Содержание

Аннотация

В данной работе получена конечномерная аппроксимация операторов рассеяния и уравнения Липпмана-Швингера путем перехода из базиса плоских волн в базис волновых пакетов. В таком представлении функция Грина свободной частицы интегрируется аналитически, что существенно упрощает численное решение уравнений.

1 Введение

Знание физических величин, характеризующих процесс рассеяния, необходимо во многих областях современной физики: феноменологии элементарных частиц, при вычислении интегралов столкновений в теории плазмы, при расчете замедления нейтронов в ядерных реакторах. Для решения возникающих при этом уравнений необходимы большие вычислительные мощности, и проведение таких расчетов на персональных компьютерах возможно лишь в небольшом числе случаев. В связи со все возрастающей доступностью параллельных вычислений (grid-сети, кластеры, суперкомпьютеры) возникает проблема разработки методов и алгоритмов решения задач рассеяния в многопоточном режиме. При этом возможно существенно увеличить число задач, поддающихся вычислению ab initio.

При энергиях порядка десятка МэВ вклад в процесс нуклон-нуклонного рассеяния даёт лишь небольшое количество парциальных амплитуд. В соответствии с этим разложение по парциальным волнам является адекватным методом расчета рассеяния. С другой стороны при энергиях порядка сотен МэВ и более возбуждается большие угловые моменты, которые дают вклад в амплитуду рассеяния. Такие вклады являются сильно осциллирующими функциями угла рассеяния при том, что результирующая амплитуда намного более гладкая функция.

2 Базис волновых пакетов.

Рассмотрим процесс рассеяния двух частиц. Гамильтониан этой системы запишем выделив взаимодействие и гамильтониан свободной частицы:

$$H = H_0 + V,$$

где потенциал V – короткодействующий с характерным размером a. Собственные функции H_0 это состояния с определенным волновым вектором, выберем их нормированными на дельта-функцию:

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\langle\vec{k}|\vec{k'}\rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k'})$$

2.1 Волновые пакеты.

Перейдем от точных волновых функций к волновым пакетам. Введем разбиение D трехмерного пространства волновых векторов на малые области и перенумеруем эти области индексом α. Волновым пакетом мы будем называть сумму всех $|\vec{k}\rangle$, волновой вектор которых попадает в заданную область D_α. При этом интегрирование произведем с весовой функцией $f(k)$ смысл которой будет объяснен далее:

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mu_\alpha}} \int\limits_{D_\alpha} f(k)\, |\vec{k}\rangle\, d^3k$$

Коэффициент μ_α найдем из условия нормировки:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mu_\alpha \mu_\beta}} \int\limits_{D_\alpha} \int\limits_{D_\beta} f(k) f^\dagger(k') \delta(\vec{k} - \vec{k'}) d^3k d^3k' = 1$$

Отсюда имеем:

$$\mu_\alpha = \int\limits_{D_\alpha} |f(k)|^2 d^3k$$

Таким образом мы перешли от непрерывного спектра к дискретному и полученный набор функций является ортонормированным и полным:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha,\beta}$$

$$\sum_\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha| = 1$$

Сетку разбиения удобно выбирать так, чтобы её поверхности уровня совпадали с поверхностями уровня системы координат в которых производится интегрирование. Например, если $d^3k = dk_x dk_y dk_z$, то логично выбрать прямоугольную сетку. Более же удобным в данном случае будет интегрирование в сферической системе координат, во-первых энергия зависит только от одной координаты – модуля волнового вектора, во-вторых явно выделен азимутальный угол и это существенно упростит решение задач со сферически-симметричным потенциалом. Таким образом D_α это следующая область:

$$D_{\alpha(i,j,k)} = \left\{ \, (k, \theta, \varphi) \, \middle| \, k \in [k_i, k_{i+1}], \theta \in [\theta_j, \theta_{j+1}], \varphi \in [\varphi_k, \varphi_{k+1}] \, \right\}$$

$$\alpha \text{ номерует сочетания } \Big\{(0,0,0),\ \ldots\ , (i_{max}, j_{max}, k_{max})\Big\}$$

2.2 Волновые пакеты в аксиально-симметричных системах.

В случае сферически-симмеричного потенциала результат решения задачи не должен зависеть от азимутального угла. При этом удобно смешанное представление, в котором угол φ – непрерывная переменная, а модуль $\vec{k}$ и полярный угол – дискретные. Интегрирование проведем в сферических координатах. Итого, имеем следующее представление:

$$|\alpha, \varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mu_\alpha}} \int\limits_{D_\alpha} f(k)\, |\vec{k}\rangle\, k^2\, dk\, d(-\cos\theta)$$

$$\mu_\alpha = \int\limits_{D_\alpha} |f(k)|^2 k^2\, dk\, d(-\cos\theta)$$

Определенные так волновые пакеты нормированны следующим условием:

$$\langle \alpha, \varphi | \beta, \varphi' \rangle = \delta_{\alpha,\beta} \delta(\varphi' - \varphi)$$

$$\sum_\alpha \int\limits_0^{2\pi} d\varphi\, |\alpha, \varphi\rangle\, \langle \alpha, \varphi| = 1$$

Теперь рассмотрим подробнее сетку:

$$\text{узлы сетки по } k: \quad k_i, \quad i = \overline{0, M}$$

$$\text{узлы сетки по } \theta: \quad \theta_j, \quad j = \overline{0, N}$$

На каждом интервале выберем средний элемент

$$k_i^* \in [k_i, k_{i+1}], \quad i = \overline{0, M-1}$$

$$\theta_j^* \in [\theta_j, \theta_{j-1}], \quad j = \overline{0, N-1}$$

и перейдем от двойного индекса (i, j) к одинарному

$$\alpha = \overline{0, NM-1},$$

$$i = \alpha \bmod N, \quad j = [\alpha/N],$$

$$\vec{k_\alpha^*} = (k_i^*, \theta_j^*),$$

где $x \bmod y$ – остаток от деления x на y, а $[x/y]$ – целая часть деления. Если рассматривать величины (k_i^*, θ_j^*) как элементы матрицы, то такое преобразование эквивалетно следующему изменению индексов в матрице:

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & \dots & a_{0,N-1} \\ a_{10} & a_{11} & \dots & a_{1,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M-1,0} & a_{M-1,1} & \dots & a_{M-1,N-1} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} a_{0} & a_{1} & \dots & a_{N-1} \\ a_{N} & a_{N+1} & \dots & a_{2N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{(M-1)N} & a_{(M-1)N+1} & \dots & a_{NM-1} \end{pmatrix}$$

2.3 Операторы в представлении ВП

Теперь получим выражение операторов в представлении ВП через операторы в импульсном представлении. Пусть дан оператор

$$A(\vec{k'},\vec{k}) \equiv \langle \vec{k'}|\, A\, |\vec{k}\rangle$$

и оператор

$$A_{\alpha\beta}(\varphi',\varphi) \equiv \langle \alpha,\varphi'|\, A\, |\beta,\varphi\rangle\,.$$

Переход от одного представления к другому осуществляется по стандартной формуле:

$$A_{\alpha\beta}(\varphi',\varphi) = \int d^3k \int d^3k'\, \langle \alpha,\varphi'|\vec{k'}\rangle\, A(\vec{k'},\vec{k})\, \langle \vec{k}|\beta,\varphi\rangle\,.$$

Перекрытие ВП и плоской волны вычисляется исходя из определения ВП:

$$\langle \vec{k}|\alpha,\varphi'\rangle = \frac{f(k)}{\sqrt{\mu_\alpha}}\delta_{\alpha,\{\vec{k}\}}\delta(\varphi'-\varphi)$$

Здесь и далее под $\{\vec{k}\}$ подразумевается номер интервала в который попадает этот вектор. Подставляя это в интеграл перехода получим:

$$A_{\alpha\beta}(\varphi',\varphi) = \frac{1}{\sqrt{(\mu_\alpha\mu_\beta)}}\int\limits_{D_\alpha} f^\dagger(k)d^2k \int\limits_{D_\beta} f(k')d^2k' A(\vec{k'},\vec{k})$$

Пользуясь теоремой о среднем и малостью интервала интегрирования выносим $A(\vec{k'},\vec{k})$ за знак интеграла:

$$A_{\alpha\beta}(\varphi',\varphi) = \frac{A(\vec{k}^*_\alpha,\vec{k}^*_\beta)}{\sqrt{\mu_\alpha\mu_\beta}}\int\limits_{D_\alpha} f^\dagger(k)d^2k \int\limits_{D_\beta} f(k')d^2k'$$

Оставшиеся два интеграла также пользуясь теоремой о среднем можно привести к виду нормировочных интегралов. И окончательный результат:

$$A_{\alpha\beta}(\varphi',\varphi) = \frac{\sqrt{\mu_\alpha\mu_\beta}}{f^\dagger(k^*_\alpha)f(k^*_\beta)}A(\vec{k}^*_\alpha,\vec{k}^*_\beta).$$

Все операторы рассеяния будут выражаться через велечины $A(\vec{k^*_\alpha}, \vec{k^*_\beta})$ поэтому введем для них краткие обозначения:

$$A(\vec{k^*_\alpha}, \vec{k^*_\beta}) \equiv A^*_{\alpha\beta} \tag{1}$$

2.4 Поведение ВП в координатном пространстве.

– Рассмотреть при разных $f(k)$ –

3 Уравнение Липпмана-Швингера.

Двухчастичное рассеяние описывается уравнением Липпмана-Швингера

$$T = V + VG_0T, \tag{2}$$

где V — двухчастичный потенциал, $G_0 = (z - H_0)^{-1}$ — функция Грина свободной частицы и T это Т-матрица. В импульсном пространстве матричные элементы $T(\vec{q'}, \vec{q}, z) \equiv \langle\vec{q'}|\, T(z)\, |\vec{q}\rangle$ удовлетворяют интегральному уравнению

$$T(\vec{q'}, \vec{q}, z) = V(\vec{q'}, \vec{q}) + \int d^3q'' V(\vec{q'}, \vec{q''}) G_0(\vec{q''}, z) T(\vec{q''}, \vec{q}, z). \tag{3}$$

Здечь $\vec{q}$ это относительный импульс, m — приведенная масса двух частиц и z это энергия. Мы рассматриваем нерелятивистский случай и ограничемся двумя бесспиновыми частицами. Таким образом $V(\vec{q'}, \vec{q})$ и $T(\vec{q'}, \vec{q}, z)$ являются скалярными функциями:

$$V(\vec{q'}, \vec{q}) = V(q', q, \vec{q'}\vec{q}) \tag{4}$$

и

$$T(\vec{q'}, \vec{q}) = T(q', q, \vec{q'}\vec{q}) \tag{5}$$

В последнем выражении мы отбосили параметрическую зависимость от z. Рассмотрим теперь как выражаются операторы в представлении волновых пакетов через операторы в импульсном представлении.

3.1 Функция Грина в представлении ВП.

Действуя на функцию Грина свободной частицы

$$G(k_0) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3k \frac{|\vec{k}\rangle\,\langle\vec{k}|}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}$$

операторами проектирования

$$P = \sum_{\alpha} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \left|\alpha, \varphi\right\rangle \left\langle\alpha, \varphi\right|$$

с двух сторон, получим функцию Грина в представлении ВП:

$$G(k_0) = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\alpha} \frac{1}{\mu_\alpha} \int_{D_\alpha} d^3k \frac{\left|\alpha, \varphi\right\rangle |f(k)|^2 \left\langle\alpha, \varphi\right|}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}$$

Рассматривая α-ый элемент этой суммы, вводя сферические координаты и интегрируя по φ и θ имеем:

$$G_\alpha = \frac{2m(cos(\theta_j^*) - cos(\theta_{j+1}^*))}{\hbar^2 \mu_\alpha} \int_{\Delta k_i} \frac{|f(k)|^2 k^2 dk}{k_0^2 - k^2 + i\epsilon}$$

и окончательно в случае $f(k) = 1$:

$$G_\alpha = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{cos(\theta_j^*) - cos(\theta_{j+1}^*)}{\mu_\alpha} \left(k_{i+1}^* - k_i^* + \frac{k_0}{2} \ln \frac{(k_{i+1}^* + k_0)(k_i^* - k_0)}{(k_{i+1}^* - k_0)(k_i^* + k_0)} + \frac{i\pi k_0}{2} \delta_{\{k'\},i} \right) \tag{6}$$

и в случае $f(k) = 1/k$:

$$G_\alpha = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{cos(\theta_j^*) - cos(\theta_{j+1}^*)}{\mu_\alpha} \left(\frac{k_0}{2} \ln \frac{(k_{i+1}^* + k_0)(k_i^* - k_0)}{(k_{i+1}^* - k_0)(k_i^* + k_0)} + \frac{i\pi k_0}{2} \delta_{\{k'\},i} \right) \tag{7}$$

Так же как и для операторов в формуле (1) для функции Грина введем обозначения

$$G_\alpha = \frac{cos(\theta_j^*) - cos(\theta_{j+1}^*)}{\mu_\alpha} G_\alpha^* \tag{8}$$

где G_α^* можно найти сравнивая с формулами (6) и (7).

3.2 Уравнение Липпманна-Швингера в представлении ВП.

Используя результаты пункта 2.3 запишем в представлении ВП Т-матрицу:

$$T_{\alpha\beta}(\varphi, \varphi') = \frac{\sqrt{\mu_\alpha \mu_\beta}}{f^\dagger(k_\alpha^*) f(k_\beta^*)} T(\vec{k_\alpha^*}, \vec{k_\beta^*}) \tag{9}$$

и аналагично потенциал.

Запишем теперь уравнение Липпманна-Швингера в представлении ВП:

$$T_{\alpha\alpha_0}(\varphi-\varphi_0)=V_{\alpha\alpha_0}(\varphi-\varphi_0)+\sum_\beta\int\limits_0^{2\pi}d\varphi' V_{\alpha\beta}(\varphi-\varphi')G_\beta T_{\beta\alpha_0}(\varphi'-\varphi_0) \quad (10)$$

где α_0 и φ_0 - координаты $\vec{k_0}$. Так как потенциал сферически-симметричный Т-матрица не может зависить от φ. Зависимость от этого угла есть только в потенциале и имеет следующий вид:

$$V(\vec{q'},\vec{q})=V(q',q,\cos(\theta')\cos(\theta)+\sin(\theta')\sin(\theta)\cos(\varphi)) \quad (11)$$

Поэтому можем провести интегрирование по φ и ввести новую функцию:

$$W_{\alpha\beta}=\int\limits_0^{2\pi}d\varphi V_{\alpha\beta}(\varphi) \quad (12)$$

Если один из индексов отвечает импульсу налетающей частицы, то можно проинтегрировать явно, так как зависимость от φ в выражении (11) исчезает.

$$V_{\alpha\alpha_0}=\frac{1}{2\pi}W_{\alpha\alpha_0} \quad (13)$$

Тогда уравнение принимает вид

$$T_{\alpha\alpha_0}=\frac{1}{2\pi}W_{\alpha\alpha_0}+\sum_\beta W_{\alpha\beta}G_\beta T_{\beta\alpha_0} \quad (14)$$

Используя формулы (1), (8) и сокращая нормировочные множители, получим явный вид данного уавнения:

$$T^*_{\alpha\alpha_0}=\frac{1}{2\pi}W^*_{\alpha\alpha_0}+\sum_\beta\frac{cos(\theta^*_j)-cos(\theta^*_{j+1})}{|f_\beta|^2}W^*_{\alpha\beta}G^*_\beta T^*_{\beta\alpha_0} \quad (15)$$

Решив уравнение Липпманна-Швингера получим матричные элементы Т-оператора. Они прямо пропорциональны амплитуде рассеяния. Учитывая сохранение импульса имеем:

$$f_t=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^2}{2}T^*_{\alpha\alpha_0}, \quad (16)$$

где $\alpha\in\alpha_0,...,\alpha_0+N$, а $t\in 0,...,N$.

4 Численные иллюстрации

Для иллюстрации полученного метода произведен расчет сечения рассеяния для гауссового потенциала и потенциала Малфлье-Тьёна. В обоих случаях результаты сравнивались с методом парциальных волн.

4.1 Расчет для Гауссова потенциала.

В качестве простого теста используем потенциал в виде гауссового пика.

$$V(r) = Ae^{-r^2/a^2}, \tag{17}$$

и сооственственно

$$V(\vec{q}', \vec{q}) = \frac{Aa^3}{8\pi^{3/2}} \exp\big(-\frac{a^2}{4}(\vec{q}' - \vec{q})^2\big) \tag{18}$$

Интегрирование по φ в соответствии с (12) может быть проведено аналитически

$$W(\vec{q_2}, \vec{q_1}) = \frac{Aa^3}{4\pi^{1/2}} e^{-a^2(q_1^2+q_2^2-2q_1q_2\cos\theta_1\cos\theta_2)/4} I_0\big(a^2q_1q_2\sin\theta_1\sin\theta_2/2\big) \tag{19}$$

где I_0 – модифицированная функция Бесселя.

Результаты сравним с методом волновых функций.

4.2 Расчет для потенциала Юкавы.