funkcji własnych $\{\Psi_i(E, \mathbf{r})\}$ operatorów $\hat{\mathcal{R}}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}(E)$,

$$\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{c}_i \Psi_i(E, \mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{c}'_i \Psi_i(E, \mathbf{r}), \quad (6.2.1)$$

przy czym oba sumowania przebiegają po *pełnym* zbiorze funkcji własnych. Funkcje $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'(\mathbf{r})$ o postaci (6.2.1) są oczywiście rozwiązaniami równania Schrödingera (3.1.4) dla dowolnych wartości współczynników $\{\bar{c}_i\}$ i $\{\bar{c}'_i\}$. Oznacza to, iż

$$\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \Psi(E, \mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'(\mathbf{r}) = \Psi'(E, \mathbf{r}), \quad (6.2.2)$$

gdzie $\Psi(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'(E, \mathbf{r})$ są pewnymi funkcjami należącymi do $\mathcal{D}_{\mathcal{V}}(E)$.

Podstawiając rozwinięcia (6.2.1) do funkcjonału (3.4.71) i postępując tak samo, jak w podrozdziale 6.1, znajdujemy, że w szczególnym przypadku bazy wariacyjnej $\{\Psi_i(E, \mathbf{r})\}$ macierz $S(E) \equiv S_0(E)$ jest diagonalna, a jej elementy, zdefiniowane w ogólności równaniem (6.1.4) z $\hat{\mathbf{b}}(E) = \hat{\delta}$, w tym przypadku są równe

$$S_{ij}(E) = (\Psi_i | \nabla_n \Psi_j) = b_i(E) \delta_{ij}, \quad (6.2.3)$$

gdyż funkcje bazowe $\{\Psi_i(E, \mathbf{r})\}$ spełniają równanie Schrödingera (3.1.4), równanie własne (3.1.15) oraz relację ortonormalności (3.1.17). Z równań (6.2.3) i (6.1.9) wynika, że optymalne wartości współczynników w rozwinięciach (6.2.1) dane są przez

$$\tilde{c}_i = b_i^{-1}(\Psi_i | \Phi), \quad \tilde{c}'_i = b_i^{-1}(\Psi_i | \Phi'). \quad (6.2.4)$$

Uwzględniając wynik (6.2.4) w równaniu (6.2.1) i obliczając pochodne normalne obu rozwinięć w punkcie $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}$ na powierzchni \mathcal{S} , po skorzystaniu z równania własnego (3.1.15), dostajemy

$$\nabla_n \bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}) = \sum_i \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) (\Psi_i | \Phi), \quad \nabla_n \bar{\Psi}'(\boldsymbol{\rho}) = \sum_i \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) (\Psi_i | \Phi'). \quad (6.2.5)$$

Z relacji zupełności (3.1.18) wynika, że oba szeregi w równaniu (6.2.5) można zsumować, otrzymując

$$\nabla_n \bar{\Psi}(\boldsymbol{\rho}) = \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad \nabla_n \bar{\Psi}'(\boldsymbol{\rho}) = \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (6.2.6)$$

W podrozdziale 3.4.3 pokazaliśmy, że w przypadku $\hat{\mathbf{b}}(E) = \hat{\delta}$ wartością stacjonarną funkcjonału (3.4.71), osiąganą dla funkcji próbnych spełniających warunki (6.2.2)

i (6.2.6), jest wartością elementu macierzowego $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}\Phi')$; dlatego z równań (3.4.73), (6.2.1) i (6.2.4) otrzymujemy

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}\Phi') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i (\Phi|\Psi_i)b_i^{-1}(\Psi_i|\Phi'), \quad (6.2.7)$$

a w konsekwencji, ze względu na dowolność funkcji $\Phi(\rho)$ i $\Phi'(\rho)$,

$$\mathcal{R}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i \Psi_i(E, \rho)b_i^{-1}(E)\Psi_i^*(E, \rho'). \quad (6.2.8)$$

Równanie (6.2.8) jest znalezionym przez nas wcześniej (porównaj (3.1.32)) rozwinięciem spektralnym jądra $\mathcal{R}(E, \rho, \rho')$.

6.2.2 Zasada wariacyjna dla elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$

Wykorzystując w funkcjonale (3.4.111) funkcje próbne postaci (6.2.1) i postępując zgodnie z procedurą opisaną w podrozdziale 6.1.2, otrzymujemy, że w bazie $\{\Psi_i(E, \mathbf{r})\}$ macierz $\mathbb{T}(E)$, zdefiniowana równaniem (6.1.37), jest diagonalna, przy czym jej elementy macierzowe mają postać

$$T_{ij}(E) = (\nabla_n \Psi_i|\Psi_j) = b_i(E) \delta_{ij}, \quad (6.2.9)$$

zaś optymalne wartości współczynników rozwinięcia (6.2.1) są równe

$$\tilde{c}_i = (\Psi_i|\Phi), \quad \tilde{c}'_i = (\Psi_i|\Phi'). \quad (6.2.10)$$

Z równań (6.2.1) i (6.2.10) wynika, że na powierzchni \mathcal{S} zachodzi

$$\bar{\Psi}(\rho) = \sum_i \Psi_i(E, \rho)(\Psi_i|\Phi), \quad \bar{\Psi}'(\rho) = \sum_i \Psi_i(E, \rho)(\Psi_i|\Phi'), \quad (6.2.11)$$

skąd, po zsumowaniu obu szeregów na mocy relacji zupełności (3.1.18), otrzymujemy

$$\bar{\Psi}(\rho) = \Phi(\rho), \quad \bar{\Psi}'(\rho) = \Phi'(\rho). \quad (6.2.12)$$

Z dyskusji przeprowadzonej w podrozdziale 3.4.4 wiemy jednak, że funkcjonal (3.4.111) jest stacjonarny dla funkcji wariacyjnych spełniających równania (6.2.2) i (6.2.12), zaś jego wartość stacjonarna jest równa $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi')$. Podstawiając rozwinięcia (6.2.1) ze współczynnikami (6.2.10) do równania (3.4.112), otrzymujemy więc

$$(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i (\Phi|\Psi_i)b_i(\Psi_i|\Phi') \quad (6.2.13)$$

i dalej

$$\mathcal{B}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i \Psi_i(E, \rho)b_i(E)\Psi_i^*(E, \rho'), \quad (6.2.14)$$

co zgadza się z równaniem (3.1.20).

6.2.3 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$

Załóżmy, że wariacyjne funkcje próbne $\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ i $\bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r})$ są kombinacjami liniowymi wspólnych funkcji własnych operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$,

$$\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{c}_i^{(\pm)} \Psi_i(E, \mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{c}'_i^{(\pm)} \Psi_i(E, \mathbf{r}), \quad (6.2.15)$$

przy czym oba sumowania przebiegają po pełnym zbiorze funkcji własnych. Ponieważ wszystkie funkcje bazowe $\{\Psi_i(E, \mathbf{r})\}$ spełniają to samo równanie Diraca (5.1.17), również funkcje (6.2.15) będą rozwiązaniami tego równania dla dowolnych wartości współczynników $\{\bar{c}_i^{(\pm)}\}$ i $\{\bar{c}'_i^{(\pm)}\}$, to znaczy

$$\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r}), \quad (6.2.16)$$

gdzie $\Psi^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ i $\Psi'^{(\pm)}(E, \mathbf{r})$ są pewnymi funkcjami należącymi do $\mathcal{D}_V(E)$.

Podstawiając rozwinięcia (6.2.15) do funkcjonałów (5.5.44), ze wzorów (6.1.58), (5.1.17), (6.1.59) znajdujemy następujące postacie elementów macierzy $S^{(\pm)}(E) \equiv S_0^{(\pm)}(E)$

$$S_{ij}^{(+)}(E) = -\gamma^{(-)} (\Psi_i | i\alpha_n^{(+)} \Psi_j) = b_i(E) \delta_{ij}, \quad (6.2.17)$$

$$S_{ij}^{(-)}(E) = -\gamma^{(+)} (\Psi_i | i\alpha_n^{(-)} \Psi_j) = (\gamma^{(+)})^2 b_i(E) \delta_{ij} \quad (6.2.18)$$

oraz optymalnych wartości współczynników $\bar{c}_i^{(\pm)}$ i $\bar{c}'_i^{(\pm)}$

$$\bar{c}_i^{(+)} = b_i^{-1} (\beta^{(+)} \Psi_i | \Phi), \quad \bar{c}'_i^{(+)} = b_i^{-1} (\beta^{(+)} \Psi_i | \Phi'), \quad (6.2.19)$$

$$\bar{c}_i^{(-)} = (\gamma^{(-)})^2 b_i^{-1} (\beta^{(-)} \Psi_i | \Phi), \quad \bar{c}'_i^{(-)} = (\gamma^{(-)})^2 b_i^{-1} (\beta^{(-)} \Psi_i | \Phi'). \quad (6.2.20)$$

Uwzględniając otrzymane wartości współczynników w rozwinięciach (6.2.15), przyjmując w nich $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}$, działając na obie strony macierzami $i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ i korzystając z równań własnych (5.1.31) oraz (5.1.39), dostajemy

$$i\alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) \bar{\Psi}^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(+)} \sum_i \beta^{(+)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) (\Psi_i | \beta^{(+)} \Phi), \quad (6.2.21)$$

$$i\alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) \bar{\Psi}'^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(+)} \sum_i \beta^{(+)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) (\Psi_i | \beta^{(+)} \Phi'), \quad (6.2.22)$$

$$i\alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) \bar{\Psi}^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) = (\gamma^{(-)})^3 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i^{-2}(E) (\Psi_i | \beta^{(-)} \Phi), \quad (6.2.23)$$

$$i\alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) \bar{\Psi}'^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) = (\gamma^{(-)})^3 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i^{-2}(E) (\Psi_i | \beta^{(-)} \Phi'). \quad (6.2.24)$$

Szeregi w równaniach (6.2.21)–(6.2.24) można zsumować, korzystając z relacji zupełności (5.1.36) i (5.1.44). W rezultacie otrzymujemy

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \bar{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad i\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) \bar{\Psi}'^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \gamma^{(\pm)} \beta^{(\pm)} \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (6.2.25)$$

Z podrozdziału 5.5.2 wiemy, że w przypadkach $\hat{\mathbf{b}}^{(+)}(E) = \hat{\mathbf{o}}$ albo $\hat{\mathbf{b}}^{(-)}(E) = \hat{\mathbf{o}}$ wartościami stacjonarnymi funkcyjałów (5.5.46), osiąganymi dla funkcji próbnych spełniających warunki (6.2.16) i (6.2.25), są wartości elementów macierzowych odpowiednio $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}^{(+)}\Phi')$ albo $(\Phi|\hat{\mathcal{R}}^{(-)}\Phi')$. Podstawiając rozwinięcia (6.2.15) ze współczynnikami (6.2.19) i (6.2.20) do równania (5.5.46) z $\hat{\mathbf{b}}^{(\pm)} = \hat{\mathbf{o}}$, po skorzystaniu z równania Diraca (5.1.17) oraz równań własnych (5.1.31) i (5.1.39), otrzymujemy

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}^{(+)}\Phi') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i (\Phi|\beta^{(+)}\Psi_i)b_i^{-1}(\beta^{(+)}\Psi_i|\Phi'), \quad (6.2.26)$$

$$(\Phi|\hat{\mathcal{R}}^{(-)}\Phi') \stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_i (\Phi|\beta^{(-)}\Psi_i)b_i^{-1}(\beta^{(-)}\Psi_i|\Phi'), \quad (6.2.27)$$

a w konsekwencji

$$\mathcal{R}^{(+)}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i \beta^{(+)}\Psi_i(E, \rho)b_i^{-1}(E)\Psi_i^\dagger(E, \rho')\beta^{(+)}, \quad (6.2.28)$$

$$\mathcal{R}^{(-)}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)}\Psi_i(E, \rho)b_i^{-1}(E)\Psi_i^\dagger(E, \rho')\beta^{(-)}. \quad (6.2.29)$$

Równania (6.2.28) i (6.2.29) są identyczne z otrzymanymi przez nas wcześniej rozwinięciami spektralnymi (5.1.82) i (5.1.83).

6.2.4 Zasady wariacyjne dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$

Podstawiając funkcje próbne postaci (6.2.15) do funkcyjałów (5.5.85), ze wzorów (6.1.68) i (6.1.69) otrzymujemy wyrażenia dla elementów macierzy $\mathbb{T}^{(\pm)}(E)$

$$T_{ij}^{(+)}(E) = -\gamma^{(-)}(i\alpha_n^{(+)}\Psi_i|\Psi_j) = b_i(E)\delta_{ij}, \quad (6.2.30)$$

$$T_{ij}^{(-)}(E) = -\gamma^{(+)}(i\alpha_n^{(-)}\Psi_i|\Psi_j) = (\gamma^{(+)}\gamma^{(-)})^2 b_i(E)\delta_{ij} \quad (6.2.31)$$

oraz dla optymalnych wartości współczynników w rozwinięciach (6.2.15)

$$\tilde{c}_i^{(+)} = (\beta^{(+)}\Psi_i|\Phi), \quad \tilde{c}'^{(+)} = (\beta^{(+)}\Psi_i|\Phi'), \quad (6.2.32)$$

$$\tilde{c}_i^{(-)} = (\gamma^{(-)})^2 b_i^{-2}(\beta^{(-)}\Psi_i|\Phi), \quad \tilde{c}'^{(-)} = (\gamma^{(-)})^2 b_i^{-2}(\beta^{(-)}\Psi_i|\Phi'). \quad (6.2.33)$$

Uwzględniając równania (6.2.32) i (6.2.33) w rozwinięciach (6.2.15), przyjmując w nich $\mathbf{r} = \rho$ i działając następnie na obie strony otrzymanych równań macierzami $\beta^{(\pm)}$, dostajemy

$$\beta^{(+)}\bar{\Psi}^{(+)}(\rho) = \sum_i \beta^{(+)}\Psi_i(E, \rho)(\Psi_i|\beta^{(+)}\Phi), \quad (6.2.34)$$

$$\beta^{(+)}\bar{\Psi}'^{(+)}(\rho) = \sum_i \beta^{(+)}\Psi_i(E, \rho)(\Psi_i|\beta^{(+)}\Phi'), \quad (6.2.35)$$

$$\beta^{(-)}\bar{\Psi}^{(-)}(\rho) = (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)}\Psi_i(E, \rho)b_i^{-2}(E)(\Psi_i|\beta^{(-)}\Phi), \quad (6.2.36)$$

$$\beta^{(-)} \overline{\Psi}^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) = (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i^{-2}(E) (\Psi_i | \beta^{(-)} \Phi'). \quad (6.2.37)$$

Ze względu na relacje zupełności (5.1.36) oraz (5.1.44), szeregi w równaniach (6.2.34)–(6.2.37) można zsumować, otrzymując

$$\beta^{(\pm)} \overline{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad \beta^{(\pm)} \overline{\Psi}'^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}) = \beta^{(\pm)} \Phi'(\boldsymbol{\rho}). \quad (6.2.38)$$

Z równań (6.2.16) i (6.2.38) wynika, że funkcje $\overline{\Psi}^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$ i $\overline{\Psi}'^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$ są rozwiązaniami równania (5.1.17), spełniającymi na powierzchni \mathcal{S} warunki brzegowe (5.5.67), czyli tymi funkcjami, dla których funkcjonały (5.5.85) są stacjonarne i dla których przyjmują wartości $(\Phi | \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi')$. Podstawiając do równania (5.5.86) rozwinięcia (6.2.15) ze współczynnikami (6.2.32) i (6.2.33), otrzymujemy

$$(\Phi | \hat{\mathcal{B}}^{(+)} \Phi') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i (\Phi | \beta^{(+)} \Psi_i) b_i (\beta^{(+)} \Psi_i | \Phi'), \quad (6.2.39)$$

$$(\Phi | \hat{\mathcal{B}}^{(-)} \Phi') \stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_i (\Phi | \beta^{(-)} \Psi_i) b_i^{-3} (\beta^{(-)} \Psi_i | \Phi'), \quad (6.2.40)$$

a w konsekwencji, ze względu na założoną dowolność funkcji spinorowych $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ i $\Phi'(\boldsymbol{\rho})$,

$$\mathcal{B}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_i \beta^{(+)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i(E) \Psi_i^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(+)}, \quad (6.2.41)$$

$$\mathcal{B}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') \stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_i \beta^{(-)} \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) b_i^{-3}(E) \Psi_i^\dagger(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(-)}, \quad (6.2.42)$$

co zgadza się z równaniami (5.1.38) oraz (5.1.46).

6.3 Zasady wariacyjne dla wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}(E)$, $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$

6.3.1 Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$

Funkcje próbne typu Rayleigha–Ritza można również wykorzystać do znajdowania przybliżonych wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ w oparciu o zasadę wariacyjną (3.4.25). Podstawienie funkcji o postaci

$$\overline{\Psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^N \bar{a}_i \phi_i(\boldsymbol{r}) \quad (6.3.1)$$

do funkcjonału (3.4.22) prowadzi do równania

$$F[\bar{\boldsymbol{a}}^\dagger, \bar{\boldsymbol{a}}] = \frac{\bar{\boldsymbol{a}}^\dagger \mathbf{S} \bar{\boldsymbol{a}}}{\bar{\boldsymbol{a}}^\dagger \mathbf{M} \bar{\boldsymbol{a}}}, \quad (6.3.2)$$

w którym $\bar{\boldsymbol{a}}$ jest N -składnikową macierzą jednokolumnową o wyrazach $\{\bar{a}_i\}$, $\bar{\boldsymbol{a}}^\dagger$ jest N -składnikową macierzą jednowierszową o wyrazach $\{\bar{a}_i^*\}$, macierz $\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}(E)$

jest hermitowską macierzą kwadratową o wymiarach $N \times N$ z elementami zdefiniowanymi równaniem

$$S_{ij}(E) = (\phi_i | \nabla_n \phi_j) + \frac{2m}{\hbar^2} \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle, \quad (6.3.3)$$

zaś M jest hermitowską macierzą kwadratową o wymiarach $N \times N$ z elementami

$$M_{ij} = (\phi_i | \phi_j). \quad (6.3.4)$$

Wartości stacjonarne funkcjonału (6.3.2) ze względu na wariacje składowych wektorów \bar{a} i \bar{a}^\dagger ,

$$\tilde{b}(E) = \text{stat}_{\bar{a}, \bar{a}^\dagger} \frac{\bar{a}^\dagger S(E) \bar{a}}{\bar{a}^\dagger M \bar{a}}, \quad (6.3.5)$$

są przybliżeniami wartości własnych operatora $\hat{B}(E)$. W dalszym ciągu te wektory \bar{a} i \bar{a}^\dagger , dla których funkcjonał (6.3.2) przyjmuje wartości stacjonarne, będziemy oznaczali przez \tilde{a} i \tilde{a}^\dagger . Z założenia mamy więc

$$\delta F[\tilde{a}^\dagger, \tilde{a}] = 0. \quad (6.3.6)$$

Pierwsza wariacja funkcjonału (6.3.2) jest równa

$$\delta F[\tilde{a}^\dagger, \tilde{a}] = \delta a^\dagger \frac{(\tilde{a}^\dagger M \tilde{a}) S \tilde{a} - (\tilde{a}^\dagger S \tilde{a}) M \tilde{a}}{(\tilde{a}^\dagger M \tilde{a})^2} + \frac{(\tilde{a}^\dagger M \tilde{a}) \tilde{a}^\dagger S - (\tilde{a}^\dagger S \tilde{a}) \tilde{a}^\dagger M}{(\tilde{a}^\dagger M \tilde{a})^2} \delta a. \quad (6.3.7)$$

Warunek (6.3.6) i równanie (6.3.7) prowadzą do równań macierzowych

$$S \tilde{a} = \frac{\tilde{a}^\dagger S \tilde{a}}{\tilde{a}^\dagger M \tilde{a}} M \tilde{a}, \quad \tilde{a}^\dagger S = \frac{\tilde{a}^\dagger S \tilde{a}}{\tilde{a}^\dagger M \tilde{a}} \tilde{a}^\dagger M. \quad (6.3.8)$$

Oznaczając w nich

$$\tilde{b} = \frac{\tilde{a}^\dagger S \tilde{a}}{\tilde{a}^\dagger M \tilde{a}}, \quad (6.3.9)$$

stwierdzamy, że \tilde{b} jest wartością własną, zaś \tilde{a} i \tilde{a}^\dagger są odpowiadającymi jej prawym i lewym wektorem własnym uogólnionych macierzowych zagadnień własnych

$$S \tilde{a} = \tilde{b} M \tilde{a}, \quad \tilde{a}^\dagger S = \tilde{b} \tilde{a}^\dagger M. \quad (6.3.10)$$

Jeżeli macierz S jest nieosobliwa, liczba rozwiązań zagadnień własnych (6.3.10) jest równa rzędowi macierzy M .

Ponieważ macierz S zależy od energii E , od energii zależec będą oczywiście zarówno wektory własne \tilde{a} (i ich sprzężenia hermitowskie \tilde{a}^\dagger), jak i wartości własne \tilde{b} , to znaczy $\tilde{a} = \tilde{a}(E)$, $\tilde{a}^\dagger = \tilde{a}^\dagger(E)$, $\tilde{b} = \tilde{b}(E)$.

Zagadnienia własne (6.3.10) wymagają szczególnego traktowania, gdyż rząd macierzy M (oznaczany poniżej przez "rank M ") będzie na ogół mniejszy niż jej

wymiar, równy ilości funkcji bazowych $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ użytych w rozwinięciu (6.3.1).^{6c} Jest to związane z tym, że wymiar przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$ jest mniejszy od wymiaru przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{V})$.^{6h} Dlatego na ogół układ funkcji bazowych $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ będzie liniowo zależny *na powierzchni* \mathcal{S} i wyznacznik macierzy \mathbf{M} (wyznacznik Grama układu N funkcji powierzchniowych $\{\phi_i(\boldsymbol{\rho})\}$) będzie równy zero. Czytelnik zechce zauważyć, że w istocie *powinno* tak być, jeżeli nasze przybliżenie (6.3.1) funkcji $\Psi_k(E, \mathbf{r})$ ma być jednakowo dobre na powierzchni \mathcal{S} i we wnętrzu obszaru \mathcal{V} .

Zauważmy, że z hermitowskości macierzy $\mathbf{S}(E)$ oraz \mathbf{M} wynika, że wektory własne $\tilde{a}_k(E)$ oraz $\tilde{a}_l(E)$ (z elementami odpowiednio $\{\tilde{a}_{ik}(E)\}$ oraz $\{\tilde{a}_{il}(E)\}$), odpowiadające różnym wartościom własnym $\tilde{b}_k(E)$ i $\tilde{b}_l(E)$, są ortogonalne w sensie

$$\tilde{a}_k^\dagger(E) \mathbf{M} \tilde{a}_l(E) = 0 \quad (\tilde{b}_k(E) \neq \tilde{b}_l(E)). \quad (6.3.11)$$

W dalszym ciągu będziemy zakładali, że również wektory własne odpowiadające zdegenerowanym wartościom własnym (jeżeli takie występują) zostały zortogonalizowane i że wszystkie wektory własne zostały unormowane tak, iż dla dowolnych dwóch z nich zachodzi

$$\tilde{a}_k^\dagger(E) \mathbf{M} \tilde{a}_l(E) = \delta_{kl}. \quad (6.3.12)$$

Jeżeli oznaczymy przez $\{\tilde{\Psi}_k(E, \mathbf{r})\}$ funkcje o postaci (6.3.1) ze współczynnikami rozwinięcia będącymi elementami wektorów własnych $\{\tilde{a}_k(E)\}$,

$$\tilde{\Psi}_k(E, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_{ik}(E) \phi_i(\mathbf{r}), \quad k = 1, 2, \dots, \text{rank } \mathbf{M}, \quad (6.3.13)$$

wówczas macierzowa relacja ortonormalności (6.3.12) pociąga za sobą następującą relację ortonormalności dla funkcji powierzchniowych $\{\tilde{\Psi}_k(E, \boldsymbol{\rho})\}$, będących przybliżonymi funkcjami własnymi operatora $\hat{B}(E)$

$$(\tilde{\Psi}_k | \tilde{\Psi}_l) = \delta_{kl} \quad (6.3.14)$$

(porównaj (3.1.17)). W dalszym ciągu podrozdziału 6.3.1 będziemy przyjmowali, że wszystkie wektory własne $\{\tilde{a}_k(E)\}$ oraz wszystkie przybliżone funkcje własne $\{\tilde{\Psi}_k(E, \boldsymbol{\rho})\}$ zostały zortonormalizowane zgodnie z równaniami odpowiednio (6.3.12) oraz (6.3.14).

^{6c} Algorytmy numerycznego rozwiązywania macierzowych zagadnień własnych postaci $\mathbf{A}x = \lambda \mathbf{B}x$ z osobliwą macierzą wagową \mathbf{B} zostały podane przez Petersa i Wilkinsona [144] oraz przez Molera i Stewarta [145] (algorytm QZ). Implementacja algorytmu QZ w języku Fortran 77 jest dostępna komercyjnie w ramach biblioteki programów IMSL (patrz przypis [32] w pracy [31]). Pakiet programów implementujących algorytm QZ w języku Fortran 77 został również napisany przez autora rozprawy [146].

^{6h} Różnicę w wymiarach przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$ i $L^2_{(1)}(\mathcal{V})$ widać szczególnie dobrze w przypadku jednowymiarowym, gdy objętość \mathcal{V} jest odcinkiem. Liczba funkcji, które są liniowo niezależne na powierzchni \mathcal{S} (czyli na dwóch końcach odcinka \mathcal{V}), równa wymiarowi przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S})$, wynosi *dwa*, zaś przestrzeń $L^2_{(1)}(\mathcal{V})$ jest oczywiście nieskończenie wymiarowa.

Funkcje $\{\tilde{\Psi}_k(E, \mathbf{r})\}$, $k = 1, 2, \dots, \text{rank } M$, dane równaniem (6.3.13), można wykorzystać jako funkcje bazowe w celu znalezienia prostego wyrażenia dla przybliżonych wartości elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$ oraz do aproksymowania jądra tego operatora w oparciu o zasady wariacyjne (3.4.73) lub (3.4.93). Utwórzmy funkcje próbne typu Rayleigha–Ritza o postaci

$$\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \bar{c}_k \tilde{\Psi}_k(E, \mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \bar{c}'_k \tilde{\Psi}_k(E, \mathbf{r}), \quad (6.3.15)$$

gdzie $\{\bar{c}_k\}$ i $\{\bar{c}'_k\}$ są parametrami wariacyjnymi, i zastosujemy je do znalezienia przybliżonej wartości elementu macierzowego operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$ pomiędzy funkcjami powierzchniowymi $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ i $\Phi'(\boldsymbol{\rho})$. Postępując według schematu opisanego w podrozdziale 6.1.1, otrzymujemy

$$(\Phi | \hat{\mathcal{R}} \Phi') \stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{k,l=1}^{\text{rank } M} (\Phi | \tilde{\Psi}_k) [\tilde{S}^{-1}]_{kl} (\tilde{\Psi}_l | \Phi'), \quad (6.3.16)$$

gdzie $\tilde{S}(E)$ jest hermitowską macierzą kwadratową o wymiarach $\text{rank } M \times \text{rank } M$ z elementami

$$\tilde{S}_{kl}(E) = (\tilde{\Psi}_k | \nabla_n \tilde{\Psi}_l) + \frac{2m}{\hbar^2} \langle \tilde{\Psi}_k | [\hat{H} - E] \tilde{\Psi}_l \rangle. \quad (6.3.17)$$

Uwzględniając równania (6.3.13) i (6.3.3), możemy przepisać równanie (6.3.17) w zwartej macierzowej notacji w postaci

$$\tilde{S}_{kl}(E) = \tilde{a}_k^\dagger(E) \mathcal{S}(E) \tilde{a}_l(E). \quad (6.3.18)$$

Prawą stronę równania (6.3.18) można uprościć, korzystając z któregokolwiek z równań własnych (6.3.10) oraz z relacji ortonormalności (6.3.12). W wyniku otrzymujemy

$$\tilde{S}_{kl}(E) = \tilde{b}_k(E) \delta_{kl}, \quad (6.3.19)$$

co implikuje, że macierz $\tilde{S}^{-1}(E)$ jest diagonalna, a jej elementy diagonalne są odwrotnościami wartości własnych zagadnienia (6.3.10). Z równań (6.3.16), (6.3.19) i (6.3.13) mamy zatem

$$(\Phi | \hat{\mathcal{R}} \Phi') \stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{k=1}^{\text{rank } M} (\Phi | \tilde{\Psi}_k) \tilde{b}_k^{-1} (\tilde{\Psi}_k | \Phi') = \sum_{i,j=1}^N (\Phi | \phi_i) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M} \tilde{a}_{ik} \tilde{b}_k^{-1} \tilde{a}_{jk}^* \right] (\phi_j | \Phi'), \quad (6.3.20)$$

skąd wynika rozwinięcie spektralne

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') &\stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \tilde{\Psi}_k(E, \boldsymbol{\rho}) \tilde{b}_k^{-1}(E) \tilde{\Psi}_k^*(E, \boldsymbol{\rho}') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \phi_i(\boldsymbol{\rho}) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M} \tilde{a}_{ik}(E) \tilde{b}_k^{-1}(E) \tilde{a}_{jk}^*(E) \right] \phi_j^*(\boldsymbol{\rho}'). \end{aligned} \quad (6.3.21)$$

Z rozwinięcia (6.3.21) oraz z relacji ortonormalności (6.3.14) wynika, że liczby $\{\tilde{b}_k^{-1}(E)\}$, $k = 1, 2, \dots, \text{rank } M$, są wartościami własnymi hermitowskiego operatora $\tilde{\mathcal{R}}(E)$ o jądrze zdefiniowanym równaniem (6.3.21), natomiast funkcje powierzchniowe $\{\tilde{\Psi}_k(E, \rho)\}$ są funkcjami własnymi tego operatora. Operator $\tilde{\mathcal{R}}(E)$ jest przybliżeniem operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$.

Funkcje wariacyjne postaci (6.3.15) można również użyć do znalezienia przybliżonych wartości elementów macierzowych operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ i do aproksymowania jego jądra przy wykorzystaniu zasad wariacyjnych (3.4.112) lub (3.4.132). Postępując zgodnie z procedurą omówioną w podrozdziale 6.1.2, dochodzi się do następującego przybliżenia dla elementu macierzowego $(\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi')$

$$\begin{aligned} (\Phi|\hat{\mathcal{B}}\Phi') &\stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{k,l=1}^{\text{rank } M} (\Phi|\nabla_n \tilde{\Psi}_k) [\tilde{\mathbb{T}}^{-1}]_{kl} (\nabla_n \tilde{\Psi}_l|\Phi') \\ &= \sum_{i,j=1}^N (\Phi|\nabla_n \phi_i) \left[\sum_{k,l=1}^{\text{rank } M} \tilde{a}_{ik} [\tilde{\mathbb{T}}^{-1}]_{kl} \tilde{a}_{jl}^* \right] (\nabla_n \phi_j|\Phi'). \end{aligned} \quad (6.3.22)$$

Ponieważ funkcje powierzchniowe $\Phi(\rho)$ i $\Phi'(\rho)$ są dowolne, równanie (6.3.22) definiuje operator $\tilde{\mathcal{B}}(E)$ z jądrem całkowym

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{B}}(E, \rho, \rho') &\stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{k,l=1}^{\text{rank } M} \nabla_n \tilde{\Psi}_k(E, \rho) [\tilde{\mathbb{T}}^{-1}(E)]_{kl} \nabla_n \tilde{\Psi}_l^*(E, \rho') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \nabla_n \phi_i(\rho) \left[\sum_{k,l=1}^{\text{rank } M} \tilde{a}_{ik}(E) [\tilde{\mathbb{T}}^{-1}(E)]_{kl} \tilde{a}_{jl}^*(E) \right] \nabla_n \phi_j^*(\rho'), \end{aligned} \quad (6.3.23)$$

aproksymującym jądro $\mathcal{B}(E, \rho, \rho')$. We wzorach (6.3.22) i (6.3.23) symbolem $\tilde{\mathbb{T}}(E)$ oznaczyliśmy hermitowską macierz kwadratową o wymiarach $\text{rank } M \times \text{rank } M$ z elementami danymi równaniem

$$\tilde{T}_{kl}(E) = (\nabla_n \tilde{\Psi}_k|\tilde{\Psi}_l) - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \tilde{\Psi}_k | [\hat{H} - E] \tilde{\Psi}_l \rangle. \quad (6.3.24)$$

Biorąc pod uwagę definicję (6.3.13), z równania (6.3.24) wynika, że element macierzowy $\tilde{T}_{kl}(E)$ można również zapisać w następujący sposób

$$\tilde{T}_{kl}(E) = \tilde{a}_k^\dagger(E) \mathbb{T}(E) \tilde{a}_l(E), \quad (6.3.25)$$

gdzie $\mathbb{T}(E)$ jest hermitowską macierzą kwadratową o wymiarach $N \times N$ z wyrazami

$$T_{ij}(E) = (\nabla_n \phi_i|\phi_j) - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle. \quad (6.3.26)$$

W odróżnieniu od macierzy $\tilde{\mathcal{S}}(E)$ określonej równaniem (6.3.17), zdefiniowana równaniem (6.3.24) macierz $\tilde{\mathbb{T}}(E)$ w ogólności nie jest jednak diagonalna.

Dla zupełności rozważań zauważymy jeszcze, że, kierując się podobieństwem pomiędzy rozwinięciami spektralnymi (3.1.32) i (6.3.21), przez analogię do rozwinięcia (3.1.20) możemy zdefiniować operator $\tilde{\mathfrak{B}}(E)$ o jądrze całkowym

$$\begin{aligned}\tilde{\mathfrak{B}}(E, \rho, \rho') &= \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \tilde{\Psi}_k(E, \rho) \tilde{b}_k(E) \tilde{\Psi}_k^*(E, \rho') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M} \tilde{a}_{ik}(E) \tilde{b}_k(E) \tilde{a}_{jk}^*(E) \right] \phi_j^*(\rho'),\end{aligned}\quad (6.3.27)$$

aproxymujący operator $\hat{B}(E)$. Jak łatwo sprawdzić, jądra (6.3.27) oraz (6.3.21) spełniają relację

$$\begin{aligned}\int_S d^2 \rho'' \tilde{\mathcal{R}}(E, \rho, \rho'') \tilde{\mathfrak{B}}(E, \rho'', \rho') &= \int_S d^2 \rho'' \tilde{\mathfrak{B}}(E, \rho, \rho'') \tilde{\mathcal{R}}(E, \rho'', \rho') \\ &= \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \tilde{\Psi}_k(E, \rho) \tilde{\Psi}_k^*(E, \rho')\end{aligned}\quad (6.3.28)$$

(porównaj (3.1.29) i (3.1.18)). Suma występująca po prawej stronie równania (6.3.28) jest jądrem operatora rzutowego na podprzestrzeń funkcji powierzchniowych rozpinaną przez przybliżone funkcje własne $\{\tilde{\Psi}_k(E, \rho)\}$, $k = 1, 2, \dots, \text{rank } M$. Ze względu na szczególnie prostą postać jądra (6.3.27), w zastosowaniach praktycznych korzystanie z definiowanego przez to jądro operatora $\tilde{\mathfrak{B}}(E)$ może być znacznie wygodniejsze niż korzystanie z operatora $\hat{B}(E)$ określonego równaniem (6.3.23). Należy jednak wyraźnie podkreślić istotną różnicę pomiędzy rozwinięciem (6.3.23) a rozwinięciem (6.3.27): podczas gdy pierwsze z nich otrzymaliśmy na drodze zastosowania metod rachunku wariacyjnego, rozwinięcie (6.3.27) nie zostało wyprowadzone, lecz podane na zasadzie analogii.

6.3.2 Zasada wariacyjna dla wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$

Zastosujemy z kolei funkcje próbne Rayleigha–Ritza do znalezienia przybliżonych wartości własnych operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$. Podstawienie funkcji (6.3.1) do funkcjonału (3.4.47) daje

$$F[\bar{a}^\dagger, \bar{a}] = \frac{\bar{a}^\dagger \mathbb{T} \bar{a}}{\bar{a}^\dagger \mathbb{N} \bar{a}},\quad (6.3.29)$$

przy czym \bar{a} i \bar{a}^\dagger są zdefiniowane tak samo, jak w równaniu (6.3.2), $\mathbb{T}(E)$ jest kwadratową macierzą hermitowską o wymiarach $N \times N$ z elementami zdefiniowanymi równaniem (6.3.26), zaś \mathbb{N} jest kwadratową macierzą hermitowską o wymiarach $N \times N$ z wyrazami

$$N_{ij} = (\nabla_n \phi_i | \nabla_n \phi_j).\quad (6.3.30)$$

Wartości stacjonarne funkcjonału (6.3.29) ze względu na wariacje składowych wektorów \bar{a} oraz \bar{a}^\dagger ,

$$\widetilde{b}^{-1}(E) = \text{stat}_{\bar{a}, \bar{a}^\dagger} \frac{\bar{a}^\dagger \mathbb{T}(E) \bar{a}}{\bar{a}^\dagger \mathbb{N} \bar{a}}, \quad (6.3.31)$$

przybliżają wartości własne operatora $\hat{R}(E)$. Oznaczając przez \tilde{a} oraz \tilde{a}^\dagger te wektory \bar{a} oraz \bar{a}^\dagger , dla których

$$\delta F[\tilde{a}^\dagger, \tilde{a}] = 0 \quad (6.3.32)$$

i dokonując wariacji obu stron równania (6.3.29), dochodzimy do dwóch hermitowsko sprzężonych uogólnionych macierzowych równań na wartości własne

$$\mathbb{T} \tilde{a} = \widetilde{b}^{-1} \mathbb{N} \tilde{a}, \quad \tilde{a}^\dagger \mathbb{T} = \widetilde{b}^{-1} \tilde{a}^\dagger \mathbb{N}, \quad (6.3.33)$$

w których \tilde{a} i \tilde{a}^\dagger są odpowiednio prawym i lewym wektorem własnym, a

$$\widetilde{b}^{-1} = \frac{\tilde{a}^\dagger \mathbb{T} \tilde{a}}{\tilde{a}^\dagger \mathbb{N} \tilde{a}} \quad (6.3.34)$$

jest stowarzyszoną z tymi wektorami wartością własną. Dla nieosobliwych macierzy \mathbb{T} liczba rozwiązań zagadnień własnych (6.3.33) jest równa rzędowi macierzy \mathbb{N} .

Tak jak w przypadku dyskutowanym w podrozdziale 6.3.1, równania własne (6.3.33) będą na ogół osobliwe, gdyż rząd macierzy \mathbb{N} może (i powinien) być mniejszy niż liczba N funkcji bazowych $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ użytych w rozwinięciu (6.3.1). Należy przy tym zwrócić uwagę, że nawet w przypadku, gdy funkcje bazowe $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ użyte w bieżącej dyskusji są tymi samymi funkcjami, które wykorzystywaliśmy w podrozdziale 6.3.1, w ogólności rzędy macierzy \mathbb{N} i \mathbb{M} nie muszą być jednakowe, to znaczy $\text{rank } \mathbb{N} \neq \text{rank } \mathbb{M}$. Ponadto, jeżeli $\widetilde{b}_k^{-1}(E)$ jest wartością własną zagadnienia (6.3.33) aproksymującą wartość własną $b_k^{-1}(E)$ operatora $\hat{R}(E)$, zaś $\tilde{b}_k(E)$ jest wartością własną zagadnienia (6.3.10) przybliżającą wartość własną $b_k(E)$ operatora $\hat{B}(E)$, w ogólności zachodzi

$$\widetilde{b}_k^{-1}(E) \neq \tilde{b}_k^{-1}(E). \quad (6.3.35)$$

Podobnie, wektory własne \tilde{a}_k (i ich sprzężenia hermitowskie) zagadnień (6.3.10) oraz (6.3.33) odpowiadające wartościom własnym $\tilde{b}_k(E)$ oraz $\widetilde{b}_k^{-1}(E)$ będą na ogół różniły się, pomimo stosowania przez nas tych samych oznaczeń w podrozdziałach 6.3.1 i 6.3.2.

Ze względu na hermitowskość macierzy $\mathbb{T}(E)$ oraz \mathbb{N} , wektory własne zagadnienia (6.3.33) odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne w sensie równania

$$\tilde{a}_k^\dagger(E) \mathbb{N} \tilde{a}_l(E) = 0 \quad \left(\widetilde{b}_k^{-1}(E) \neq \widetilde{b}_l^{-1}(E) \right). \quad (6.3.36)$$

W dalszym ciągu założymy, że również wektory własne odpowiadające zdegenerowanym wartościom własnym (jeżeli takie występują) zostały zortogonalizowane

oraz że wszystkie wektory własne zostały unormowane tak, że zachodzi

$$\tilde{a}_k^\dagger(E) \mathbf{N} \tilde{a}_l(E) = [\tilde{b}_k^{-1}(E)]^{-2} \delta_{kl}. \quad (6.3.37)$$

Relacja (6.3.37) implikuje, że funkcje

$$\tilde{\Psi}_k(E, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_{ik}(E) \phi_i(\mathbf{r}), \quad k = 1, 2, \dots, \text{rank } \mathbf{N}, \quad (6.3.38)$$

ze współczynnikami będącymi składowymi wektorów własnych zagadnienia (6.3.33), spełniają następującą relację ortogonalności na powierzchni \mathcal{S}

$$(\nabla_n \tilde{\Psi}_k | \nabla_n \tilde{\Psi}_l) = [\tilde{b}_k^{-1}(E)]^{-2} \delta_{kl} \quad (6.3.39)$$

(porównaj (3.1.21)). Części powierzchniowe $\{\tilde{\Psi}_k(E, \boldsymbol{\rho})\}$ funkcji (6.3.38) aproksymują funkcje własne operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$.

Kombinacje liniowe funkcji (6.3.38) o postaci

$$\bar{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{N}} \bar{c}_k \tilde{\Psi}_k(E, \mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{N}} \bar{c}'_k \tilde{\Psi}'_k(E, \mathbf{r}), \quad (6.3.40)$$

ze współczynnikami $\{\bar{c}_k\}$ i $\{\bar{c}'_k\}$ podlegającymi wariacji, można wykorzystać do znalezienia przybliżenia wariacyjnego dla elementów macierzowych i jądra całkowego operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$. Zgodnie z wynikami uzyskanymi w podrozdziale 6.1.2, mamy

$$(\Phi | \hat{\mathcal{B}} \Phi') \stackrel{\text{var}}{\cong} \sum_{k,l=1}^{\text{rank } \mathbf{N}} (\Phi | \nabla_n \tilde{\Psi}_k) [\tilde{\mathbf{T}}^{-1}]_{kl} (\nabla_n \tilde{\Psi}_l | \Phi'), \quad (6.3.41)$$

przy czym $\tilde{\mathbf{T}}(E)$ jest kwadratową macierzą hermitowską o wymiarach $\text{rank } \mathbf{N} \times \text{rank } \mathbf{N}$ z elementami⁶¹

$$\tilde{\mathcal{T}}_{kl}(E) = (\nabla_n \tilde{\Psi}_k | \tilde{\Psi}_l) - \frac{2m}{\hbar^2} \langle \tilde{\Psi}_k | [\hat{H} - E] \tilde{\Psi}_l \rangle = \tilde{a}_k^\dagger(E) \mathbf{T}(E) \tilde{a}_l(E). \quad (6.3.42)$$

Ostatnia równość we wzorze (6.3.42) wynika z równań (6.3.38) oraz (6.3.26). Ze względu na równania własne (6.3.33) oraz relację ortogonalności (6.3.37) spełnianą przez ich rozwiązania, równanie (6.3.42) można przekształcić do postaci

$$\tilde{\mathcal{T}}_{kl}(E) = [\tilde{b}_k^{-1}(E)]^{-1} \delta_{kl}, \quad (6.3.43)$$

z której wynika, że macierz $\tilde{\mathbf{T}}(E)$ jest diagonalna. W tej sytuacji odwrócenie macierzy $\tilde{\mathbf{T}}(E)$ nie następuje żadnych trudności i z równań (6.3.41) oraz (6.3.43)

⁶¹ Macierze $\tilde{\mathbf{T}}(E)$ i $\mathbf{T}(E)$, zdefiniowane równaniami odpowiednio (6.3.42) oraz (6.3.24), mogą być różne, gdyż w ogólności zachodzi $\dim \tilde{\mathbf{T}}(E) = \text{rank } \mathbf{N} \neq \text{rank } \mathbf{M} = \dim \mathbf{T}(E)$.

otrzymujemy następujące wariacyjne przybliżenie elementu macierzewego operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ pomiędzy funkcjami powierzchniowymi $\Phi(\boldsymbol{\rho})$ i $\Phi'(\boldsymbol{\rho})$

$$\begin{aligned} (\Phi | \hat{\mathcal{B}} \Phi') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k=1}^{\text{rank N}} (\Phi | \nabla_n \tilde{\Psi}_k) \widetilde{b_k^{-1}} (\nabla_n \tilde{\Psi}_k | \Phi') \\ &= \sum_{i,j=1}^N (\Phi | \nabla_n \phi_i) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank N}} \tilde{a}_{ik} \widetilde{b_k^{-1}} \tilde{a}_{jk}^* \right] (\nabla_n \phi_j | \Phi'). \end{aligned} \quad (6.3.44)$$

Równanie (6.3.44) definiuje elementy macierzewego operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$ z jądrem całkowym

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{B}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k=1}^{\text{rank N}} \nabla_n \tilde{\Psi}_k(E, \boldsymbol{\rho}) \widetilde{b_k^{-1}}(E) \nabla_n \tilde{\Psi}_k^*(E, \boldsymbol{\rho}') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \nabla_n \phi_i(\boldsymbol{\rho}) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank N}} \tilde{a}_{ik}(E) \widetilde{b_k^{-1}}(E) \tilde{a}_{jk}^*(E) \right] \nabla_n \phi_j^*(\boldsymbol{\rho}'), \end{aligned} \quad (6.3.45)$$

aproxymującym jądro operatora $\hat{\mathcal{B}}(E)$.

Zastosowanie funkcji próbnych (6.3.40) w zasadzie wariacyjnej (3.4.73), w której przyjęto $\hat{\mathbf{h}}(E) = \hat{\mathbf{o}}$, prowadzi w efekcie do elementu macierzewego

$$\begin{aligned} (\Phi | \hat{\mathcal{R}} \Phi') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k,l=1}^{\text{rank N}} (\Phi | \tilde{\Psi}_k) [\tilde{\mathcal{S}}^{-1}]_{kl} (\tilde{\Psi}_l | \Phi') \\ &= \sum_{i,j=1}^N (\Phi | \phi_i) \left[\sum_{k,l=1}^{\text{rank N}} \tilde{a}_{ik} [\tilde{\mathcal{S}}^{-1}]_{kl} \tilde{a}_{jl}^* \right] (\phi_j | \Phi'), \end{aligned} \quad (6.3.46)$$

aproxymującego element macierzewy $(\Phi | \hat{\mathcal{R}} \Phi')$, oraz do jądra

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k,l=1}^{\text{rank N}} \tilde{\Psi}_k(E, \boldsymbol{\rho}) [\tilde{\mathcal{S}}^{-1}(E)]_{kl} \tilde{\Psi}_l^*(E, \boldsymbol{\rho}') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \phi_i(\boldsymbol{\rho}) \left[\sum_{k,l=1}^{\text{rank N}} \tilde{a}_{ik}(E) [\tilde{\mathcal{S}}^{-1}(E)]_{kl} \tilde{a}_{jl}^*(E) \right] \phi_j^*(\boldsymbol{\rho}'), \end{aligned} \quad (6.3.47)$$

przybliżającego jądro operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$. W równaniach (6.3.46) i (6.3.47) symbolem $\tilde{\mathcal{S}}(E)$ oznaczyliśmy kwadratową macierz hermitowską o wymiarach $\text{rank N} \times \text{rank N}$ z elementami⁶¹

$$\tilde{\mathcal{S}}_{kl}(E) = (\tilde{\Psi}_k | \nabla_n \tilde{\Psi}_l) + \frac{2m}{\hbar^2} \langle \tilde{\Psi}_k | [\hat{H} - E] \tilde{\Psi}_l \rangle = \tilde{a}_k^\dagger(E) \mathcal{S}(E) \tilde{a}_l(E). \quad (6.3.48)$$

⁶¹ Macierze $\tilde{\mathcal{S}}(E)$ i $\tilde{\mathcal{S}}(E)$, zdefiniowane odpowiednio równaniami (6.3.48) oraz (6.3.17), pomimo formalnego podobieństwa ich definicji, nie muszą być identyczne, gdyż w ogólności zachodzi $\dim \tilde{\mathcal{S}}(E) = \text{rank N} \neq \text{rank M} = \dim \mathcal{S}(E)$ (porównaj przypis 61 na stronie 133).

Ostatnia równość we wzorze (6.3.48) wynika z definicji (6.3.13) i (6.3.3). W odróżnieniu od macierzy $\tilde{\mathbf{T}}(E)$ określonej równaniem (6.3.42), macierz $\tilde{\mathbf{S}}(E)$ w ogólności nie jest diagonalna.

Aby uniknąć odwracania macierzy $\tilde{\mathbf{S}}(E)$, w zastosowaniach, zamiast operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$ z jądrem (6.3.47), wygodniejsze może być używanie operatora $\hat{\mathcal{X}}(E)$ z jądrem

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{X}}(E, \rho, \rho') &= \sum_{k=1}^{\text{rank } N} \nabla_n \tilde{\Psi}_k(E, \rho) [\widetilde{b_k^{-1}}(E)]^3 \nabla_n \tilde{\Psi}_k^*(E, \rho') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \nabla_n \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } N} \tilde{a}_{ik}(E) [\widetilde{b_k^{-1}}(E)]^3 \tilde{a}_{jk}^*(E) \right] \nabla_n \phi_j^*(\rho').\end{aligned}\quad (6.3.49)$$

Jądra (6.3.45) oraz (6.3.49) są wzajemnie “odwrotne” w sensie równania

$$\begin{aligned}\int_S d^2 \rho'' \tilde{\mathcal{X}}(E, \rho, \rho'') \tilde{\mathcal{B}}(E, \rho'', \rho') &= \int_S d^2 \rho'' \tilde{\mathcal{B}}(E, \rho, \rho'') \tilde{\mathcal{X}}(E, \rho'', \rho') \\ &= \sum_{k=1}^{\text{rank } N} \nabla_n \tilde{\Psi}_k(E, \rho) [\widetilde{b_k^{-1}}(E)]^2 \nabla_n \tilde{\Psi}_k^*(E, \rho')\end{aligned}\quad (6.3.50)$$

(porównaj (3.1.29) i (3.1.22)). Należy jednak wyraźnie zaznaczyć, że podczas gdy jądro (6.3.47) jest oszacowaniem wariacyjnym jądra operatora $\hat{\mathcal{R}}(E)$, definicja (6.3.49) oparta jest jedynie na analogii pomiędzy równaniami (3.1.33), (6.3.45) oraz (3.1.23).

6.3.3 Zasady wariacyjne dla wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$

Rozważmy zastosowanie funkcji próbnych o postaci

$$\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \bar{a}_i^{(\pm)} \phi_i(\mathbf{r}),\quad (6.3.51)$$

gdzie $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$ są zadanymi spinorami czteroskładnikowymi, do znajdowania przybliżonych wartości własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$.^{6κ} Podstawiając funkcje (6.3.51) do równania (5.5.21), otrzymujemy funkcjonały

$$F^{(\pm)}[\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}, \bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}] = \frac{\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{S}^{(\pm)} \bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}}{\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{M}^{(\pm)} \bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}},\quad (6.3.52)$$

^{6κ} Przypominamy, patrz podrozdział 5.1, że operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$ mają wspólne funkcje i wartości własne, podobnie jak operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$. Ponadto, wartości własne pierwszej pary operatorów są odwrotnościami wartości własnych drugiej pary. Dlatego w dalszym ciągu tego podrozdziału będziemy wspominali jedynie o funkcjach i wartościach własnych operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$.

gdzie $\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}$ są macierzami jednokolumnowymi z elementami $\{\bar{a}_i^{(\pm)}\}$, $\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}$ są macierzami jednowierszowymi z elementami $\{\bar{a}_i^{(\pm)*}\}$, natomiast $\mathbf{S}^{(\pm)}(E)$ i $\mathbf{M}^{(\pm)}$ są kwadratowymi macierzami hermitowskimi o wymiarach $N \times N$ z elementami odpowiednio

$$S_{ij}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)} \langle \phi_i | i\alpha_n^{(\pm)} \phi_j \rangle - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle, \quad (6.3.53)$$

$$M_{ij}^{(\pm)} = \langle \phi_i | \beta^{(\pm)} \phi_j \rangle. \quad (6.3.54)$$

Wartości stacjonarne funkcjonałów (6.3.52) ze względu na wariacje składowych wektorów $\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}$ i $\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}$,

$$\widetilde{b^{\pm 1}}(E) = \underset{\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}, \bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}}{\text{stat}} \frac{\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{S}^{(\pm)}(E) \bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}}{\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{M}^{(\pm)} \bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}}, \quad (6.3.55)$$

aproxymują wartości własne operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$. Oznaczając przez $\tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}$ i $\tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)}$ te wektory $\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}$ i $\bar{\mathbf{a}}^{(\pm)}$, dla których funkcjonały (6.3.52) osiągnęły wartości stacjonarne, to znaczy

$$\delta F^{(\pm)}[\tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}, \tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)}] = 0, \quad (6.3.56)$$

znajdujemy, że liczby

$$\widetilde{b^{\pm 1}} = \frac{\tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{S}^{(\pm)} \tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)}}{\tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{M}^{(\pm)} \tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)}} \quad (6.3.57)$$

są wartościami własnymi, zaś $\tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)}$ i $\tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger}$ są odpowiadającymi im prawo- i lewostronnymi wektorami własnymi uogólnionych macierzowych zagadnień własnych

$$\mathbf{S}^{(\pm)} \tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)} = \widetilde{b^{\pm 1}} \mathbf{M}^{(\pm)} \tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)}, \quad \tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{S}^{(\pm)} = \widetilde{b^{\pm 1}} \tilde{\mathbf{a}}^{(\pm)\dagger} \mathbf{M}^{(\pm)}. \quad (6.3.58)$$

Liczba wartości własnych $\{\widetilde{b}_k(E) \equiv \widetilde{b_k^{\pm 1}}(E)\}$ oraz odpowiadających im wektorów własnych $\{\tilde{\mathbf{a}}_k^{(+)}(E)\}$ jest równa rzędowi macierzy $\mathbf{M}^{(+)}$, natomiast liczba wartości własnych $\{\widetilde{b}_k^{-1}(E)\}$ i wektorów własnych $\{\tilde{\mathbf{a}}_k^{(-)}(E)\}$ jest równa rzędowi macierzy $\mathbf{M}^{(-)}$, przy czym w ogólności może zachodzić $\text{rank} \mathbf{M}^{(+)} \neq \text{rank} \mathbf{M}^{(-)}$. Na mocy hermitowskości macierzy $\mathbf{S}^{(\pm)}(E)$ oraz $\mathbf{M}^{(\pm)}$, wszystkie wartości własne $\{\widetilde{b}_k^{\pm 1}(E)\}$ są rzeczywiste. Będziemy dalej zakładali, że wektory $\{\tilde{\mathbf{a}}_k^{(\pm)}(E)\}$ zostały zortogonalizowane i unormowane w taki sposób, że

$$\tilde{\mathbf{a}}_k^{(+)\dagger}(E) \mathbf{M}^{(+)} \tilde{\mathbf{a}}_l^{(+)}(E) = \delta_{kl} \quad (6.3.59)$$

oraz

$$\tilde{\mathbf{a}}_k^{(-)\dagger}(E) \mathbf{M}^{(-)} \tilde{\mathbf{a}}_l^{(-)}(E) = (\gamma^{(+)})^2 [\widetilde{b}_k^{-1}(E)]^{-2} \delta_{kl}. \quad (6.3.60)$$

Wówczas funkcje

$$\tilde{\Psi}_k^{(\pm)}(E, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_{ik}^{(\pm)}(E) \phi_i(\mathbf{r}), \quad k = 1, 2, \dots, \text{rank} \mathbf{M}^{(\pm)}, \quad (6.3.61)$$

aproxymujące funkcje własne operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$, spełniają relacje ortogonalności

$$(\tilde{\Psi}_k^{(+)} | \beta^{(+)} \tilde{\Psi}_l^{(+)}) = \delta_{kl}, \quad (6.3.62)$$

$$(\tilde{\Psi}_k^{(-)} | \beta^{(-)} \tilde{\Psi}_l^{(-)}) = (\gamma^{(+)})^2 [\tilde{b}_k^{-1}(E)]^{-2} \delta_{kl} \quad (6.3.63)$$

(porównaj (5.1.35) i (5.1.42)).

Zastosujemy funkcje (6.3.61) jako funkcje bazowe w wariacyjnych obliczeniach przybliżonych wartości elementó macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$. Wybierając funkcje próbne w postaci

$$\bar{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\pm)}} \bar{c}_k^{(\pm)} \tilde{\Psi}_k^{(\pm)}(E, \mathbf{r}), \quad \bar{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\pm)}} \bar{c}'_k^{(\pm)} \tilde{\Psi}_k^{(\pm)}(E, \mathbf{r}) \quad (6.3.64)$$

i korzystając z wyników podrozdziału 6.1.3, otrzymujemy

$$(\Phi | \hat{\mathcal{R}}^{(\pm)} \Phi') = \sum_{k,l=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\pm)}} (\Phi | \beta^{(\pm)} \tilde{\Psi}_k^{(\pm)}) [(\tilde{\mathcal{S}}^{(\pm)})^{-1}]_{kl} (\beta^{(\pm)} \tilde{\Psi}_l^{(\pm)} | \Phi'), \quad (6.3.65)$$

gdzie $\tilde{\mathcal{S}}^{(\pm)}(E)$ są hermitowskimi macierzami kwadratowymi o wymiarach $\text{rank } \mathbf{M}^{(\pm)} \times \text{rank } \mathbf{M}^{(\pm)}$ z elementami

$$\tilde{S}_{kl}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)} (\tilde{\Psi}_k^{(\pm)} | i\alpha_n^{(\pm)} \tilde{\Psi}_l^{(\pm)}) - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \tilde{\Psi}_k^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \tilde{\Psi}_l^{(\pm)} \rangle. \quad (6.3.66)$$

Biorąc pod uwagę definicje (6.3.61) i (6.3.53), możemy przepisać równanie (6.3.66) w postaci

$$\tilde{S}_{kl}^{(\pm)}(E) = \tilde{\mathbf{a}}_k^{(\pm)\dagger}(E) \mathbf{S}^{(\pm)}(E) \tilde{\mathbf{a}}_l^{(\pm)}(E). \quad (6.3.67)$$

Z równań (6.3.67), (6.3.58) oraz z relacji ortogonalności (6.3.62) i (6.3.63) wynika, że macierze $\tilde{\mathcal{S}}^{(\pm)}(E)$ są diagonalne, przy czym

$$\tilde{S}_{kl}^{(+)}(E) = \tilde{b}_k(E) \delta_{kl}, \quad (6.3.68)$$

$$\tilde{S}_{kl}^{(-)}(E) = (\gamma^{(+)})^2 [\tilde{b}_k^{-1}(E)]^{-1} \delta_{kl}. \quad (6.3.69)$$

Uwzględniając w równaniu (6.3.65) wyniki (6.3.68) i (6.3.69), znajdujemy następujące przybliżenia elementów macierzowych $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}^{(\pm)} \Phi')$

$$\begin{aligned} (\Phi | \hat{\mathcal{R}}^{(+)} \Phi') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(+)}} (\Phi | \beta^{(+)} \tilde{\Psi}_k^{(+)}) \tilde{b}_k^{-1} (\beta^{(+)} \tilde{\Psi}_k^{(+)} | \Phi') \\ &= \sum_{i,j=1}^N (\Phi | \beta^{(+)} \phi_i) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(+)}} \tilde{a}_{ik}^{(+)} \tilde{b}_k^{-1} \tilde{a}_{jk}^{(+)*} \right] (\beta^{(+)} \phi_j | \Phi'), \end{aligned} \quad (6.3.70)$$

$$\begin{aligned}
(\Phi | \hat{\mathcal{R}}^{(-)} \Phi') &\stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} (\Phi | \beta^{(-)} \tilde{\Psi}_k^{(-)}) \widetilde{b_k^{-1}} (\beta^{(-)} \tilde{\Psi}_k^{(-)} | \Phi') \\
&= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{i,j=1}^N (\Phi | \beta^{(-)} \phi_i) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} \tilde{a}_{ik}^{(-)} \widetilde{b_k^{-1}} \tilde{a}_{jk}^{(-)*} \right] (\beta^{(-)} \phi_j | \Phi') \quad (6.3.71)
\end{aligned}$$

oraz jąder całkowych $\mathcal{R}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{R}}^{(+)}(E, \rho, \rho') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(+)}} \beta^{(+)} \tilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \rho) \widetilde{b_k^{-1}}(E) \tilde{\Psi}_k^{(+)\dagger}(E, \rho') \beta^{(+)} \\
&= \sum_{i,j=1}^N \beta^{(+)} \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(+)}} \tilde{a}_{ik}^{(+)}(E) \widetilde{b_k^{-1}}(E) \tilde{a}_{jk}^{(+)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\rho') \beta^{(+)}, \quad (6.3.72)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{R}}^{(-)}(E, \rho, \rho') &\stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} \beta^{(-)} \tilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \rho) \widetilde{b_k^{-1}}(E) \tilde{\Psi}_k^{(-)\dagger}(E, \rho') \beta^{(-)} \\
&= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{i,j=1}^N \beta^{(-)} \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} \tilde{a}_{ik}^{(-)}(E) \widetilde{b_k^{-1}}(E) \tilde{a}_{jk}^{(-)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\rho') \beta^{(-)}. \quad (6.3.73)
\end{aligned}$$

Funkcje (6.3.64) można także zastosować do znalezienia operatorów $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ aproksymujących operatory $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$. Na mocy wyników podrozdziału 6.1.4 otrzymujemy

$$\begin{aligned}
(\Phi | \hat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') &\stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(\mp)})^2 \sum_{k,l=1}^{\text{rank } M^{(\pm)}} (\Phi | i\alpha_n^{(\pm)} \tilde{\Psi}_k^{(\pm)}) [(\tilde{\mathbf{T}}^{(\pm)})^{-1}]_{kl} (i\alpha_n^{(\pm)} \tilde{\Psi}_l^{(\pm)} | \Phi') \\
&= (\gamma^{(\mp)})^2 \sum_{i,j=1}^N (\Phi | i\alpha_n^{(\pm)} \phi_i) \left[\sum_{k,l=1}^{\text{rank } M^{(\pm)}} \tilde{a}_{ik}^{(\pm)} [(\tilde{\mathbf{T}}^{(\pm)})^{-1}]_{kl} \tilde{a}_{jl}^{(\pm)*} \right] (i\alpha_n^{(\pm)} \phi_j | \Phi'), \quad (6.3.74)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') &\stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(\mp)})^2 \sum_{k,l=1}^{\text{rank } M^{(\pm)}} \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \tilde{\Psi}_k^{(\pm)}(E, \rho) [(\tilde{\mathbf{T}}^{(\pm)}(E))^{-1}]_{kl} \tilde{\Psi}_l^{(\pm)\dagger}(E, \rho') \alpha_n^{(\mp)}(\rho') \\
&= (\gamma^{(\mp)})^2 \sum_{i,j=1}^N \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \phi_i(\rho) \\
&\quad \times \left[\sum_{k,l=1}^{\text{rank } M^{(\pm)}} \tilde{a}_{ik}^{(\pm)}(E) [(\tilde{\mathbf{T}}^{(\pm)}(E))^{-1}]_{kl} \tilde{a}_{jl}^{(\pm)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\rho') \alpha_n^{(\mp)}(\rho'), \quad (6.3.75)
\end{aligned}$$

gdzie $\tilde{\mathbf{T}}^{(\pm)}(E)$ są zdefiniowane jako hermitowskie macierze kwadratowe o wymiarach $\text{rank } \mathbf{M}^{(\pm)} \times \text{rank } \mathbf{M}^{(\pm)}$ z elementami

$$\tilde{T}_{kl}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)} (i\alpha_n^{(\pm)} \tilde{\Psi}_k^{(\pm)} | \tilde{\Psi}_l^{(\pm)}) + \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \tilde{\Psi}_k^{(\pm)} | [\hat{H} - E] \tilde{\Psi}_l^{(\pm)} \rangle. \quad (6.3.76)$$

Jak łatwo zauważyć, z równań (6.3.61) i (6.3.76) wynika, że

$$\tilde{T}_{kl}^{(\pm)}(E) = \tilde{\mathbf{a}}_k^{(\pm)\dagger}(E) \mathbf{T}^{(\pm)}(E) \tilde{\mathbf{a}}_l^{(\pm)}(E), \quad (6.3.77)$$

gdzie przez $\mathbf{T}^{(\pm)}(E)$ oznaczyliśmy hermitowskie macierze kwadratowe o wymiarach $N \times N$ z elementami

$$T_{ij}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)} (i\alpha_n^{(\pm)} \phi_i | \phi_j) + \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \phi_i | [\hat{H} - E] \phi_j \rangle = (\gamma^{(\mp)})^2 S_{ij}^{(\mp)}(E). \quad (6.3.78)$$

Ponieważ w ogólności macierze $\tilde{\mathbf{T}}^{(\pm)}(E)$ nie są diagonalne, w praktyce stosowanie operatorów $\tilde{\mathbf{B}}^{(\pm)}(E)$ może być niewygodne. Jednakże, operatory $\hat{\mathbf{B}}^{(\pm)}(E)$ można także aproksymować “niewariacyjnymi” operatorami $\tilde{\mathbf{B}}^{(\pm)}(E)$ o jądrach

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{B}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') &= \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(+)}} \beta^{(+)} \tilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}) \tilde{b}_k(E) \tilde{\Psi}_k^{(+)\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(+)} \\ &= \sum_{i,j=1}^N \beta^{(+)} \phi_i(\boldsymbol{\rho}) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(+)}} \tilde{a}_{ik}^{(+)}(E) \tilde{b}_k(E) \tilde{a}_{jk}^{(+)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\boldsymbol{\rho}') \beta^{(+)} \end{aligned} \quad (6.3.79)$$

oraz

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{B}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') &= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(-)}} \beta^{(-)} \tilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}) [\tilde{b}_k^{-1}(E)]^3 \tilde{\Psi}_k^{(-)\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(-)} \\ &= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{i,j=1}^N \beta^{(-)} \phi_i(\boldsymbol{\rho}) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(-)}} \tilde{a}_{ik}^{(-)}(E) [\tilde{b}_k^{-1}(E)]^3 \tilde{a}_{jk}^{(-)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\boldsymbol{\rho}') \beta^{(-)} \end{aligned} \quad (6.3.80)$$

(porównaj (5.1.38) i (5.1.46)). Jądra $\tilde{\mathcal{R}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ oraz $\tilde{\mathbf{B}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ są wzajemnie “odwrotne” w sensie równania

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}'' \tilde{\mathcal{R}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \tilde{\mathbf{B}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') &= \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}'' \tilde{\mathbf{B}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \tilde{\mathcal{R}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') \\ &= \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(+)}} \beta^{(+)} \tilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}) \tilde{\Psi}_k^{(+)\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(+)} \end{aligned} \quad (6.3.81)$$

(porównaj (5.1.77) oraz (5.1.36)), zaś jądra $\tilde{\mathcal{R}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ oraz $\tilde{\mathbf{B}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ spełniają relację “odwrotności”

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}'' \widetilde{\mathcal{R}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \widetilde{\mathfrak{B}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') = \int_{\mathcal{S}} d^2 \boldsymbol{\rho}'' \widetilde{\mathfrak{B}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \widetilde{\mathcal{R}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') \\
& = (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(-)}} \beta^{(-)} \widetilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}) [\widetilde{b}_k^{-1}(E)]^2 \widetilde{\Psi}_k^{(-)\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}') \beta^{(-)} \quad (6.3.82)
\end{aligned}$$

(porównaj (5.1.77) oraz (5.1.44)).

W powyższych rozważaniach zastosowaliśmy funkcje $\{\widetilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \mathbf{r})\}$ jako funkcje bazowe w celu znalezienia przybliżonych elementów macierzowych i jąder operatorów $\widehat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$ oraz $\widehat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$, a funkcje $\{\widetilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \mathbf{r})\}$ do aproksymacji elementów macierzowych i jąder operatorów $\widehat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$ oraz $\widehat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$. Nic nie stoi jednak na przeszkodzie, by postąpić odwrotnie i wykorzystać funkcje $\{\widetilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \mathbf{r})\}$ jako funkcje bazowe w procedurach wariacyjnych prowadzących do aproksymacji elementów macierzowych i jąder operatorów $\widehat{\mathcal{B}}^{(-)}(E)$ oraz $\widehat{\mathcal{R}}^{(-)}(E)$, zaś funkcje $\{\widetilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \mathbf{r})\}$ w procedurach wariacyjnych prowadzących do oszacowań elementów macierzowych i jąder operatorów $\widehat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$ oraz $\widehat{\mathcal{R}}^{(+)}(E)$. Wybierając funkcje próbne w postaci

$$\begin{aligned}
\overline{\Psi}^{(\pm)}(\mathbf{r}) &= \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)}} \overline{c}_k^{(\pm)} \widetilde{\Psi}_k^{(\mp)}(E, \mathbf{r}), & \overline{\Psi}'^{(\pm)}(\mathbf{r}) &= \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)}} \overline{c}'_k^{(\pm)} \widetilde{\Psi}_k^{(\mp)}(E, \mathbf{r})
\end{aligned} \quad (6.3.83)$$

i stosując wyniki podrozdziału 6.1.4, znajdujemy następujące wyrażenia dla elementów macierzowych operatorów $\widehat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ aproksymujących operatory $\widehat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$

$$(\Phi | \widehat{\mathcal{B}}^{(\pm)} \Phi') \stackrel{\text{var}}{\cong} (\gamma^{(\mp)})^2 \sum_{k,l=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)}} (\Phi | i\alpha_n^{(\pm)} \widetilde{\Psi}_k^{(\mp)}) [(\widetilde{\mathbf{T}}^{(\pm)})^{-1}]_{kl} (i\alpha_n^{(\pm)} \widetilde{\Psi}_l^{(\mp)} | \Phi'). \quad (6.3.84)$$

W równaniu (6.3.84) $\widetilde{\mathbf{T}}^{(\pm)}(E)$ są kwadratowymi macierzami hermitowskimi o wymiarach $\text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)} \times \text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)}$ z elementami

$$\widetilde{\mathbf{T}}_{kl}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)} (i\alpha_n^{(\pm)} \widetilde{\Psi}_k^{(\mp)} | \widetilde{\Psi}_l^{(\mp)}) + \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \widetilde{\Psi}_k^{(\mp)} | [\hat{H} - E] \widetilde{\Psi}_l^{(\mp)} \rangle. \quad (6.3.85)$$

Z własności (5.1.11) macierzy $\alpha_n^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho})$ wynika, że elementy macierzy $\widetilde{\mathbf{T}}^{(\pm)}(E)$ są w prosty sposób związane z elementami macierzy $\widetilde{\mathbf{S}}^{(\pm)}(E)$ zdefiniowanymi równaniem (6.3.66), zachodzą bowiem relacje

$$\widetilde{\mathbf{T}}_{kl}^{(\pm)}(E) = (\gamma^{(\mp)})^2 \widetilde{\mathcal{S}}_{kl}^{(\mp)}(E). \quad (6.3.86)$$

Oznacza to jednak (patrz równania (6.3.68) i (6.3.69)), że macierze $\widetilde{\mathbf{T}}^{(\pm)}(E)$ są diagonalne, a ich elementy są równe

$$\widetilde{\mathbf{T}}_{kl}^{(+)}(E) = [\widetilde{b}_k^{-1}(E)]^{-1} \delta_{kl}, \quad (6.3.87)$$

$$\widetilde{\mathbf{T}}_{kl}^{(-)}(E) = (\gamma^{(+)})^2 \widetilde{b}_k(E) \delta_{kl}. \quad (6.3.88)$$

Wynika stąd, że równania (6.3.84) można przepisać w następujących prostszych postaciach

$$\begin{aligned} (\Phi | \hat{\underline{\mathcal{B}}}^{(+)} \Phi') &\stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} (\Phi | i\alpha_n^{(+)} \tilde{\Psi}_k^{(-)} \widetilde{b}_k^{-1} (i\alpha_n^{(+)} \tilde{\Psi}_k^{(-)} | \Phi') \\ &= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{i,j=1}^N (\Phi | i\alpha_n^{(+)} \phi_i) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} \tilde{a}_{ik}^{(-)} \widetilde{b}_k^{-1} \tilde{a}_{jk}^{(-)*} \right] (i\alpha_n^{(+)} \phi_j | \Phi'), \end{aligned} \quad (6.3.89)$$

$$\begin{aligned} (\Phi | \hat{\underline{\mathcal{B}}}^{(-)} \Phi') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(+)}} (\Phi | i\alpha_n^{(-)} \tilde{\Psi}_k^{(+)} \widetilde{b}_k^{-1} (i\alpha_n^{(-)} \tilde{\Psi}_k^{(+)} | \Phi') \\ &= \sum_{i,j=1}^N (\Phi | i\alpha_n^{(-)} \phi_i) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(+)}} \tilde{a}_{ik}^{(+)} \widetilde{b}_k^{-1} \tilde{a}_{jk}^{(+)*} \right] (i\alpha_n^{(-)} \phi_j | \Phi'), \end{aligned} \quad (6.3.90)$$

z których wywnioskować można jawne wyrażenia dla jąder całkowych operatorów $\hat{\underline{\mathcal{B}}}^{(\pm)}(E)$

$$\begin{aligned} \tilde{\underline{\mathcal{B}}}^{(+)}(E, \rho, \rho') &\stackrel{\text{var}}{=} (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} \alpha_n^{(+)}(\rho) \tilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \rho) \widetilde{b}_k^{-1}(E) \tilde{\Psi}_k^{(-)\dagger}(E, \rho') \alpha_n^{(-)}(\rho') \\ &= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{i,j=1}^N \alpha_n^{(+)}(\rho) \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} \tilde{a}_{ik}^{(-)}(E) \widetilde{b}_k^{-1}(E) \tilde{a}_{jk}^{(-)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\rho') \alpha_n^{(-)}(\rho'), \end{aligned} \quad (6.3.91)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\underline{\mathcal{B}}}^{(-)}(E, \rho, \rho') &\stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(+)}} \alpha_n^{(-)}(\rho) \tilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \rho) \widetilde{b}_k^{-1}(E) \tilde{\Psi}_k^{(+)\dagger}(E, \rho') \alpha_n^{(+)}(\rho') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \alpha_n^{(-)}(\rho) \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(+)}} \tilde{a}_{ik}^{(+)}(E) \widetilde{b}_k^{-1}(E) \tilde{a}_{jk}^{(+)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\rho') \alpha_n^{(+)}(\rho'). \end{aligned} \quad (6.3.92)$$

Jak łatwo sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, jądra $\tilde{\underline{\mathcal{B}}}^{(\mp)}(E, \rho, \rho')$ związane są w następujący prosty sposób z jądrami $\tilde{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ zdefiniowanymi równaniami (6.3.72) i (6.3.73)

$$\tilde{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \tilde{\underline{\mathcal{B}}}^{(\mp)}(E, \rho, \rho') \alpha_n^{(\mp)}(\rho') \quad (6.3.93)$$

(porównaj (5.1.86)).

Stosując funkcje (6.3.83) w zasadach wariacyjnych dla elementów macierzowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ (podrozdział 6.1.3), otrzymujemy

$$(\Phi | \hat{\mathcal{R}}^{(\pm)} \Phi') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k,l=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)}} (\Phi | \beta^{(\pm)} \tilde{\Psi}_k^{(\mp)}) [(\tilde{\mathbf{S}}^{(\pm)})^{-1}]_{kl} (\beta^{(\pm)} \tilde{\Psi}_l^{(\mp)} | \Phi') \quad (6.3.94)$$

jako przybliżenia wartości elementów macierzowych $(\Phi | \hat{\mathcal{R}}^{(\pm)} \Phi')$ oraz

$$\tilde{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') \stackrel{\text{var}}{=} \sum_{k,l=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)}} \beta^{(\pm)} \tilde{\Psi}_k^{(\mp)}(E, \rho) [(\tilde{\mathbf{S}}^{(\pm)}(E))^{-1}]_{kl} \tilde{\Psi}_l^{(\mp)\dagger}(E, \rho') \beta^{(\pm)} \quad (6.3.95)$$

jako przybliżenia jąder całkowych operatorów $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$, przy czym $\tilde{\mathbf{S}}^{(\pm)}(E)$ są kwadratowymi, w ogólności niediagonalnymi, macierzami hermitowskimi o wymiarach $\text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)} \times \text{rank } \mathbf{M}^{(\mp)}$ z elementami

$$\tilde{S}_{kl}^{(\pm)}(E) = -\gamma^{(\mp)} (\tilde{\Psi}_k^{(\mp)} | i\alpha_n^{(\pm)} \tilde{\Psi}_l^{(\mp)}) - \frac{\gamma^{(\mp)}}{c\hbar} \langle \tilde{\Psi}_k^{(\mp)} | [\hat{H} - E] \tilde{\Psi}_l^{(\mp)} \rangle = (\gamma^{(\mp)})^2 \tilde{T}_{kl}^{(\mp)}(E). \quad (6.3.96)$$

Druga równość we wzorze (6.3.96) jest konsekwencją definicji (6.3.76).

Operatory $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ można również aproksymować “niewariacyjnymi” operatorami $\tilde{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ o jądrach odpowiednio

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}^{(+)}(E, \rho, \rho') &= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(-)}} \alpha_n^{(+)}(\rho) \tilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \rho) [\widetilde{b_k^{-1}}(E)]^3 \tilde{\Psi}_k^{(-)\dagger}(E, \rho') \alpha_n^{(-)}(\rho') \\ &= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{i,j=1}^N \alpha_n^{(+)}(\rho) \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(-)}} \tilde{a}_{ik}^{(-)}(E) [\widetilde{b_k^{-1}}(E)]^3 \tilde{a}_{jk}^{(-)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\rho') \alpha_n^{(-)}(\rho') \end{aligned} \quad (6.3.97)$$

oraz

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}^{(-)}(E, \rho, \rho') &= \sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(+)}} \alpha_n^{(-)}(\rho) \tilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \rho) \tilde{b}_k(E) \tilde{\Psi}_k^{(+)\dagger}(E, \rho') \alpha_n^{(+)}(\rho') \\ &= \sum_{i,j=1}^N \alpha_n^{(-)}(\rho) \phi_i(\rho) \left[\sum_{k=1}^{\text{rank } \mathbf{M}^{(+)}} \tilde{a}_{ik}^{(+)}(E) \tilde{b}_k(E) \tilde{a}_{jk}^{(+)*}(E) \right] \phi_j^\dagger(\rho') \alpha_n^{(+)}(\rho') \end{aligned} \quad (6.3.98)$$

(porównaj (5.1.84) i (5.1.85)). Jądra całkowe $\tilde{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$ są powiązane z jądrami $\mathfrak{B}^{(\mp)}(E, \rho, \rho')$, zdefiniowanymi równaniami (6.3.80) i (6.3.79), poprzez relacje

$$\tilde{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E, \rho, \rho') = \alpha_n^{(\pm)}(\rho) \mathfrak{B}^{(\mp)}(E, \rho, \rho') \alpha_n^{(\mp)}(\rho') \quad (6.3.99)$$

(porównaj (5.1.86) i (6.3.93)). Ponadto, jądra $\tilde{\mathfrak{X}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ są “odwrotne” do jąder $\tilde{\mathfrak{L}}^{(\pm)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ w sensie równań

$$\begin{aligned} \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}'' \tilde{\mathfrak{X}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \tilde{\mathfrak{L}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') &= \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}'' \tilde{\mathfrak{L}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \tilde{\mathfrak{X}}^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') \\ &= (\gamma^{(-)})^2 \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(-)}} \alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho}) \tilde{\Psi}_k^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}) [\widetilde{b_k^{-1}}(E)]^2 \tilde{\Psi}_k^{(-)\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}') \alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho}'), \end{aligned} \quad (6.3.100)$$

$$\begin{aligned} \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}'' \tilde{\mathfrak{X}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \tilde{\mathfrak{L}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') &= \int_S d^2 \boldsymbol{\rho}'' \tilde{\mathfrak{L}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'') \tilde{\mathfrak{X}}^{(-)}(E, \boldsymbol{\rho}'', \boldsymbol{\rho}') \\ &= \sum_{k=1}^{\text{rank } M^{(+)}} \alpha_n^{(-)}(\boldsymbol{\rho}) \tilde{\Psi}_k^{(+)}(E, \boldsymbol{\rho}) \tilde{\Psi}_k^{(+)\dagger}(E, \boldsymbol{\rho}') \alpha_n^{(+)}(\boldsymbol{\rho}') \end{aligned} \quad (6.3.101)$$

(porównaj (5.1.77), (5.1.64) oraz (5.1.65)).

Rozdział 7

ZAKOŃCZENIE

W trakcie prac nad zastosowaniem metody R -macierzy do opisu zderzeń elektronów z ciężkimi atomami i jonami atomowymi, autor doszedł do nieoczekiwanego wniosku, że istnieją poważne luki w sformułowaniu metody dla równania Diraca oraz, do pewnego stopnia, również dla równania Schrödingera. W tej sytuacji autor postawił sobie za cel rewizję metody R -macierzy dla rozpraszania potencjalnego i podanie jej systematycznego sformułowania od podstaw z wykorzystaniem formalizmu teorii operatorów całkowych. Przedstawiona Czytelnikowi rozprawa, oparta na serii prac autora [121–125], poświęcona jest prezentacji wyników otrzymanych w trakcie realizacji tego programu.

Zastosowanie aparatu matematycznego teorii operatorów całkowych pozwoliło na sformułowanie metody R -macierzy dla równań Schrödingera i Diraca w przypadku objętości reakcji o dowolnym kształcie. Wbrew wcześniejszym twierdzeniom Rosenthala [50], udowodniono, że możliwe jest wykorzystanie metody Kapura–Peierlsa–Wignera do skonstruowania rozwinięć liniowych zarówno jądra całkowego R -operatora $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$ występującego w teorii nierelatywistycznej, jak również jąder całkowych R -operatorów $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ pojawiających się w analogicznej teorii dla równania Diraca. Pokazano, że, ze względu na różnice w strukturze matematycznej pomiędzy równaniami Schrödingera i Diraca, wyniki otrzymane dla operatorów $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$ i $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ różnią się obecnością dodatkowego członu w rozwinięciach jąder całkowych $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E, \rho, \rho')$. Brak macierzowej reprezentacji tego członu, znikającego w granicy nierelatywistycznej, był przyczyną błędów we wcześniejszych sformułowaniach metody R -macierzy dla równania Diraca podanych przez Goertzela [49] i Changa [52].

Dużo miejsca w rozprawie poświęcono konstrukcji zasad wariacyjnych związanych z metodą R -macierzy dla równań Schrödingera i Diraca. Stosując metodę opisaną przez Gerjuoya, Rau i Sprucha [48], w sposób jednolity wyprowadzono szesnaście zasad wariacyjnych, w tym jedenaście nowych. Jeden z rozdziałów rozprawy poświęcono omówieniu możliwości wykorzystania w wyprowadzonych zasadach wariacyjnych liniowych funkcji próbnych typu Rayleigha–Ritza do aproksymacji wartości własnych, elementów macierzowych oraz jąder całkowych operatorów stosowanych w teorii R -macierzy.

Wydaje się, że spośród szeregu wyników przedstawionych przez autora w rozprawie oraz w serii prac [121–125, 147], w najbliższej przyszłości bezpośrednio zastosowanie praktyczne znajdą przede wszystkim rezultaty dotyczące zasad wariacyjnych związanych z metodą R -macierzy. Autor pracuje obecnie nad sformulowaniem odpowiedników zasad wariacyjnych z podrozdziałów 3.4 i 5.5 dla układów wieloelektronowych oraz nad zastosowaniem ich do opisu procesów towarzyszących zderzeniom elektronów z atomami.

Podziękowania

Pragnę wyrazić moją wdzięczność Profesorowi Eugeniuszowi Czuchajowi oraz Profesorowi Czesławowi Szmytkowskiemu za wieloletnią opiekę naukową.

Składam podziękowania Profesorowi Czesławowi Szmytkowskiemu, Profesorowi Jürgenowi Hinzemu, Profesorowi Williamowi E. Baylisowi oraz Doktorowi Dirkowi Andrae za uwagi i komentarze, które przyczyniły się do nadania ostatecznego kształtu całości rozprawy lub jej poszczególnym częściom.

Dziękuję obu recenzentom — Doktorowi hab. Ryszardowi Horodeckiemu oraz Profesorowi Józefowi E. Sienkiewiczowi, a także Profesorowi Czesławowi Szmytkowskiemu oraz Jędrzejowi Szmytkowskiemu, za krytyczne uwagi dotyczące maszynopisu rozprawy.

Dziękuję mojej Żonie Beacie, Córcie Marysi, Rodzicom i Teściom oraz Koleżance i Kolegom z Zespołu Fizyki Atomowej za wsparcie, wyrozumiałość i cierpliwość.

Badania, wynikiem których jest rozprawa, były finansowane przez Komitet Badań Naukowych w ramach grantu nr 950/P03/97/12, przez Politechnikę Gdańską i Uniwersytet Gdański, przez Fundację Alexandra von Humboldta w ramach stypendium przyznanego na pobyt na Uniwersytecie w Bielefeld oraz przez Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada w ramach stypendium NATO przyznanego na pobyt na Uniwersytecie w Windsor. Wszystkim wymienionym instytucjom dziękuję za okazaną pomoc.

UZUPEŁNIENIA

A Funkcje delta Diraca

Niech $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^3$ będzie skończoną objętością ograniczoną powierzchnią \mathcal{S} . Przyjmujemy, że \mathbf{r} oznacza wektor położenia punktu należącego do wnętrza obszaru \mathcal{V} , a $\boldsymbol{\rho}$ jest wektorem położenia punktu znajdującego się na powierzchni \mathcal{S} . Infinitesimalny element objętości \mathcal{V} wokół punktu \mathbf{r} oznaczamy przez $d^3\mathbf{r}$, a *skalny* infinitesimalny element powierzchni \mathcal{S} wokół punktu $\boldsymbol{\rho}$ przez $d^2\boldsymbol{\rho}$. Wprowadzamy rodzinę funkcji delta Diraca $\delta_s^{(1)}(\mathbf{r})$, $\delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')$ i $\delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ takich, że dla dowolnej odpowiednio regularnej skalarnej lub spinorowej funkcji $\Phi(\mathbf{r})$ zachodzi

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \delta_s^{(1)}(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho} \Phi(\boldsymbol{\rho}), \quad (\text{A.1})$$

$$\int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho}' \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho}'-\boldsymbol{\rho})\Phi(\boldsymbol{\rho}') = \Phi(\boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (\text{A.2})$$

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r}' \delta^{(3)}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}') = \Phi(\mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}). \quad (\text{A.3})$$

W całej pracy przyjmujemy, że całkowanie po objętości \mathcal{V} obejmuje również powierzchnię \mathcal{S} . Wynika stąd, że w szczególnym przypadku, gdy punkt \mathbf{r} leży na powierzchni \mathcal{S} (czyli, gdy $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}$), mamy

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r}' \delta^{(3)}(\mathbf{r}'-\boldsymbol{\rho})\Phi(\mathbf{r}') = \Phi(\boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (\text{A.4})$$

Z równań (A.1), (A.2) oraz (A.4) można wywnioskować, że formalnie (w sensie dystrybucyjnym) zachodzą równości

$$\delta^{(3)}(\mathbf{r}'-\boldsymbol{\rho}) = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho}'-\boldsymbol{\rho})\delta_s^{(1)}(\mathbf{r}'), \quad \delta_s^{(1)}(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{S}} d^2\boldsymbol{\rho}' \delta^{(3)}(\boldsymbol{\rho}'-\mathbf{r}). \quad (\text{A.5})$$

B Dowód zupełności układów funkcji własnych operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ dla zagadnień o symetrii sferycznej

Pokażemy poniżej, że jeżeli potencjał \hat{V} jest lokalny i sferycznie symetryczny, to znaczy

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(r) \delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad (\text{B.1})$$

i jeżeli powierzchnia \mathcal{S} jest sferą o promieniu ρ i środku w centrum potencjału, $\mathcal{S} = \mathcal{S}_\rho$, wówczas funkcje własne operatora $\hat{B}(E)$ stanowią bazę w przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S}_\rho)$, a funkcje własne operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ stanowią bazy w przestrzeniach $L^2_{(1)}^{(\pm)}(\mathcal{S}_\rho)$.

Przy powyższych założeniach równanie Schrödingera (3.1.4) separuje się we współrzędnych sferycznych i ma rozwiązania szczególne postaci

$$\Psi_{lm_l}(E, \mathbf{r}) = F_l(E, r) i^l Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (\text{B.2})$$

gdzie $F_l(E, r)$ jest rzeczywistą funkcją zależną jedynie od odległości od centrum potencjału, a $Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})$ jest jedną z harmonik sferycznych. Jeżeli unormujemy funkcję radialną w taki sposób, aby

$$F_l(E, \rho) = \frac{1}{\rho}, \quad (\text{B.3})$$

wówczas z własności ortonormalności harmonik sferycznych na sferze jednostkowej wynika, że funkcje powierzchniowe

$$\Psi_{lm_l}(E, \boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{\rho} i^l Y_{lm_l}(\hat{\boldsymbol{\rho}}), \quad (\text{B.4})$$

gdzie

$$\hat{\boldsymbol{\rho}} \equiv \hat{\mathbf{r}}|_{r=\rho} = \mathbf{n}(\boldsymbol{\rho}), \quad (\text{B.5})$$

tworzą układ ortonormalny względem powierzchniowego iloczynu skalarnego (|) na sferze \mathcal{S}_ρ

$$(\Psi_{lm_l} | \Psi_{l'm_l'}) = \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'}. \quad (\text{B.6})$$

Na mocy zupełności harmonik sferycznych na sferze jednostkowej, układ ten jest również zupełny w przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S}_\rho)$

$$\sum_{lm_l} \Psi_{lm_l}(E, \boldsymbol{\rho}) \Psi_{lm_l}^*(E, \boldsymbol{\rho}') = \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'). \quad (\text{B.7})$$

Wykażemy, że funkcje (B.4) są funkcjami własnymi operatora $\hat{B}(E)$. Rzeczywiście, ponieważ powierzchnia \mathcal{S}_ρ jest sferą, pochodna normalna ∇_n jest pochodną radialną obliczoną przy $r = \rho$ i mamy

$$\nabla_n \Psi_{lm_l}(E, \boldsymbol{\rho}) \equiv \nabla_n [F_l(E, r) i^l Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}})]_{r=\rho} = \frac{dF_l(E, r)}{dr} \Big|_{r=\rho} i^l Y_{lm_l}(\hat{\boldsymbol{\rho}}). \quad (\text{B.8})$$

Pochodna logarytmiczna funkcji $\Psi_{lm_l}(E, \mathbf{r})$ na powierzchni sfery \mathcal{S}_ρ ,

$$\frac{1}{\Psi_{lm_l}(E, \boldsymbol{\rho})} \nabla_n \Psi_{lm_l}(E, \boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{F_l(E, \rho)} \frac{dF_l(E, r)}{dr} \Big|_{r=\rho}, \quad (\text{B.9})$$

jest stała, gdyż prawa strona powyższego równania nie zależy od położenia punktu $\boldsymbol{\rho}$ na sferze. Stałość pochodnej normalnej oznacza jednak (patrz dyskusja następująca po równaniu (3.1.16)), że każda z funkcji powierzchniowych (B.4) jest funkcją własną operatora $\hat{B}(E)$ dla sfery \mathcal{S}_ρ i potencjału (B.1). Stąd oraz z równań (B.6) i (B.7) wynika, że funkcje własne operatora $\hat{B}(E)$ tworzą bazę na powierzchni \mathcal{S}_ρ .

Przejdźmy do omówienia analogicznego problemu dla równania Diraca. Przy założeniach poczynionych na początku tego uzupełnienia, równanie (5.1.17) separuje się we współrzędnych sferycznych i ma rozwiązania szczególne postaci

$$\Psi_{\kappa m_j}(E, \mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_\kappa(E, r) i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \\ G_\kappa(E, r) i^{l+1} \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (\text{B.10})$$

gdzie $F_\kappa(E, r)$ i $G_\kappa(E, r)$ są rzeczywistymi funkcjami radialnymi, a $\Omega_{\pm\kappa m_j}(\hat{\mathbf{r}})$ są spinorami sferycznymi. Jeżeli unormujemy funkcję radialną $F_\kappa(E, r)$ w taki sposób, by

$$F_\kappa(E, \rho) = \frac{1}{\rho}, \quad (\text{B.11})$$

z ortonormalności spinorów sferycznych na sferze jednostkowej wynika, że funkcje powierzchniowe

$$\beta^{(+)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) = \frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\rho}) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.12})$$

tworzą układ ortonormalny względem powierzchniowego iloczynu skalarnego (1) na sferze \mathcal{S}_ρ

$$(\beta^{(+)} \Psi_{\kappa m_j} | \beta^{(+)} \Psi_{\kappa' m'_j}) = \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{m_j m'_j}. \quad (\text{B.13})$$

Z zupełności spinorów sferycznych w przestrzeni funkcji dwuskładnikowych określonych na sferze jednostkowej wynika natychmiast zupełność układu funkcji $\{\beta^{(+)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho)\}$ w przestrzeni $L^2_{(1)}(\mathcal{S}_\rho)$

$$\sum_{\kappa m_j} \beta^{(+)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) \Psi_{\kappa m_j}^\dagger(E, \rho') \beta^{(+)} = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(+)}. \quad (\text{B.14})$$

Udowodnimy, że funkcje (B.12) są funkcjami własnymi operatora $\hat{\mathcal{B}}^{(+)}(E)$. Połączymy macierz

$$i\alpha_n^{(+)}(\rho) = \begin{pmatrix} O & i\sigma_n(\rho) \\ O & O \end{pmatrix}, \quad (\text{B.15})$$

gdzie

$$\sigma_n(\rho) = \mathbf{n}(\rho) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hat{\rho} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{B.16})$$

na funkcje $\{\Psi_{\kappa m_j}(E, \rho)\}$ zdefiniowane równaniem (B.10). Mamy

$$i\alpha_n^{(+)}(\rho) \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) = \begin{pmatrix} -G_\kappa(E, \rho) \sigma_n(\rho) i^l \Omega_{-\kappa m_j}(\hat{\rho}) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.17})$$

Korzystając z następującej własności spinorów sferycznych

$$\hat{\rho} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Omega_{\pm\kappa m_j}(\hat{\rho}) = -\Omega_{\mp\kappa m_j}(\hat{\rho}), \quad (\text{B.18})$$

otrzymujemy

$$i\alpha_n^{(+)}(\rho) \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) = \begin{pmatrix} G_\kappa(E, \rho) i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\rho}) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.19})$$

Zdefiniujemy wielkość

$$b_\kappa(E, \rho) = -\gamma^{(-)} \frac{G_\kappa(E, \rho)}{F_\kappa(E, \rho)} = -\gamma^{(+)} \rho G_\kappa(E, \rho), \quad (\text{B.20})$$

która dla danej sfery \mathcal{S}_ρ jest stała (nie zależy od położenia punktu ρ na sferze). Zgodnie z tą definicją, z równania (B.12) mamy

$$\gamma^{(+)} b_\kappa(E, \rho) \beta^{(+)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) = \begin{pmatrix} G_\kappa(E, \rho) i^l \Omega_{\kappa m_j}(\hat{\rho}) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.21})$$

Porównując (B.19) z (B.21), dostajemy

$$i\alpha_n^{(+)}(\rho) \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) = \gamma^{(+)} b_\kappa(E, \rho) \beta^{(+)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho). \quad (\text{B.22})$$

Z równań (B.22), (5.1.23) i (5.1.30) wynika, że funkcje $\{\beta^{(+)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho)\}$ są funkcjami własnymi operatora $\hat{B}^{(+)}(E)$, a liczby $\{b_\kappa(E, \rho)\}$ są odpowiadającymi im ($2|\kappa|$ -krotnie zdegenerowanymi ze względu na m_j) wartościami własnymi. Stąd oraz z równań (B.13) i (B.14) wnioskujemy, że funkcje własne operatora $\hat{B}^{(+)}(E)$ tworzą bazę w przestrzeni $L_{(1)}^{2(+)}(\mathcal{S}_\rho)$.

Przemnożmy równanie (B.22) z lewej strony przez macierz $\alpha_n^{(-)}(\rho)$. Po przekształceniach otrzymujemy

$$i\alpha_n^{(-)}(\rho) \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) = \gamma^{(-)} b_\kappa^{-1}(E, \rho) \beta^{(-)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho). \quad (\text{B.23})$$

Stąd oraz z równań (5.1.23) i (5.1.30) wnioskujemy, że funkcje $\{\beta^{(-)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho)\}$ są funkcjami własnymi operatora $\hat{B}^{(-)}(E)$, a liczby $\{b_\kappa^{-1}(E, \rho)\}$ są odpowiadającymi im wartościami własnymi. Stosując równania (5.1.11), (5.1.13), (5.1.15) oraz (B.23), można przekształcić równanie (B.13) do postaci

$$(\gamma^{(-)})^2 b_\kappa^{-2}(E, \rho) (\beta^{(-)} \Psi_{\kappa m_j} | \beta^{(-)} \Psi_{\kappa' m'_j}) = \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{m_j m'_j}. \quad (\text{B.24})$$

Działając z kolei na równanie (B.14) z lewej strony macierzą $\alpha_n^{(-)}(\rho)$, z prawej zaś macierzą $\alpha_n^{(+)}(\rho')$, po skorzystaniu z równania (B.23) otrzymujemy

$$(\gamma^{(-)})^2 \sum_{\kappa m_j} \beta^{(-)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho) b_\kappa^{-2}(E, \rho) \Psi_{\kappa m_j}^\dagger(E, \rho') \beta^{(-)} = \delta^{(2)}(\rho - \rho') \beta^{(-)}. \quad (\text{B.25})$$

Z równań (B.24) i (B.25) wynika, że funkcje $\{\beta^{(-)} \Psi_{\kappa m_j}(E, \rho)\}$ stanowią bazę ortogonalną w przestrzeni $L_{(1)}^{2(-)}(\mathcal{S}_\rho)$.

Załóżmy teraz, że deformujemy stopniowo powierzchnię \mathcal{S} i zmieniamy potencjał \hat{V} . Jeżeli obie zmiany odbywają się w sposób ciągły i odpowiednio gładki, to funkcje własne dla przypadku sferycznie symetrycznego (dokładniej — ich kombinacje liniowe ze względu na m_l lub m_j) powinny w sposób ciągły przechodzić w funkcje własne $\Psi_i(E, \rho)$ operatorów $\hat{B}(E)$ lub $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ dla zdeformowanej powierzchni \mathcal{S} i zmodyfikowanego potencjału \hat{V} . Wydaje się naturalnym oczekiwać, że własność zupełności funkcji powierzchniowych przy takiej stopniowej zmianie powinna zostać zachowana.

C Zależność wartości własnych operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ od energii

Hamacher [38] wykazał, że wartości własne operatora $\hat{B}(E)$ są monotonicznie malejącymi funkcjami energii E w przedziałach rozdzielających ich bieguny. Poniżej przytoczymy, z drobnymi zmianami, dowód podany przez Hamachera, a następnie w analogiczny sposób pokażemy, że wartości własne operatora $\hat{B}^{(+)}(E)$ (odpowiednio $\hat{B}^{(-)}(E)$) są przedziałami monotonicznie malejącymi (rosnącymi) funkcjami energii.

Niech $\Psi_i(E, \mathbf{r})$ będzie rozwiązaniem równania Schrödingera

$$[\hat{H} - E]\Psi_i(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (\text{C.1})$$

dla rzeczywistej energii E , spełniającym na powierzchni \mathcal{S} warunek brzegowy

$$\nabla_n \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) = b_i(E) \Psi_i(E, \boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}), \quad (\text{C.2})$$

i niech $\Psi_i(E', \mathbf{r})$ będzie rozwiązaniem analogicznego równania Schrödingera

$$[\hat{H} - E']\Psi_i(E', \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) \quad (\text{C.3})$$

dla rzeczywistej energii $E' \neq E$, spełniającym na powierzchni \mathcal{S} warunek brzegowy

$$\nabla_n \Psi_i(E', \boldsymbol{\rho}) = b_i(E') \Psi_i(E', \boldsymbol{\rho}) \quad (\boldsymbol{\rho} \in \mathcal{S}). \quad (\text{C.4})$$

Hamiltonian \hat{H} został zdefiniowany równaniem (3.1.5). Z równań (C.1)–(C.4) wynika, że funkcje $\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})$ oraz $\Psi_i(E', \boldsymbol{\rho})$ są funkcjami własnymi operatorów odpowiednio $\hat{B}(E)$ oraz $\hat{B}(E')$ z wartościami własnymi $b_i(E)$ oraz $b_i(E')$. W dalszym ciągu będziemy zakładali, jak sugeruje to użyta przez nas notacja, że

$$\lim_{E' \rightarrow E} \Psi_i(E', \mathbf{r}) = \Psi_i(E, \mathbf{r}), \quad \lim_{E' \rightarrow E} b_i(E') = b_i(E). \quad (\text{C.5})$$

Zwracamy przy tym uwagę, że żadne z równań składających się na wzór (C.5) nie wynika z równań (C.1)–(C.4); obie relacje (C.5) stanowią *dodatkowe* założenia. Dzieje się tak dlatego, gdyż, w ogólności: (i) operator $\hat{B}(E)$ ma nieskończenie wiele wartości własnych, (ii) wartości własne operatora $\hat{B}(E)$ mogą być zdegenerowane.

Przemnożmy równanie (C.1) przez $\Psi_i^*(E', \mathbf{r})$, sprzężenie zespolone równania (C.3) przez $\Psi_i(E, \mathbf{r})$, odejmijmy wynikające stąd równania stronami i scałkujmy rezultat po objętości \mathcal{V} . Otrzymujemy

$$\langle \hat{H} \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle - \langle \Psi_i(E') | \hat{H} \Psi_i(E) \rangle = [E' - E] \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle. \quad (\text{C.6})$$

Wykorzystując definicję (3.1.5) hamiltonianu \hat{H} oraz stosując twierdzenie całkowe Greena, dostajemy

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi_i(E') | \nabla_n \Psi_i(E)) - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_n \Psi_i(E') | \Psi_i(E)) = [E' - E] \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle. \quad (\text{C.7})$$

Biorąc pod uwagę warunki brzegowe (C.2) i (C.4) oraz własność rzeczywistości wartości własnych operatorów $\hat{B}(E)$ i $\hat{B}(E')$, możemy przekształcić lewą stronę równania (C.7), otrzymując w wyniku

$$\frac{\hbar^2}{2m} [b_i(E) - b_i(E')] (\Psi_i(E') | \Psi_i(E)) = [E' - E] \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle. \quad (C.8)$$

Dzieląc obie strony tego równania przez $(\hbar^2/2m)(E - E') (\Psi_i(E') | \Psi_i(E))$, dostajemy

$$\frac{b_i(E') - b_i(E)}{E' - E} = -\frac{2m \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle}{\hbar^2 (\Psi_i(E') | \Psi_i(E))}, \quad (C.9)$$

skąd, dokonując przejścia granicznego $E' \rightarrow E$, znajdujemy, że

$$\frac{db_i(E)}{dE} = -\frac{2m \langle \Psi_i(E) | \Psi_i(E) \rangle}{\hbar^2 (\Psi_i(E) | \Psi_i(E))}. \quad (C.10)$$

Ponieważ licznik ułamka stojącego po prawej stronie jest na pewno dodatni, zaś jego mianownik nieujemny (mianownik prawej strony równania (C.10) zeruje się dla tych energii E , dla których $b_i(E) = \pm\infty$, gdyż wówczas, jak wynika z równania (C.2), $\forall \rho \in \mathcal{S}: \Psi_i(E, \rho) = 0$), z równania (C.10) wnioskujemy, że

$$\frac{db_i(E)}{dE} < 0 \quad (b_i(E) \neq \pm\infty), \quad (C.11)$$

co oznacza, że wartość własna $b_i(E)$ jest monotonicznie malejącą (od $+\infty$ do $-\infty$) funkcją energii w przedziałach rozdzielających bieguny tej funkcji.

Mnożąc równanie (C.10) obustronnie przez $-b_i^{-2}(E)$ i korzystając z zasad różniczkowania funkcji złożonej oraz z warunku brzegowego (C.2), znajdujemy, że

$$\frac{db_i^{-1}(E)}{dE} = \frac{2m \langle \Psi_i(E) | \Psi_i(E) \rangle}{\hbar^2 (\nabla_n \Psi_i(E) | \nabla_n \Psi_i(E))} > 0 \quad (C.12)$$

w przedziałach rozdzielających miejsca zerowe funkcji $b_i(E)$.

Przejdziemy do analizy zależności energetycznych wartości własnych operatorów $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ wykorzystywanych w relatywistycznej teorii R -macierzy. Niech $\Psi_i(E, \mathbf{r})$ oraz $\Psi_i(E', \mathbf{r})$ będą odpowiednio rozwiązaniami równań Diraca

$$[\hat{H} - E] \Psi_i(E, \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (C.13)$$

$$[\hat{H} - E'] \Psi_i(E', \mathbf{r}) = 0 \quad (\mathbf{r} \in \mathcal{V}), \quad (C.14)$$

gdzie \hat{H} jest hamiltonianem zdefiniowanym równaniem (5.1.18), czyniącymi zadość następującym warunkom brzegowym na powierzchni \mathcal{S}

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \Psi_i(E, \rho) = \gamma^{(\pm)} b_i^{\pm 1}(E) \beta^{(\pm)} \Psi_i(E, \rho) \quad (\rho \in \mathcal{S}), \quad (C.15)$$

$$i\alpha_n^{(\pm)}(\rho) \Psi_i(E', \rho) = \gamma^{(\pm)} b_i^{\pm 1}(E') \beta^{(\pm)} \Psi_i(E', \rho) \quad (\rho \in \mathcal{S}) \quad (C.16)$$

i niech

$$\lim_{E' \rightarrow E} \Psi_i(E', \mathbf{r}) = \Psi_i(E, \mathbf{r}), \quad \lim_{E' \rightarrow E} b_i(E') = b_i(E) \quad (\text{C.17})$$

(patrz uwaga następująca po równaniu (C.5)). Z równań (C.13)–(C.16) wynika, że funkcje $\Psi_i(E, \boldsymbol{\rho})$ oraz $\Psi_i(E', \boldsymbol{\rho})$ są funkcjami własnymi operatorów odpowiednio $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ oraz $\hat{B}^{(\pm)}(E')$ z wartościami własnymi $b_i^{\pm 1}(E)$ oraz $b_i^{\pm 1}(E')$.

Mnożąc równanie (C.13) z lewej strony przez $\Psi_i^\dagger(E', \mathbf{r})$, macierzowe sprzężenie hermitowskie równania (C.14) z prawej strony przez $\Psi_i(E, \mathbf{r})$, odejmując otrzymane równania stronami i całkując następnie wynik po objętości \mathcal{V} , dostajemy

$$\langle \hat{H} \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle - \langle \Psi_i(E') | \hat{H} \Psi_i(E) \rangle = [E' - E] \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle. \quad (\text{C.18})$$

Uwzględnienie definicji (5.1.18) hamiltonianu \hat{H} oraz zastosowanie twierdzenia Gaussa przekształca równanie (C.18) do postaci

$$(\Psi_i(E') | i c \hbar \alpha_n \Psi_i(E)) = [E' - E] \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle. \quad (\text{C.19})$$

Korzystając z równań (5.1.10) i (5.1.11), możemy przepisać równanie (C.19) w następujący sposób

$$(\Psi_i(E') | i c \hbar \alpha_n^{(\pm)} \Psi_i(E)) - (i c \hbar \alpha_n^{(\pm)} \Psi_i(E') | \Psi_i(E)) = [E' - E] \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle. \quad (\text{C.20})$$

Biorąc pod uwagę warunki brzegowe (C.15) oraz (C.16), z równania (C.20) dostajemy

$$c \hbar \gamma^{(\pm)} [b_i^{\pm 1}(E) - b_i^{\pm 1}(E')] (\Psi_i(E') | \beta^{(\pm)} \Psi_i(E)) = [E' - E] \langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle, \quad (\text{C.21})$$

a następnie

$$\frac{b_i^{\pm 1}(E') - b_i^{\pm 1}(E)}{E' - E} = \frac{\gamma^{(\mp)}}{c \hbar} \frac{\langle \Psi_i(E') | \Psi_i(E) \rangle}{(\Psi_i(E') | \beta^{(\pm)} \Psi_i(E))}. \quad (\text{C.22})$$

Przechodząc w równaniu (C.22) do granicy $E' \rightarrow E$, otrzymujemy

$$\frac{db_i^{\pm 1}(E)}{dE} = \frac{\gamma^{(\mp)}}{c \hbar} \frac{\langle \Psi_i(E) | \Psi_i(E) \rangle}{(\Psi_i(E) | \beta^{(\pm)} \Psi_i(E))}. \quad (\text{C.23})$$

Licznik ułamka po prawej stronie powyższego równania jest dodatni, a jego mianownik nieujemny. Stąd oraz z faktu, że $\gamma^{(-)} < 0$ i $\gamma^{(+)} > 0$, wnioskujemy, iż

$$\frac{db_i(E)}{dE} < 0 \quad (\text{C.24})$$

w przedziałach rozdzielających bieguny funkcji $b_i(E)$ oraz

$$\frac{db_i^{-1}(E)}{dE} > 0 \quad (\text{C.25})$$

w przedziałach rozdzielających miejsca zerowe funkcji $b_i(E)$.

D Pewne własności wyznaczników

Załóżmy, że kwadratowa macierz M o wymiarach $N \times N$ została podzielona na cztery podmacierze A , B , C i D w następujący sposób

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad (\text{D.1})$$

przy czym A i D są macierzami kwadratowymi o wymiarach odpowiednio $m \times m$ i $n \times n$, a B i C są macierzami prostokątnymi o wymiarach odpowiednio $n \times m$ i $m \times n$. Zachodzi oczywiście $0 < m, n < N$ oraz $m+n = N$. Przyjmijmy, że macierz A jest nieosobliwa i w związku z tym istnieje macierz odwrotna do niej. Naszym zadaniem jest znalezienie wyznacznika macierzy M . W tym celu zauważmy, że dla wyznacznika macierzy górnej trójkątnej

$$N = \begin{pmatrix} I_m & X \\ 0 & I_n \end{pmatrix}, \quad (\text{D.2})$$

gdzie I_m i I_n są macierzami jednostkowymi o wymiarach odpowiednio $m \times m$ i $n \times n$, zachodzi

$$\det N = 1 \quad (\text{D.3})$$

niezależnie od postaci prostokątnej macierzy X o wymiarach $n \times m$. W konsekwencji, korzystając z dobrze znanego twierdzenia o wyznaczniku iloczynu macierzy, możemy zapisać

$$\begin{aligned} \det M &= \det M \cdot \det N = \det MN = \det \left\{ \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & X \\ 0 & I_n \end{pmatrix} \right\} \\ &= \det \begin{pmatrix} A & AX + B \\ C & CX + D \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Zauważmy, że otrzymane powyżej wyrażenie dla $\det M$ zawiera jako swobodny “parametr” macierz X , którą możemy dobrać według naszego uznania. Wykorzystamy ten fakt żądając, aby macierz X była rozwiązaniem równania

$$AX + B = 0, \quad (\text{D.5})$$

to znaczy

$$X = -A^{-1}B. \quad (\text{D.6})$$

Podstawiając tę szczególną postać macierzy X do równania (D.4), otrzymujemy

$$\det M = \det \begin{pmatrix} A & 0 \\ C & D - CA^{-1}B \end{pmatrix} = \det A \cdot \det (D - CA^{-1}B), \quad (\text{D.7})$$

gdzie ostatnia równość wynika ze znanej własności wyznaczników [148].

Rozważmy teraz szczególny przypadek, gdy $n = 1$. Wtedy A jest macierzą kwadratową o wymiarach $(N-1) \times (N-1)$, B jest $(N-1)$ -wyrazową macierzą

jednokolumnową, C jest $(N - 1)$ -wyrazową macierzą jednowierszową, a D jest macierzą kwadratową o wymiarach 1×1 , czyli po prostu liczbą. Jeśli $D = 0$, z równań (D.1) i (D.7) mamy

$$\det \begin{pmatrix} A & B \\ C & 0 \end{pmatrix} = \det A \cdot \det(-CA^{-1}B) = -(\det A) \cdot CA^{-1}B \quad (n = 1), \quad (\text{D.8})$$

przy czym w ostatniej równości pominęliśmy symbol wyznacznika “det”, korzystając z faktu, że $CA^{-1}B$ jest macierzą o wymiarach 1×1 , czyli liczbą. Z równania (D.8) wynika następująca relacja

$$CA^{-1}B = -\frac{\det \begin{pmatrix} A & B \\ C & 0 \end{pmatrix}}{\det A} \quad (n = 1), \quad (\text{D.9})$$

z której korzystaliśmy wyprowadzając równania (6.1.12), (6.1.13), (6.1.35), (6.1.43), (6.1.44) i (6.1.54).

BIBLIOGRAFIA

- [1] Kapur P. L., Peierls R.: *The dispersion formula for nuclear reactions*. Proc. R. Soc. London A 166 (1938) 277–95.
- [2] Wigner E. P.: *Resonance reactions and anomalous scattering*. Phys. Rev. 70 (1946) 15–33.
- [3] Wigner E. P.: *Resonance reactions*. Phys. Rev. 70 (1946) 606–18.
- [4] Wigner E. P., Eisenbud L.: *Higher angular momenta and long range interaction in resonance reactions*. Phys. Rev. 72 (1947) 29–41.
- [5] Teichmann T., Wigner E. P.: *Sum rules in the dispersion theory of nuclear reactions*. Phys. Rev. 87 (1952) 123–35.
- [6] Lane A. M., Thomas R. G.: *R-matrix theory of nuclear reactions*. Rev. Mod. Phys. 30 (1958) 257–353. (Тлумаченне росyjskie: Лейн А., Томас Р.: *Теория ядерных реакций при низких энергиях*. Москва: Издательство Иностранной Литературы 1960).
- [7] Breit G.: *Theory of resonance reactions and allied topics*. W: *Handbuch der Physik*. Vol. XLI/1. *Nuclear Reactions II: Theory*, red. S. Flügge. Berlin: Springer 1959. (Тлумаченне росyjskie: Брейт Г.: *Теория резонансных ядерных реакций*. Москва: Издательство Иностранной Литературы 1961). Część C.
- [8] Vogt E.: *Resonance reactions, theoretical*. W: *Nuclear Reactions*. Vol. 1, red. P. M. Endt, M. Demeur. Amsterdam: North-Holland 1959. Strony 215–58. (Тлумаченне росyjskie w: Эндт П. М., Демёр М. (ред.): *Ядерные реакции*. Том I. Москва: Госатомиздат 1962).
- [9] Burke P. G., Hibbert A.: *R-matrix theory of electron-atom collisions*. W: *The Physics of Electronic and Atomic Collisions*. VI International Conference, Cambridge, MA, USA, 1967. Abstracts. Cambridge, MA: MIT Press 1969. Strony 367–9.
- [10] Burke P. G., Hibbert A., Robb W. D.: *Electron scattering by complex atoms*. J. Phys. B 4 (1971) 153–61.
- [11] Berrington K. A., Burke P. G., Chang J. J., Chivers A. T., Robb W. D., Taylor K. T.: *A general program to calculate atomic continuum processes using the R-matrix method*. Comput. Phys. Commun. 8 (1974) 149–98.
- [12] Berrington K. A., Burke P. G., Le Dourneuf M., Robb W. D., Taylor K. T., Vo Ky Lan: *A new version of a general program to calculate atomic continuum processes using the R-matrix method*. Comput. Phys. Commun. 14 (1978) 367–412.
- [13] Scott N. S., Taylor K. T.: *A general program to calculate atomic continuum processes incorporating model potentials and the Breit–Pauli Hamiltonian within the R-matrix method*. Comput. Phys. Commun. 25 (1982) 349–89.
- [14] Berrington K. A., Eissner W. B., Norrington P. H.: *RMATRIX1: Belfast atomic R-matrix codes*. Comput. Phys. Commun. 92 (1995) 290–420.
- [15] Huo W. M., Gianturco F. A. (red.): *Computational Methods for Electron–Molecule Collisions*. Workshop on Comparative Study of Current Methodologies, Cambridge, MA, USA, 1993. New York: Plenum 1995.
- [16] Kohn W.: *Variational methods in nuclear collision problems*. Phys. Rev. 74 (1948) 1763–72.
- [17] Jackson J. L.: *A variational approach to nuclear reactions*. Phys. Rev. 83 (1951) 301–4.
- [18] Lane A. M., Robson D.: *Optimization of nuclear resonance reaction calculations*. Phys. Rev. 178 (1969) 1715–24.

- [19] Chatwin R. A.: *Resolution of a paradox in the variational formulation of nuclear-resonance reactions*. *Phys. Rev. C* 2 (1970) 1167–8.
- [20] Chatwin R. A., Purcell J. E.: *Approximate solution of a Sturm–Liouville system using nonorthogonal expansions: Application to α – α nuclear scattering*. *J. Math. Phys.* 12 (1971) 2024–30.
- [21] Schlessinger L., Payne G. L.: *Procedure for finding the scattering solutions of the Schrödinger equation*. *Phys. Rev. A* 10 (1974) 1559–67.
- [22] MacDonald W., Raphael R.: *Variational principle for the Bloch unified reaction theory*. *Phys. Rev. C* 14 (1976) 2044–9.
- [23] Nesbet R. K.: *R-matrix formalism for local cells of arbitrary geometry*. *Phys. Rev. B* 30 (1984) 4230–4.
- [24] Nesbet R. K.: *Variational methods for cellular models*. *Phys. Rev. A* 38 (1988) 4955–60.
- [25] Oberoi R. S., Nesbet R. K.: *Variational formulation of the R matrix method for multichannel scattering*. *Phys. Rev. A* 8 (1973) 215–9.
- [26] Oberoi R. S., Nesbet R. K.: *Addendum to “Variational formulation of the R-matrix method for multichannel scattering”*. *Phys. Rev. A* 9 (1974) 2804–5.
- [27] Zvijac D. J., Heller E. J., Light J. C.: *Variational correction to Wigner R-matrix theory of scattering*. *J. Phys. B* 8 (1975) 1016–33.
- [28] Shimamura I.: *R-matrix theory of atomic continuum processes*. *J. Phys. B* 10 (1977) 2597–618.
- [29] Crawford O. H.: *Variational methods for chemical and nuclear reactions*. *J. Math. Phys.* 18 (1977) 1241–55.
- [30] Nesbet R. K.: *Variational Methods in Electron–Atom Scattering Theory*. New York: Plenum 1980. Podrozdział 2.5.
- [31] Greene C. H.: *Atomic photoionization in a strong magnetic field*. *Phys. Rev. A* 28 (1983) 2209–16.
- [32] Greene C. H.: *Channel-interaction theory in a finite volume*. *Phys. Rev. A* 32 (1985) 1880–2.
- [33] Le Rouzo H., Raşeev G.: *Finite-volume variational method: First application to direct molecular photoionization*. *Phys. Rev. A* 29 (1984) 1214–23.
- [34] Raşeev G.: *On the finite volume variational method based on the logarithmic derivative of the wave function*. W: *Wavefunctions and Mechanisms from Electron Scattering Processes*, red. F. A. Gianturco, G. Stefani. *Lecture Notes in Chemistry* 35. Berlin: Springer 1984. Strony 98–102.
- [35] Raşeev G.: *Variational calculation of the logarithmic derivative of the wavefunction: the electronic autoionisation region in photoionisation of H_2* . *J. Phys. B* 18 (1985) 423–39.
- [36] Aymar M., Greene C. H., Luc-Koenig E.: *Multichannel Rydberg spectroscopy of complex atoms*. *Rev. Mod. Phys.* 68 (1996) 1015–123.
- [37] Hinze J., Hamacher P.: *Variation determination of optimal orbitals for electron scattering*. *J. Chem. Phys.* 92 (1990) 4372–3.
- [38] Hamacher P.: *Die R-Matrix-Eigenwert-Theorie. Resonanzen bei der Elektron-Atom-Streuung und der Photoionisation von Atomen*. Rozprawa doktorska. Fakultät für Chemie, Universität Bielefeld 1990.
- [39] Meyer K. W., Greene C. H., Bray I.: *Simplified model of electron scattering using R-matrix method*. *Phys. Rev. A* 52 (1995) 1334–43.
- [40] Altick P. L.: *Use of Dirichlet boundary conditions for electron–atom scattering*. *Phys. Rev. A* 38 (1988) 33–7 [Errata: 38 (1988) 5944].

- [41] Manolopoulos D. E., Wyatt R. E.: *Quantum scattering via the log derivative version of the Kohn variational principle*. *Chem. Phys. Lett.* 152 (1988) 23–32.
- [42] Manolopoulos D. E., D'Mello M., Wyatt R. E.: *Quantum reactive scattering via the log derivative version of the Kohn variational principle: General theory for bimolecular chemical reactions*. *J. Chem. Phys.* 91 (1989) 6096–102.
- [43] Meyer H.-D.: *The equivalence of the log derivative Kohn principle with the R-matrix method*. *Chem. Phys. Lett.* 223 (1994) 465–8.
- [44] Brown D., Light J. C.: *Kohn variational principle for a general finite-range scattering functional*. *J. Chem. Phys.* 101 (1994) 3723–8.
- [45] Jang H. W., Light J. C.: *A unified review of Bloch operator modified Kohn variational methods*. *Mol. Phys.* 89 (1996) 111–25.
- [46] Nesbet R. K.: *Nonadiabatic phase matrix method for vibrational excitation and dissociative attachment in electron-molecule scattering*. *Phys. Rev. A* 54 (1996) 2899–905.
- [47] Rau A. R. P.: informacja prywatna (1997). Profesor Rau poinformował mnie, że już w roku 1983 zwrócił uwagę Profesora Greene'a, iż zasada Kohna [16], na której opiera się wariacyjna metoda R -macierzy [31, 32], może być wyprowadzona przy zastosowaniu ogólnej procedury konstrukcji zasad wariacyjnych [48].
- [48] Gerjuoy E., Rau A. R. P., Spruch L.: *A unified formulation of the construction of variational principles*. *Rev. Mod. Phys.* 55 (1983) 725–74.
- [49] Goertzel G.: *Resonance reactions involving Dirac-type particles*. *Phys. Rev.* 73 (1948) 1463–6.
- [50] Rosenthal A. S.: *Non-existence of an R-matrix theory for the Dirac equation*. *J. Phys. G* 13 (1987) 491–3.
- [51] Halderson D.: *R-matrix theory for the Dirac equation*. *Nucl. Phys. A* 487 (1988) 647–52.
- [52] Chang J.-J.: *The R-matrix theory of electron-atom scattering using the Dirac Hamiltonian*. *J. Phys. B* 8 (1975) 2327–35.
- [53] Chang J.-J.: *Relativistic R-matrix theory of photoionisation: application to neon*. *J. Phys. B* 10 (1977) 3195–204.
- [54] Chang J.-J.: *Electron scattering by Ne^+ : a relativistic R-matrix calculation*. *J. Phys. B* 10 (1977) 3335–9.
- [55] Norrington P. H., Grant I. P.: *Electron scattering from $Ne II$ using the relativistic R-matrix method*. *J. Phys. B* 14 (1981) L261–7.
- [56] Grant I. P.: *Current developments in the relativistic quantum mechanics of atoms and molecules*. *Aust. J. Phys.* 39 (1986) 649–65.
- [57] Norrington P. H., Grant I. P.: *Low-energy electron scattering by $Fe XXIII$ and $Fe VII$ using the Dirac R-matrix method*. *J. Phys. B* 20 (1987) 4869–81.
- [58] Wijesundera W. P., Grant I. P., Norrington P. H., Parpia F. A.: *Electron scattering by $Se XXV$ (neon-like selenium) using the Dirac R-matrix method*. *J. Phys. B* 24 (1991) 1017–36.
- [59] Wijesundera W. P., Parpia F. A., Grant I. P., Norrington P. H.: *Electron scattering by $Kr XXIX$ (oxygen-like krypton) using the Dirac R-matrix method*. *J. Phys. B* 24 (1991) 1803–16.
- [60] Wijesundera W. P., Grant I. P., Norrington P. H.: *The $6s^2 6p$ and $6s6p^2$ resonances in electron scattering by neutral Hg* . *J. Phys. B* 25 (1992) 2143–63.
- [61] Wijesundera W. P., Grant I. P., Norrington P. H.: *The $6s^2 6p^3$ resonances in electron scattering by neutral Pb* . *J. Phys. B* 25 (1992) 2165–74.

- [62] Kisielius R., Berrington K. A., Norrington P. H.: *Relativistic study of electron-impact excitation of hydrogen-like ions*. *J. Phys. B* 28 (1995) 2459–71.
- [63] Kisielius R., Berrington K. A., Norrington P. H.: *Atomic data from the IRON Project. XV. Electron excitation of the fine-structure transitions in hydrogen-like ions He II and Fe XXVI*. *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 118 (1996) 157–62.
- [64] Ait-Tahar S., Grant I. P., Norrington P. H.: *Electron scattering by Fe XXII within the Dirac R-matrix approach*. *Phys. Rev. A* 54 (1996) 3984–9.
- [65] Ait-Tahar S., Grant I. P., Norrington P. H.: *Dirac R-matrix modeling of spin-induced asymmetry in the scattering of polarized electrons from polarized cesium atoms*. *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 2955–8.
- [66] Wijesundera W., Grant I., Norrington P.: *Electron scattering from atomic targets: application of Dirac R-matrix theory*. W: *Many-Body Atomic Physics*, red. J. J. Boyle, M. S. Pindzola. Cambridge: Cambridge University Press 1998. Strony 325–48.
- [67] Thumm U., Norcross D. W.: *Evidence for very narrow shape resonances in low-energy electron-Cs scattering*. *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 3495–8.
- [68] Thumm U., Norcross D. W.: *Relativistic R-matrix calculations for electron-alkali-metal-atom scattering: Cs as a test case*. *Phys. Rev. A* 45 (1992) 6349–70.
- [69] Thumm U., Norcross D. W.: *Angle-differential and momentum-transfer cross sections for low-energy electron-Cs scattering*. *Phys. Rev. A* 47 (1993) 305–16.
- [70] Thumm U.: *The Dirac R-matrix method for scattering of slow electrons from alkali-metal-like targets*. W: *The Physics of Electronic and Atomic Collisions. XVIII International Conference, Aarhus, Denmark, 1993*, red. T. Andersen, B. Fastrup, F. Folkmann, H. Knudsen, N. Andersen. *AIP Conf. Proc.* 295 (1993) 263–75.
- [71] Hamacher P., Hinze J.: *Finite-volume variational method for the Dirac equation*. *Phys. Rev. A* 44 (1991) 1705–11.
- [72] Gaunaud G., Überall H.: *R-matrix theory of sound scattering from fluid spheres via the Mittag-Leffler expansion*. *J. Acoust. Soc. Am.* 68 (1980) 1850–7.
- [73] Gaunaud G. C., Tanglis E., Überall H., Brill D.: *Interior and exterior resonances in acoustic scattering. I. – Spherical targets*. *Nuovo Cimento B* 76 (1983) 153–75.
- [74] Peine H., Guicking D.: *Acoustical resonance scattering theory for strongly overlapping resonances*. *Acta Acus.* 3 (1995) 233–41.
- [75] Blatt J. M., Weisskopf V. F.: *Theoretical Nuclear Physics*. New York: Wiley 1952. (Тлумаченіе росyjsкіе: Блатт Дж., Вайскопф В.: *Теоретическая ядерная физика*. Москва: Издательство Иностранной Литературы 1954). Podrozdział 10.4.
- [76] Sachs R. G.: *Nuclear Theory*. Cambridge, MA: Addison-Wesley 1955. (Тлумаченіе польскіе: *Fizyka teoretyczna jądra atomowego*. Warszawa: PWN 1957). Podrozdziały 10.3, 10.4.
- [77] Bloch C.: *Cours sur la théorie des réactions nucléaires*. Saclay: CEN 1955–56. (Przedrukowano w: [78]. Strony 116–415). Rozdział 10.
- [78] Bloch C.: *Scientific Works. Vol. I*, red. R. Balian, C. De Dominicis, V. Gillet, A. Messiah. Amsterdam: North-Holland 1975.
- [79] Brown G. E.: *Foundations of the optical model for nuclei and direct interaction*. *Rev. Mod. Phys.* 31 (1959) 893–919. (Тлумаченіе росyjsкіе w: Лейн А., Томас Р.: *Теория ядерных реакций при низких энергиях*. Москва: Издательство Иностранной Литературы 1960. Uzupełnienie III. Strony 393–469).
- [80] Vogt E.: *Theory of low energy nuclear reactions*. *Rev. Mod. Phys.* 34 (1962) 723–47.

- [81] Wu T.-Y., Ohmura T.: *Quantum Theory of Scattering*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall 1962. Rozdział 6.X.
- [82] Preston M. A.: *Physics of the Nucleus*. Reading, MA: Addison-Wesley 1962. (Tłumaczenie rosyjskie: Престон М.: *Физика ядра*. Москва: Мир 1964). Podrozdziały 16.5, 16.6.
- [83] Lynn J. E.: *The Theory of Neutron Resonance Reactions*. Oxford: Oxford University Press 1968. Rozdział II.
- [84] Mahaux C., Weidenmüller H. A.: *Shell-model Approach to Nuclear Reactions*. Amsterdam: North-Holland 1969. Rozdział 8.
- [85] Lane A. M., Robson D.: *Comprehensive formalism for nuclear reaction problems. I. Derivation of existing reaction theories*. *Phys. Rev.* 151 (1966) 774–87.
- [86] Lane A. M., Robson D.: *Comprehensive formalism for nuclear-reaction problems. III. Calculable theories with systematic “discretization”*. *Phys. Rev.* 185 (1969) 1403–15.
- [87] Burke P. G.: *The R-matrix method in atomic and molecular physics*. *Comments At. Mol. Phys.* 4 (1973) 157–62.
- [88] Burke P. G.: *The R-matrix method in atomic physics*. *Comput. Phys. Commun.* 6 (1974) 288–302.
- [89] Burke P. G., Robb W. D.: *The R-matrix theory of atomic processes*. *Adv. At. Mol. Phys.* 11 (1975) 143–214.
- [90] Robb W. D.: *The R-matrix method: Application to atoms and ions*. W: *Electronic and Atomic Collisions. X International Conference, Paris, France, 1977*, red. G. Watel. Amsterdam: North-Holland 1978. Strony 231–55.
- [91] Robb W. D.: *R-matrix methods*. W: *Atomic Scattering Theory. Mathematical and Computational Aspects. Conference. University of Western Ontario, London, ON, Canada, 1978*, red. J. Nuttall. London, ON: Department of Physics, University of Western Ontario 1978. Strony 157–76.
- [92] Schneider B. I.: *The R-matrix method: Applications to electron–molecule collisions*. W: *Electronic and Atomic Collisions. X International Conference, Paris, France, 1977*, red. G. Watel. Amsterdam: North-Holland 1978. Strony 257–69.
- [93] Burke P. G.: *Basic concepts of the R-matrix method and relationship to other theories*. W: *Electronic and Atomic Collisions. X International Conference, Paris, France, 1977*, red. G. Watel. Amsterdam: North-Holland 1978. Strony 201–11.
- [94] Fano U.: *Perspectives and prospectives*. W: *Electronic and Atomic Collisions. X International Conference, Paris, France, 1977*, red. G. Watel. Amsterdam: North-Holland 1978. Strony 271–80.
- [95] Shimamura I.: *R-matrix theories*. W: *Electronic and Atomic Collisions. X International Conference, Paris, France, 1977*, red. G. Watel. Amsterdam: North-Holland 1978. Strony 213–30.
- [96] Burke P. G.: *R-matrix method — Advantages and applications*. *J. Physique Suppl.* 7 39 (1978) 427–34.
- [97] Burke P. G.: *R-matrix theory*. W: *The Physics of Electronic and Atomic Collisions. XII International Conference, Gatlinburg, USA, 1981*, red. S. Datz. Amsterdam: North-Holland 1982. Strony 447–54.
- [98] Burke P. G.: *R-matrix theory of atomic processes*. *Physicalia Magazine* 8 (1986) 289–315.
- [99] Burke P. G.: *R-matrix method in atomic physics*. W: *Atomic Physics. X International Conference, Kyoto, Japan, 1986*, red. H. Narumi, I. Shimamura. Amsterdam: North-Holland 1987. Strony 243–64.

- [100] Morgan L. A., Sarpal B. K., Tennyson J.: *R-matrix calculations of inelastic electron scattering by diatomic molecules*. W: *Electron Collisions with Molecules, Clusters, and Surfaces*, red. H. Ehrhardt, L. A. Morgan. New York: Plenum 1994. Strony 15–29.
- [101] Morgan L. A.: *Non-adiabatic effects in vibrational excitation and dissociative recombination*. W: [15]. Strony 227–37.
- [102] Gillan C. J., Tennyson J., Burke P. G.: *The UK molecular R-matrix scattering package: A computational perspective*. W: [15]. Strony 239–54.
- [103] Noble C. J.: *R-matrix techniques for intermediate energy scattering and photoionization*. W: [15]. Strony 309–26.
- [104] Pfingst K., Nestmann B. M., Peyerimhoff S. D.: *Tailoring the R-matrix approach for application to polyatomic molecules*. W: [15]. Strony 293–308.
- [105] Schneider B. I.: *An R-matrix approach to electron–molecule collisions*. W: [15]. Strony 213–26.
- [106] Tennyson J.: *Electronic excitation in electron molecule scattering using the R-matrix method*. W: *The Physics of Electronic and Atomic Collisions. XIX International Conference, Whistler, Canada, 1995*, red. L. J. Dubé, J. B. A. Mitchell, J. W. McConkey, C. E. Brion. AIP Conf. Proc. 360 (1995) 233–44.
- [107] Burke P. G., Scott M. P.: *The R-matrix method*. W: *Computational Atomic Physics*, red. K. Bartschat. Berlin: Springer 1996. Strony 137–59.
- [108] Morgan L. A.: *R-matrix theory of electron–molecule collisions*. W: *Photon and Electron Collisions with Atoms and Molecules. The Second European Study Conference. Belfast, Northern Ireland, UK, 1996*, red. P. G. Burke, C. J. Joachain. New York: Plenum 1997. Strony 57–67.
- [109] Burke P. G.: *R-matrix theory: some recent applications*. W: *Many-Body Atomic Physics*, red. J. J. Boyle, M. S. Pindzola. Cambridge: Cambridge University Press 1998. Strony 305–24.
- [110] Barrett R. F., Robson B. A., Tobocman W.: *Calculable methods for many-body scattering*. *Rev. Mod. Phys.* 55 (1983) 155–243 [Errata: 56 (1984) 567].
- [111] Greene C. H.: *Variational calculation of channel interaction parameters*. W: *Fundamental Processes of Atomic Dynamics*, red. J. S. Briggs, H. Kleinpoppen, H. O. Lutz. New York: Plenum 1988. Strony 105–27.
- [112] Burke P. G., Joachain C. J.: *Theory of Electron–Atom Collisions. Part 1: Potential Scattering*. New York: Plenum 1995. Podrozdział 2.4.
- [113] Burke P. G., Berrington K. A. (red.): *Atomic and Molecular Processes: an R-matrix Approach*. Bristol: Institute of Physics 1993.
- [114] Goldberger M. L., Watson K. M.: *Collision Theory*. New York: Wiley 1964. (Tłumaczenie rosyjskie: Гольдбергер М., Ватсон К.: *Теория столкновений*. Москва: Мир 1967).
- [115] Joachain C. J.: *Quantum Collision Theory*. Amsterdam: North-Holland 1975.
- [116] Newton R. G.: *Scattering Theory of Waves and Particles*, 2nd ed. New York: Springer 1982.
- [117] Rodberg L. S., Thaller R. M.: *Introduction to the Quantum Theory of Scattering*. New York: Academic 1967.
- [118] Sitenko A. G.: *Scattering Theory*. Berlin: Springer 1991. (Tłumaczenie z wydania rosyjskiego: Ситенко А. Г.: *Теория рассеяния*. Киев: Вища Школа 1975).
- [119] Давыдов А. С.: *Теория атомного ядра*. Москва: Физматгиз 1958. (Tłumaczenie polskie: Dawydow A. S.: *Teoria jądra atomowego*. Warszawa: PWN 1962). Rozdział VIII.58.

- [120] Peierls R.: *More Surprises in Theoretical Physics*. Princeton, NJ: Princeton University Press 1991.
- [121] Szmytkowski R., Hinze J.: *Convergence of the non-relativistic and relativistic R-matrix expansions at the reaction volume boundary*. *J. Phys. B* 29 (1996) 761–77 [Errata: 29 (1996) 3800–1].
- [122] Szmytkowski R., Hinze J.: *Kapur–Peierls and Wigner R-matrix theories for the Dirac equation*. *J. Phys. A* 29 (1996) 6125–41.
- [123] Szmytkowski R.: *A unified construction of variational R-matrix methods: I. The Schrödinger equation*. *J. Phys. A* 30 (1997) 4413–38.
- [124] Szmytkowski R.: *Unified construction of variational R-matrix methods for the Dirac equation*. *Phys. Rev. A* 57 (1998) 4351–64.
- [125] Szmytkowski R.: *Operator formulation of Wigner’s R-matrix theories for the Schrödinger and Dirac equations*. *J. Math. Phys.* 39 (1998) 5231–52.
- [126] Pomraning G. C.: *A derivation of variational principles for inhomogeneous equations*. *Nucl. Sci. Eng.* 29 (1967) 20–36.
- [127] Stacey W. M.: *Variational Methods in Nuclear Reactor Physics*. New York: Academic 1974. Rozdział 1.
- [128] Morse P. M., Feshbach H.: *Methods of Theoretical Physics. Parts I & II*. New York: McGraw-Hill 1953.
- [129] Huby R.: *Phase of matrix elements in nuclear reactions and radioactive decay*. *Proc. Phys. Soc. (London) A* 67 (1954) 1103–5.
- [130] Condon E. U., Shortley G. H.: *The Theory of Atomic Spectra*. Cambridge: Cambridge University Press 1935.
- [131] Cowan R. D.: *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. Berkeley: University of California Press 1981.
- [132] Antosiewicz H. H.: *Bessel functions of fractional order*. W: *Handbook of Mathematical Functions*, red. M. Abramowitz, I. A. Stegun. New York: Dover 1965. Strony 435–78. Podrozdział 10.3.
- [133] Бабиков В. В.: *Метод фазовых функций в квантовой механике*, изд. 3. Москва: Наука 1988.
- [134] Brown G. E.: *Unified Theory of Nuclear Models and Forces*, 2nd ed. Amsterdam: North-Holland 1967. (Tłumaczenie polskie: *Jednolita teoria modeli jądrowych i sił jądrowych*. Warszawa: PWN 1969). Podrozdział IX.2.
- [135] Madelung E.: *Die mathematischen Hilfsmittel des Physikers*, 6. Aufl. Berlin: Springer 1957. (Tłumaczenie rosyjskie: Маделунг Э.: *Математический аппарат физики*. Москва: ГИФМЛ 1960).
- [136] Collatz L.: *Eigenwertaufgaben mit technischen Anwendungen*, 2. Aufl. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft 1963. (Tłumaczenie rosyjskie: Коллатц Л.: *Задачи на собственные значения с техническими приложениями*. Москва: Наука 1968). Rozdział V.
- [137] Courant R., Hilbert D.: *Methods of Mathematical Physics. Vols. I & II*. New York: Wiley-Interscience 1953. (Tłumaczenie rosyjskie z wydania niemieckiego: Курант Р., Гильберт Д.: *Методы математической физики. Том I и II*. Москва: ГИИТТЛ 1951).
- [138] Schiff L. I.: *Quantum Mechanics*, 3rd ed. New York: McGraw-Hill 1968. (Tłumaczenie polskie: *Mechanika kwantowa*. Warszawa: PWN 1977).
- [139] Collatz L.: *Numerische Behandlung von Differentialgleichungen*, 2. Aufl. Berlin: Springer 1955. (Tłumaczenie polskie: *Metody numeryczne rozwiązywania równań różniczkowych*. Warszawa: PWN 1960). Podrozdziały III.5, III.6, V.5.

-
- [140] Temple G., Bickley W. G.: *Rayleigh's Principle and Its Applications to Engineering*. New York: Dover 1956.
- [141] Elsgolc L. E.: *Rachunek wariacyjny*. Warszawa: PWN 1960. Podrozdział V.3.
- [142] Гельфанд И. М., Фомин С. В.: *Вариационное исчисление*. Москва: ГИФМЛ 1961. (Тłumaczenie polskie: Gelfand I. M., Fomin S. W.: *Rachunek wariacyjny*. Warszawa: PWN 1970). Podrozdział VIII.37.
- [143] Gould S. H.: *Variational Methods for Eigenvalue Problems*, 2nd ed. Toronto: University of Toronto Press 1966. (Тłumaczenie rosyjskie: Гулд С.: *Вариационные методы в задачах о собственных значениях*. Москва: Мир 1970). Podrozdział IV.12.
- [144] Peters G., Wilkinson J. H.: *$Ax = \lambda Bx$ and the generalized eigenproblem*. *SIAM J. Numer. Anal.* 7 (1970) 479–92.
- [145] Moler C. B., Stewart G. W.: *An algorithm for generalized matrix eigenvalue problems*. *SIAM J. Numer. Anal.* 10 (1973) 241–56.
- [146] Szmytkowski R.: *Program QZ*. Nie opublikowano.
- [147] Szmytkowski R.: *A generalization of Wigner's R-matrix method*. *Phys. Lett. A* 237 (1998) 319–30.
- [148] Korn G. A., Korn T. M.: *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers*, 2nd ed. New York: McGraw-Hill 1968. (Тłumaczenie polskie: *Matematyka dla pracowników naukowych i inżynierów. Części I i II*. Warszawa: PWN 1983).

METODA R -MACIERZY DLA RÓWNAŃ SCHRÖDINGERA I DIRACA

W rozprawie przedstawiono operatorowe sformułowanie metody R -macierzy dla jednocząstkowych równań Schrödingera i Diraca. Pokazano, że w teorii dla równania Schrödingera kluczową rolę odgrywa operator całkowy pochodnej logarytmicznej $\hat{B}(E)$ oraz operatory $\hat{R}(E) = \hat{B}^{-1}(E)$ i $\hat{R}_{\hat{b}}(E) = [\hat{B}(E) - \hat{b}(E)]^{-1}$. Operator $\hat{B}(E)$ przekształca na powierzchni reakcji dowolną funkcję, która wewnątrz ograniczonej przez tę powierzchnię objętości spełnia niezależne od czasu równanie Schrödingera przy energii E , w pochodną normalną tej funkcji, natomiast $\hat{b}(E)$ jest dowolnym operatorem hermitowskim działającym na funkcje określone na powierzchni reakcji. Elementy macierzowe operatora $\hat{R}_{\hat{b}}(E)$ w dowolnej ortonormalnej bazie funkcji określonych na powierzchni reakcji tworzą R -macierz $R_b(E)$, znajomość której pozwala na wyznaczenie nierelatywistycznej macierzy rozpraszania $U(E)$. W teorii dla równania Diraca odpowiednikami operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}(E)$ i $\hat{R}_{\hat{b}}(E)$ są operatory $\hat{B}^{(\pm)}(E)$, $\hat{R}^{(\pm)}(E)$ oraz $\hat{R}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E)$, które na powierzchni reakcji wiążą ze sobą górne i dolne składowe funkcji spinorowych spełniających wewnątrz objętości reakcji niezależne od czasu równanie Diraca przy energii E . Elementy macierzowe operatorów $\hat{R}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E)$ tworzą R -macierze $R_b^{(\pm)}(E)$ powiązane z relatywistyczną macierzą rozpraszania $\hat{U}(E)$. Modyfikując metodę Kapura–Peierlsa–Wignera, znaleziono rozwinięcia jąder operatorów $\hat{R}_{\hat{b}}(E)$ i $\hat{R}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E)$ dla powierzchni reakcji o dowolnym kształcie. Przeanalizowano zagadnienie zbieżności otrzymanych rozwinięć i w przypadku równania Diraca usunięto błąd występujący we wcześniejszych macierzowych sformułowaniach teorii. Zastosowano metodę konstrukcji zasad wariacyjnych opisaną w pracy przeglądowej Gerjuoya, Rau i Sprucha [*Rev. Mod. Phys.* 55 (1983) 725–74] do wyprowadzenia w sposób systematyczny szesnastu, w tym jedenastu nowych, zasad wariacyjnych dla wartości własnych operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}(E)$, $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}^{(\pm)}(E)$, dla elementów macierzowych operatorów $\hat{B}(E)$, $\hat{R}_{\hat{b}}(E)$, $\hat{B}^{(\pm)}(E)$ i $\hat{R}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E)$ oraz dla odwrotności tych elementów. Użyto liniowych funkcji próbných typu Rayleigha–Ritza do znalezienia przybliżeń dla wartości własnych, elementów macierzowych oraz jąder całkowych wymienionych operatorów.

R -MATRIX METHOD FOR THE SCHRÖDINGER AND DIRAC EQUATIONS

R -matrix theories for the one-particle Schrödinger and Dirac equations have been formulated in the language of integral operators. In the non-relativistic theory the central role is played by operators $\hat{B}(E)$, $\hat{R}(E) = \hat{B}^{-1}(E)$ and $\hat{R}_{\hat{b}}(E) = [\hat{B}(E) - \hat{b}(E)]^{-1}$, where $\hat{b}(E)$ is an arbitrary Hermitean operator acting on functions defined on a reaction surface. The logarithmic derivative operator $\hat{B}(E)$ relates function values to normal derivatives on a surface of a closed volume inside which the function satisfies the time-independent Schrödinger equation at energy E . Matrix elements of the operator $\hat{R}_{\hat{b}}(E)$ in an arbitrary orthonormal functional basis on the reaction surface form an R -matrix $R_b(E)$ and the non-relativistic scattering matrix $U(E)$ may be expressed in terms of $R_b(E)$. The theory for the Dirac equation uses operators $\hat{B}^{(\pm)}(E)$, $\hat{R}^{(\pm)}(E)$ and $\hat{R}_{\hat{b}}^{(\pm)}(E)$ which link on the reaction surface values of upper and lower components of spinor wave functions satisfying

in the reaction volume the time-independent Dirac equation at energy E . Matrix elements of the operators $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ form R -matrices $R_b^{(\pm)}(E)$ related to the relativistic scattering matrix. By utilizing a modified procedure due to Kapur and Peierls and to Wigner, expansions of integral kernels of the operators $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$ and $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$ have been found for an arbitrarily shaped reaction surface. A question of convergence of these expansions has been considered and an error occurring in earlier formulations of the R -matrix theory for the Dirac equation has been corrected. A systematic construction, based on a unified approach described by Gerjuoy, Rau and Spruch [*Rev. Mod. Phys.* 55 (1983) 725–74], of sixteen variational principles related to the non-relativistic and relativistic R -matrix theories has been presented. Rayleigh–Ritz linear trial functions have been used in these principles yielding approximate eigenvalues of the operators $\hat{\mathcal{B}}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}(E)$, $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ and $\hat{\mathcal{R}}^{(\pm)}(E)$ as well as approximate matrix elements and kernels of the operators $\hat{\mathcal{B}}(E)$, $\hat{\mathcal{R}}_b(E)$, $\hat{\mathcal{B}}^{(\pm)}(E)$ and $\hat{\mathcal{R}}_b^{(\pm)}(E)$.