Высокоэнергетическое рассеяние без разложения по парциальным волнам.

.

2 июня 2010 г.

Содержание

1 Введение

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.

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.

2 Базис стационарных 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 импульсом, выберем их нормированными на дельта-функцию:

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{q}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{qr}}$$

$$\langle \boldsymbol{q}|\boldsymbol{q'}\rangle = \delta(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q'})$$

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

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

Коэффициент μ_α найдем из условия нормировки:

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

Отсюда имеем:

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

Таким образом мы заменили непрерывный спектр на квазидискретный и полученный набор функций является ортонормированным. Полным этот набор функций становится в пределе $D_\alpha \to 0$:

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

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

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

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

$$\alpha \text{ нумерует сочетания } \Big\{(0,0,0), \; \dots \; , (i_{max}, j_{max}, k_{max})\Big\}$$

2.1 Волновые пакеты в случае аксиальной симметрии.

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

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

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

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 решетку:

$$\text{узлы решетки по } q: \quad q_i, \quad i = \overline{0, M}$$

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

На каждом интервале выберем средний элемент

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

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

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

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

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

$$\boldsymbol{q}_{\boldsymbol{\alpha}}^* = (q_i^*, \theta_j^*),$$

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

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,N-1} \\ a_{10} & a_{11} & \cdots & a_{1,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M-1,0} & a_{M-1,1} & \cdots & a_{M-1,N-1} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & \cdots & a_{N-1} \\ a_N & a_{N+1} & \cdots & a_{2N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{(M-1)N} & a_{(M-1)N+1} & \cdots & a_{NM-1} \end{pmatrix}$$

2.2 Операторы в представлении Волновых Пакетов.

Теперь получим выражение операторов в представлении Волновых Пакетов (ВП) через операторы в импульсном представлении. Пусть дан оператор с матричными элементами в импульсном представлении

$$A(\boldsymbol{q'}, \boldsymbol{q}) \equiv \langle \boldsymbol{q'} | \, A \, | \boldsymbol{q} \rangle$$

и оператор с матричными элементами в представлении ВП

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

Переход от одного представления к другому осуществляется по стандартной формуле:

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

Перекрывание ВП и плоской волны вычисляется исходя из определения ВП:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3 Поведение ВП в координатном пространстве.

– Рассмотреть при разных $f(q)$ –

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 $T(\boldsymbol{q'}, \boldsymbol{q}, z) \equiv \langle \boldsymbol{q'} | T(z) | \boldsymbol{q} \rangle$ удовлетворяют интегральному уравнению

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

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

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

и

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

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

$$G(q_0) = \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3q \frac{|\boldsymbol{q}\rangle \langle \boldsymbol{q}|}{q_0^2 - q^2 + i\epsilon}$$

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:

$$G(q_0) = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\alpha} \frac{1}{\mu_\alpha} \int_{D_\alpha} d^3q \frac{\left|\alpha,\varphi\right\rangle |f(q)|^2 \left\langle\alpha,\varphi\right|}{q_0^2 - q^2 + i\epsilon}$$

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

$$G_\alpha = \frac{2m(cos(\theta_j^*) - cos(\theta_{j+1}^*))}{\hbar^2 \mu_\alpha} \int_{\Delta q_i} \frac{|f(q)|^2 q^2 dq}{q_0^2 - q^2 + i\epsilon}$$

и окончательно в случае $f(q) = 1$:

$$G_\alpha = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{cos(\theta_j^*) - cos(\theta_{j+1}^*)}{\mu_\alpha} \left(q_{i+1}^* - q_i^* + \frac{q_0}{2} \ln \frac{(q_{i+1}^* + q_0)(q_i^* - q_0)}{(q_{i+1}^* - q_0)(q_i^* + q_0)} + \frac{i\pi q_0}{2} \delta_{\{q'\},i} \right) \quad (6)$$

и в случае $f(q) = 1/q$:

$$G_\alpha = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{cos(\theta_j^*) - cos(\theta_{j+1}^*)}{\mu_\alpha} \left(\frac{q_0}{2} \ln \frac{(q_{i+1}^* + q_0)(q_i^* - q_0)}{(q_{i+1}^* - q_0)(q_i^* + q_0)} + \frac{i\pi q_0}{2} \delta_{\{q'\},i} \right) \quad (7)$$

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

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

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 T-матрицу:

$$T_{\alpha\beta}(\varphi,\varphi') = \frac{\sqrt{\mu_\alpha \mu_\beta}}{f^\dagger(q_\alpha^*) f(q_\beta^*)} T(\boldsymbol{q_\alpha^*}, \boldsymbol{q_\beta^*}) \quad (9)$$

и аналагично потенциал.

Запишем теперь уравнение Липпманна-Швингера в представлении ВП:

$$T_{\alpha\alpha_0}(\varphi - \varphi_0) = V_{\alpha\alpha_0}(\varphi - \varphi_0) + \sum_{\beta} \int_0^{2\pi} d\varphi' V_{\alpha\beta}(\varphi - \varphi') G_\beta T_{\beta\alpha_0}(\varphi' - \varphi_0) \quad (10)$$

где α_0 и φ_0 - координаты $\boldsymbol{q_0}$. Так как потенциал сферически-симметричный Т-матрица не может зависить от φ. Зависимость от этого угла есть только в потенциале и имеет следующий вид:

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

Поэтому можем провести интегрирование по φ и ввести новую функцию:

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

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

$$V_{\alpha\alpha_0} = \frac{1}{2\pi} W_{\alpha\alpha_0} \tag{13}$$

Тогда уравнение принимает вид

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

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

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

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

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

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 двух потенциалов. В обоих случаях результаты сравнивались с методом парциальных волн, который выбран за эталонный.

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 соответственно

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

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

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

где I_0 – модифицированная функция Бесселя.

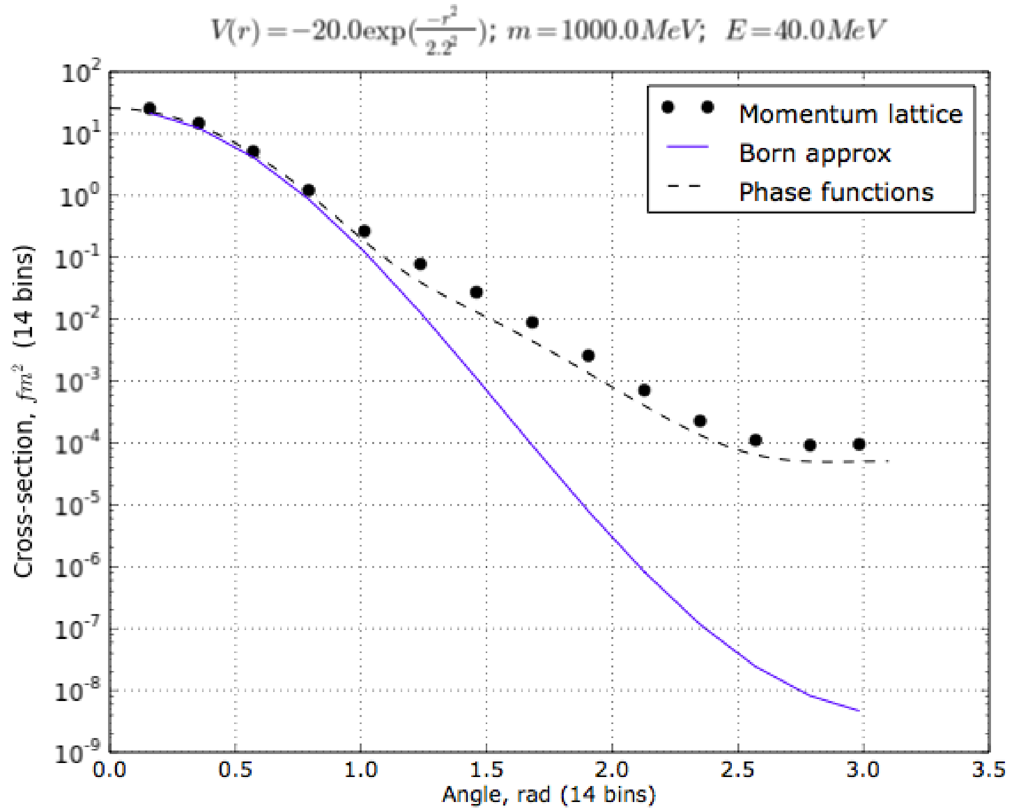
Результаты сравним с методом волновых функций.

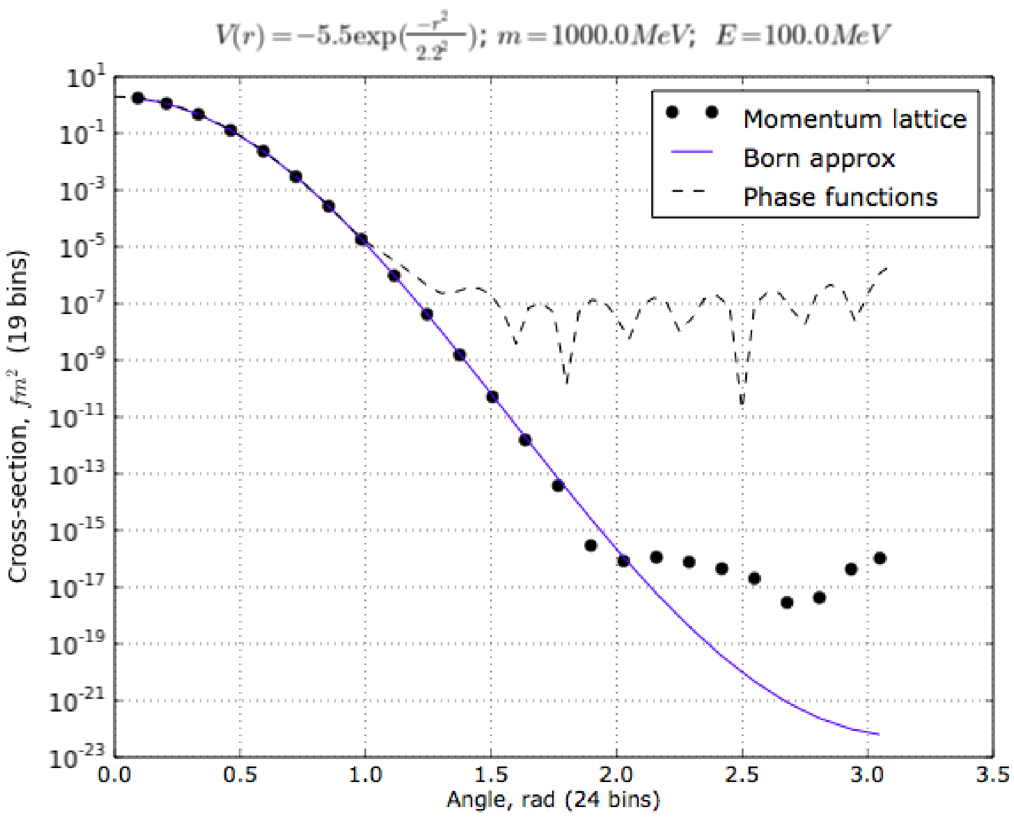
4.2 Расчет для потенциала Малфлье-Тьёна.

5 Заключение

5.1 Таблицы

5.2 Приложение 1. Рассеяние на Гауссовом потенциале.





5.3 Приложение 2. Рассеяние на потенциале Малфлье-Тьёна.

5.4 Приложение 3. Поведение высших борновских членов.