

# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Базис стационарных волновых пакетов.</b>	<b>5</b>
2.1	Волновые пакеты в случае аксиальной симметрии. . . . .	6
2.2	Операторы в представлении волновых пакетов. . . . .	7
<b>3</b>	<b>Уравнение Липпмана-Швингера.</b>	<b>8</b>
3.1	Функция Грина в представлении ВП. . . . .	9
3.2	Уравнение Липпманна-Швингера в представлении ВП. . . . .	10
<b>4</b>	<b>Численные иллюстрации</b>	<b>11</b>
4.1	Метод фазовых функций . . . . .	11
4.2	Расчет для Гауссова потенциала. . . . .	12
4.3	Расчет для потенциала Мальфье-Тъёна. . . . .	13
<b>5</b>	<b>Заключение</b>	<b>15</b>
	<b>Список литературы.</b>	<b>16</b>

### Аннотация

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

# 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 возбуждаются 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 устранения этих трудностей ряд авторов предложили отказаться от использования разложения по парциальным волнам, интегрируя непосредственно уравнение Липпманна-Швингера в импульсном представлении[1].

Необходимость пользоваться состояниями непрерывного спектра также вызывает трудности из-за сложных граничных условий, которым должны удовлетворять волновые функции, особенно в задачах нескольких частиц, где имеется несколько континуумов, часто налагающихся друг на друга. Для решения этих сложностей был предложен метод[3][2], основанный на дискретизации операторов теории рассеяния. Суть этого метода заключается в том, что весь континуум энергий разбивается на полосы малой ширины и в пределах таких интервалов строятся стационарные волновые пакеты из функций свободного движения. Затем операторы рассеяния записываются в этом представлении.

В данной работе метод, который авторы [3][2] применяли для дискретизации по энергии используется для дискретизации по импульсам. Таким образом используя это представление можно отказаться и от разложения по парциальным волнам и от состояний непрерывного спектра. В работе получены формулы для перехода в такое представление, явное выражение для функции Грина свободной частицы и написан дискретный аналог уравнения Липпманна-Швингера. В качестве численных иллюстраций рассчитано сечение рассеяния на гауссовом потенциале и потенциале Мальфье-Тьёна. Произведено сравнение данного метода с методом фазовых функций[5].

## 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:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \\ \langle \mathbf{q} | \mathbf{q}' \rangle &= \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')\end{aligned}$$

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

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mu_\alpha}} \int_{D_\alpha} f(q) |\mathbf{q}\rangle d^3q$$

Коэффициент  $\mu_\alpha$  найдем из условия нормировки:

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

Отсюда имеем:

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

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

$$\begin{aligned}\langle \alpha | \beta \rangle &= \delta_{\alpha, \beta} \\ \sum_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| &= P\end{aligned}$$

Сетку разбиения удобно выбирать так, чтобы её поверхности уровня совпадали с поверхностями уровня системы координат в которых производится интегрирование. Например, в случае декартовых координат  $d^3q = dq_x dq_y dq_z$  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  $D_\alpha$  это следующая область:

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

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

## 2.1 Волновые пакеты в случае аксиальной симметрии.

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

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

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

Определенные так волновые пакеты нормированны следующим условием:

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

$$\sum_\alpha \int_0^{2\pi} d\varphi |\alpha, \varphi\rangle \langle \alpha, \varphi| = 1$$

Теперь рассмотрим подробнее выбор узлов решетки:

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

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

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

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

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

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

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

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

## 2.2 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

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

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:

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

Перекрытие ВП и плоской волны вычисляется исходя из определения ВП:

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

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

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

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

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

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

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

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

$$A(\mathbf{q}_\alpha^*, \mathbf{q}_\beta^*) \equiv A_{\alpha\beta}^* \quad (1)$$

### 3 Уравнение Липпмана-Швингера.

Двухчастичное рассеяние описывается уравнением Липпмана-Швингера[4]

$$T = V + V G_0 T, \quad (2)$$

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

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

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

$$V(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = V(q', q, \mathbf{q}' \mathbf{q}) \quad (4)$$

и

$$T(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = T(q', q, \mathbf{q}' \mathbf{q}) \quad (5)$$

В последнем выражении мы не указываем для простоты 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

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

операторами проектирования

$$P = \sum_{\alpha} \int_0^{2\pi} d\varphi |\alpha, \varphi\rangle \langle \alpha, \varphi|$$

с двух сторон, получим функцию Грина в представлении ВП:

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

Рассматриваем  $\alpha$ -ый элемент этой суммы, вводим сферические координаты и интегрируя по  $\varphi$  и  $\theta$  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  $f(q) = 1$ :

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

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

$$G_\alpha = \frac{\cos(\theta_j^*) - \cos(\theta_{j+1}^*)}{\mu_\alpha} G_\alpha^* \quad (7)$$

где  $G_\alpha^*$  можно найти сравнивая с формулой (6).

### 3.2 Уравнение Липпманна-Швингера в представлении ВП.

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

$$T_{\alpha\beta}(\varphi, \varphi') = \frac{\sqrt{\mu_\alpha \mu_\beta}}{f^\dagger(q_\alpha^*) f(q_\beta^*)} T(\mathbf{q}_\alpha^*, \mathbf{q}_\beta^*) \quad (8)$$

и аналогично потенциал.

Запишем теперь уравнение Липпманна-Швингера в представлении ВП:

$$T_{\alpha\alpha_0}(\varphi - \varphi_0) = V_{\alpha\alpha_0}(\varphi - \varphi_0) + \sum_\beta \int_0^{2\pi} d\varphi' V_{\alpha\beta}(\varphi - \varphi') G_\beta T_{\beta\alpha_0}(\varphi' - \varphi_0) \quad (9)$$

где  $\alpha_0$  и  $\varphi_0$  - координаты  $\mathbf{q}_0$ . Так как потенциал сферически-симметричный Т-матрица не может зависеть от  $\varphi$ . Зависимость от этого угла есть только в потенциале и имеет следующий вид:

$$V(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = V(q', q, \cos(\theta') \cos(\theta) + \sin(\theta') \sin(\theta) \cos(\varphi)) \quad (10)$$

Поэтому можем провести интегрирование по  $\varphi$  и ввести новую функцию:

$$W_{\alpha\beta} = \int_0^{2\pi} d\varphi V_{\alpha\beta}(\varphi) \quad (11)$$

Если один из индексов отвечает импульсу налетающей частицы, то можно проинтегрировать явно, так как зависимость от  $\varphi$  в выражении (10) исчезает.

$$V_{\alpha\alpha_0} = \frac{1}{2\pi} W_{\alpha\alpha_0} \quad (12)$$

Тогда уравнение принимает вид

$$T_{\alpha\alpha_0} = \frac{1}{2\pi} W_{\alpha\alpha_0} + \sum_\beta W_{\alpha\beta} G_\beta T_{\beta\alpha_0} \quad (13)$$

Используя формулы (1), (7) и сокращая нормировочные множители, получим явный вид данного уравнения:

$$T_{\alpha\alpha_0}^* = \frac{1}{2\pi} W_{\alpha\alpha_0}^* + \sum_{\beta} \frac{\cos(\theta_j^*) - \cos(\theta_{j+1}^*)}{|f_{\beta}|^2} W_{\alpha\beta}^* G_{\beta}^* T_{\beta\alpha_0}^* \quad (14)$$

Решив это матричное уравнение Липпманна-Швингера найдем элементы Т-оператора. Они прямо пропорциональны амплитуде рассеяния. Учитывая сохранение импульса имеем:

$$f_t = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{(2\pi)^2}{2} T_{\alpha\alpha_0}^*, \quad (15)$$

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

## 4 Численные иллюстрации

Для иллюстрации полученного метода произведен расчет сечения рассеяния для двух потенциалов. В обоих случаях результаты сравнивались с методом фазовых функций, который выбран за эталонный.

### 4.1 Метод фазовых функций

Результаты численного расчета будем сравнивать с методом фазовых функций. Математической основой этого метода является тот факт, что линейное однородное уравнение второго порядка, каким является уравнение Шредингера, может быть сведено к нелинейному уравнению первого порядка – уравнению Риккати. Физическое содержание такого подхода состоит в том, что удовлетворяющая уравнению Риккати функция (фазовая функция) имеет в каждой точке смысл сдвига (по сравнению со случаем свободного движения) фазы волновой функции при рассеянии на обрезанном в этой точке потенциале.[5] В случае упругого рассеяния на центрально-симметричном потенциале уравнение для фазовых функций имеет следующий вид:

$$\frac{d}{dr} \delta_l(r) = -2mkr^2 V(r) [\cos \delta_l(r) j_l(kr) - \sin \delta_l(r) \eta_l(kr)]^2$$

$$\delta_l(0) = 0$$

$$\delta_l = \lim_{r \rightarrow \infty} \delta_l(r)$$

где  $j_0(r)$  и  $\eta_0(r)$  – сферические функции Бесселя.

Решив это уравнение сможем найти амплитуду рассеяния:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta)$$

## 4.2 Расчет для Гауссова потенциала.

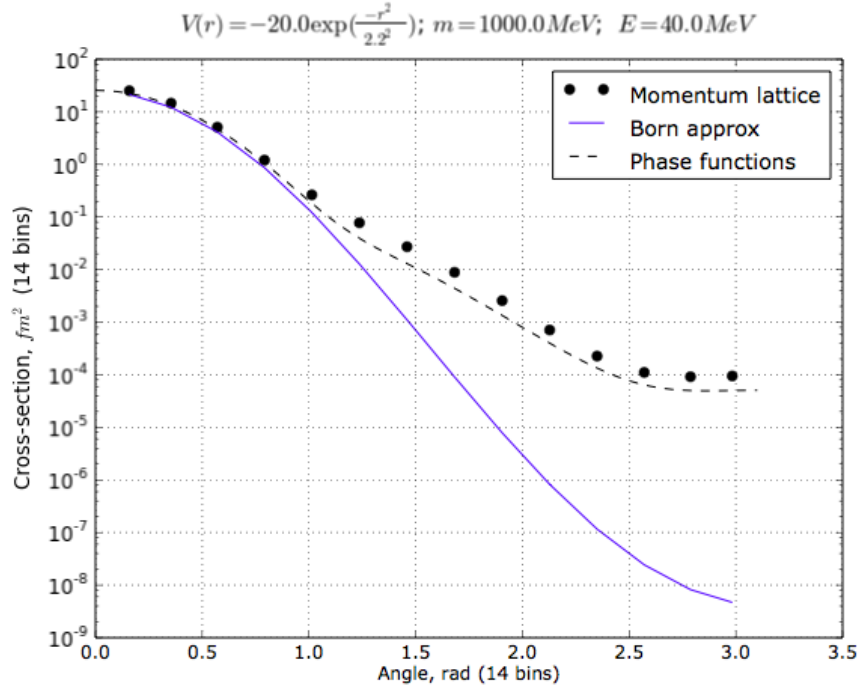


Рис. 1: Результаты обоих методов совпадают.

В качестве простого теста используем потенциал в виде гауссового пика.

$$V(r) = Ae^{-r^2/a^2}, \quad (16)$$

и соответственно

$$V(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = \frac{Aa^3}{8\pi^{3/2}} \exp\left(-\frac{a^2}{4}(\mathbf{q}' - \mathbf{q})^2\right) \quad (17)$$

Интегрирование по  $\varphi$  в соответствии с (11) может быть проведено аналитически

$$W(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1) = \frac{Aa^3}{4\pi^{1/2}} e^{-a^2(q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2)/4} I_0(a^2 q_1 q_2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 / 2) \quad (18)$$

где  $I_0$  – модифицированная функция Бесселя.

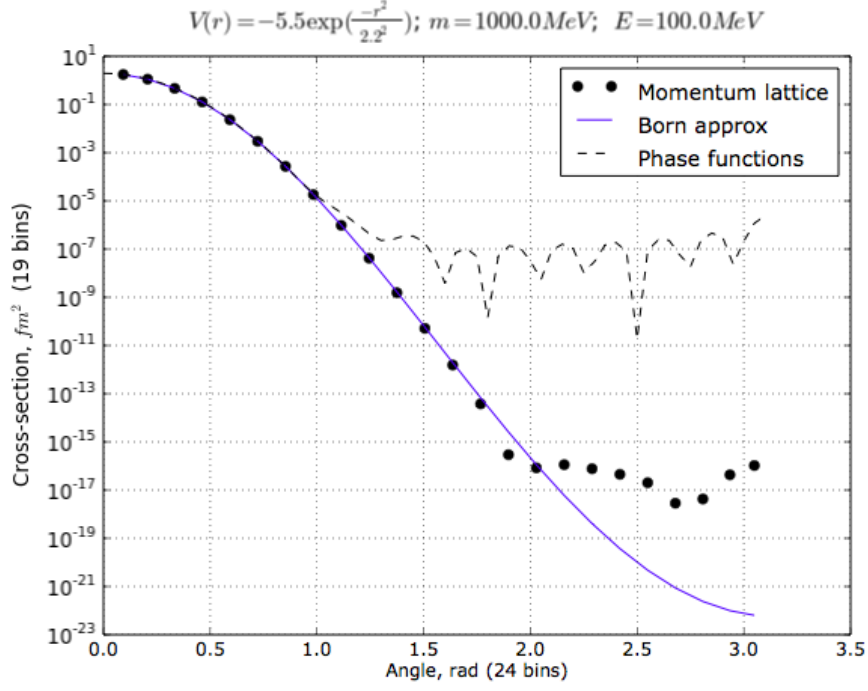


Рис. 2: Метод волновых пакетов обеспечивает большую точность.

Как мы видим на рисунке 1, результаты вычисления при малых энергиях совпадают с результатом метода фазовых функций. На рисунке 2 приведен результат вычисления в области применимости борновского приближения. Видно, что метод волновых пакетов обеспечивает большую точность чем метод фазовых функций. Это связано с тем, что в методе фазовых функций при вычислении сечения приходится суммировать сильно осциллирующие функции.

### 4.3 Расчет для потенциала Мальфье-Тьёна.

В качестве более реалистичного примера возьмем потенциал Мальфье-Тьёна

$$V(r) = V_R \frac{-\mu_R r}{r} - V_A \frac{-\mu_A r}{r}$$

и соответственно в импульсном представлении

$$V(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{V_R}{(\mathbf{q}' - \mathbf{q})^2 + \mu_R^2} + \frac{V_A}{(\mathbf{q}' - \mathbf{q})^2 + \mu_A^2} \right)$$

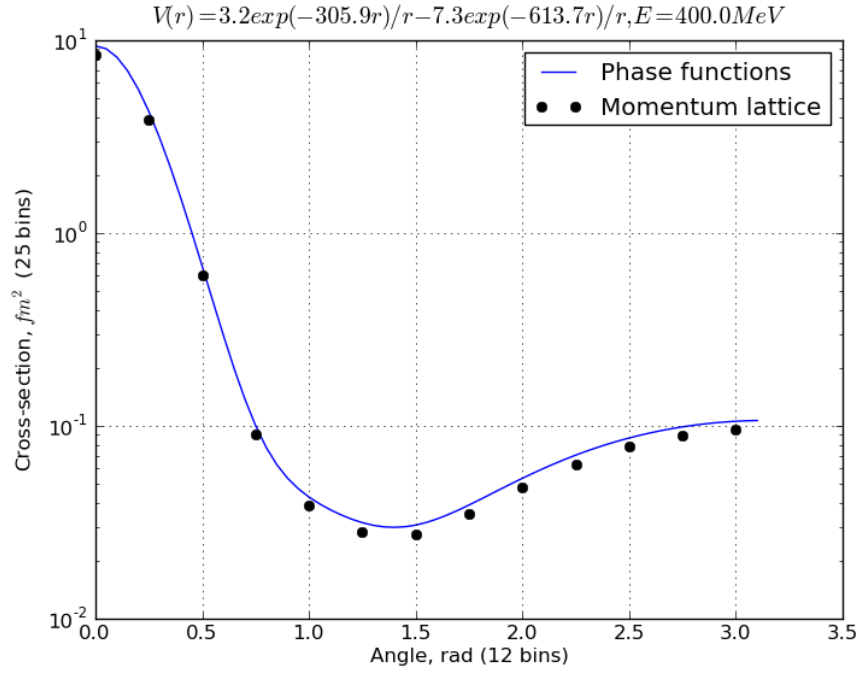


Рис. 3: Рассеяние на потенциале Мальфье-Тьёна при большой энергии.

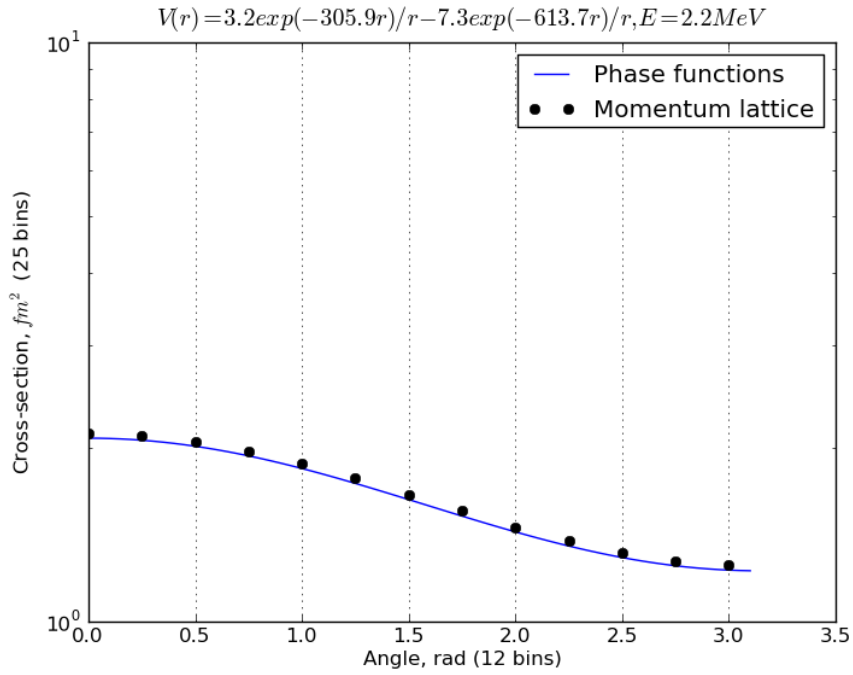


Рис. 4: Рассеяние на потенциале Мальфье-Тьёна при малой энергии.

Интегрирование по формуле 11 может быть выполнено аналитически

$$W(q', q, \theta', \theta) = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{V_R}{\sqrt{(q'^2 + q^2 - 2qq' \cos(\theta') \cos(\theta) + \mu_R)^2 - 4q'^2 q^2 \sin^2(\theta') \sin^2(\theta)}} + \frac{V_R}{\sqrt{(q'^2 + q^2 - 2qq' \cos(\theta') \cos(\theta) + \mu_A)^2 - 4q'^2 q^2 \sin^2(\theta') \sin^2(\theta)}} \right] \quad (19)$$

В данном случае результаты решения так же согласуются с методом фазовых функций (рисунки 3 и 4 ).

## 5 Заключение

В данной работе развит формализм для описания рассеяния без разложения по парциальным волнам. В качестве базисных состояний используются волновые пакеты полученные интегрированием по малым клеткам в импульсном пространстве. Отдельно рассмотрен случай аксиально-симметричных волновых пакетов, так как они возникают при рассеянии на центральных потенциалах. Получены формулы для произвольных операторов в представлении волновых пакетов, для функции Грина. Записано уравнение Липпманна-Швингера в представлении волновых пакетов.

Вычислено сечение рассеяния на двух потенциалах при различных энергиях. Результаты согласуются с методом фазовых функций, что позволяет утверждать о правильных результатах расчета по данному методу.

## Список литературы

- [1] Ch. Elster, J.H..Thomas, W. Gloeckle, *Two-Body T-Matrices without Angular Momentum Decomposition: Energy and Momentum Dependencies*. Few Body Syst. 24 (1998) 55-79
- [2] O. A. Rubtsova, V. N. Pomerantsev, and V. I. Kukulin, *Quantum scattering theory on the momentum lattice*. 10.1103/PhysRevC.79.064602
- [3] В. И. Кукулин, О. А. Рубцова, *Дискретная квантовая теория рассеяния*. ТМФ, 134:3 (2003), 460–486
- [4] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley, Massachusetts, 2nd Edition, 1994.
- [5] В.В. Бабилов, *Метод фазовых функций в квантовой механике*. УФН, 1967, 5/а