

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
имени Д.В. СКОБЕЛЬЦЫНА

На правах рукописи

Рубцова Ольга Андреевна

**Метод пакетной дискретизации континуума для
малочастичных систем и ядерной материи**

01.04.16 – Физика атомного ядра и элементарных частиц

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2021

Всем моим дорогим

Содержание

Введение	9
Глава 1. Решение задач рассеяния с использованием нормированных состояний	17
1.1. Состояния непрерывного спектра	17
1.2. Формализм собственных дифференциалов	18
1.3. Псевдосостояния и L_2 дискретизация континуума	20
1.4. Эквивалентная квадратура	21
1.5. Псевдосостояния как аппроксимации для собственных дифференциалов	23
1.6. Подходы, использующие нормированные состояния для описания континуума	26
1.6.1. R -матричный подход	27
1.6.2. Метод J -матрицы	28
1.6.3. Метод интегральных преобразований	30
1.6.4. Вариационные подходы	31
Глава 2. Формализм стационарных волновых пакетов	33
2.1. Определение стационарных волновых пакетов	33
2.2. Проекции операторов в пакетное подпространство	35
2.3. СВП в конфигурационном и импульсном пространстве.	37
2.3.1. Координатное поведение СВП	37
2.3.2. Вопрос полноты	38
2.3.3. СВП в импульсном представлении	40
2.4. Решение задачи рассеяния в представлении свободных волновых пакетов	40
2.4.1. Детали процедуры пакетной дискретизации	40
2.4.2. Волновые операторы Меллера и уравнение для волновой функции системы	42
2.4.3. Уравнение для полной резольвенты	44
2.4.4. Дискретизованное представление для оператора перехода	45
2.4.5. Условие унитарности для оператора перехода	46
2.5. Случай комплексного потенциала взаимодействия	46

2.6.	Возмущенные волновые пакеты	48
2.7.	Решение задачи рассеяния заряженных частиц	48
2.7.1.	Кулоновские волновые пакеты	48
2.7.2.	Сравнение точных кулоновских волновых пакетов и псевдосостояний.	50
2.8.	Многоканальная задача	52
2.8.1.	Пакетный базис для многоканальной задачи	52
2.8.2.	Уравнение для оператора перехода	54
2.9.	Приложения в двухчастичной задаче	54
2.9.1.	Расчеты для оптического нелокального нуклон-ядерного потенциала	54
2.9.2.	Рассеяние двух α -частиц	57
2.9.3.	Описание NN рассеяния в дибарионной модели	59
2.10.	Обсуждение результатов	64
Глава 3.	Решение задач рассеяния на основе спектральных разложений	66
3.1.	Вводные замечания	66
3.2.	Дискретное представление для ФСС	67
3.2.1.	Функция спектрального сдвига	67
3.2.2.	Квазинепрерывный спектр	68
3.3.	Метод дискретных спектральных сдвигов	70
3.3.1.	Определение фазовых сдвигов из спектральных сдвигов	70
3.3.2.	Случай комплексного потенциала взаимодействия	71
3.4.	Вычисление ФСС из разности интегральных плотностей спектра	74
3.4.1.	Связь ФСС со спектральной плотностью	74
3.4.2.	ФСС для квазинепрерывного спектра	75
3.4.3.	Интегральная плотность для задачи рассеяния в ящике	78
3.4.4.	J -матричный формализм	81
3.4.5.	Вычисление фазового сдвига через линейную аппроксимацию для интегральной плотности	82
3.5.	Вычисление ФСС в гауссовом базисе	83
3.5.1.	Гауссов базис на сетке Чебышева	83
3.5.2.	Набор гауссовых базисов	85

3.5.3.	Вычисление интегральных плотностей и фазовых сдвигов	87
3.5.4.	Фазовые сдвиги для модельного потенциала	88
3.5.5.	Рассеяние протонов на ядре ^{12}C	92
3.6.	Многоканальная задача	93
3.6.1.	Дискретизованный вырожденный спектр	94
3.6.2.	Многоканальный базис стационарных волновых пакетов	97
3.6.3.	Многоканальные псевдосостояния и восстановление многоканальной S -матрицы	98
3.7.	Иллюстрации к многоканальной задаче	101
3.7.1.	Парциальные фазовые сдвиги для Московского NN потенциала	101
3.7.2.	Модельная задача рассеяния дейтрона на ядре	102
3.8.	Заключение	105
Глава 4.	Пакетный базис в трехчастичной задаче	107
4.1.	Трехчастичный пакетный базис свободного гамильтониана	107
4.2.	Матрица свободной резольвенты в решеточном базисе канала a	109
4.3.	Матрица перестановок в пакетном базисе	111
4.4.	Собственные пакетные подпространства канальных гамильтонианов	112
4.5.	Канальная резольвента в собственном пакетном подпространстве	113
4.6.	Построение базиса канального гамильтониана из решеточного	115
4.6.1.	Взаимодействующие волновые пакеты и псевдосостояния	115
4.6.2.	Случай, когда двухчастичный гамильтониан является многоканальным	116
4.7.	Пакетные базисы для систем, состоящих из нескольких тел	118
Глава 5.	Упругое рассеяние и развал в трехнуклонной системе	119
5.1.	Введение	119
5.2.	Описание трехнуклонной системы	120
5.2.1.	Трехчастичный пакетный базис для $3N$ системы	122
5.2.2.	Матричный аналог уравнения АГС в пакетном базисе	123
5.3.	Амплитуда и сечение упругого рассеяния	125
5.4.	nd развал в пакетной технике	128
5.4.1.	Однокомпонентная амплитуда развала	128

5.4.2.	Процедура усреднения для амплитуд развала.	131
5.4.3.	Вычисление амплитуд развала	132
5.4.4.	Сечение развала	133
5.5.	Обсуждение результатов	135
Глава 6. Динамическое описание прямых ядерных реакций в пакетном представлении		
		137
6.1.	Вводные замечания	137
6.2.	Рассеяние составной частицы на бесструктурной мишени	138
6.2.1.	Метод редукции к системе связанных каналов	139
6.2.2.	Интегральный формализм	140
6.2.3.	Уравнение для оператора перехода в пакетном представлении	142
6.3.	Сравнение результатов ССК и решения трехчастичного УЛШ в пакетном базисе	143
6.3.1.	Расчет для модельного потенциала	143
6.3.2.	Упругое рассеяние $d + {}^{16}\text{O}$	145
6.3.3.	Обоснование многоканальной редукции	147
6.4.	Сравнение результатов двух методов дискретизации: пакетной техники и метода CDCC	148
6.4.1.	Параметры, использовавшиеся для расчетов на основе метода CDCC	148
6.4.2.	Параметры, использовавшиеся в методе пакетной дискретизации континуума	149
6.4.3.	Сечение упругого рассеяния при $E_d = 80$ МэВ	149
6.4.4.	$E_d = 21.6$ МэВ. Эффект закрытых каналов	150
6.4.5.	Обсуждение результатов	154
6.5.	Эффективный оператор взаимодействия составной частицы с ядром	155
6.6.	Заключительные замечания	158
Глава 7. Описание процессов в ядерной материи		
		160
7.1.	Вводные замечания	160
7.2.	Уравнение Бете–Голдстоуна	162
7.2.1.	Полный пропагатор	165

7.2.2.	Вычисление матрицы реакции в пакетном представлении	167
7.3.	Вычисление уравнения состояния симметричной ядерной материи	169
7.3.1.	Двухчастичные связанные состояния	169
7.3.2.	Одночастичная собственная энергия	172
7.3.3.	Вычисление одночастичного потенциала и уравнения состояния	173
7.4.	Учет двухдырочных корреляций	176
7.4.1.	Уравнение для T -матрицы с пропагатором Галицкого–Фейнмана	176
7.4.2.	Формулировка в пространстве относительных импульсов	178
7.4.3.	Двухчастичный пропагатор как резольвента эффективного гамильтониана	180
7.5.	Спектр эффективного гамильтониана и возникновение спаривания	181
7.5.1.	Решение задачи на собственные значения в пакетном базисе	182
7.6.	Связанные состояния эффективного гамильтониана	186
7.6.1.	Фазовый переход для связанных каналов 3SD_1	186
7.6.2.	Характеристическое уравнение	187
7.6.3.	Канал 1S_0	189
7.6.4.	Собственные значения для связанных каналов 3PF_2	191
7.6.5.	Положение реальных частей собственных значений	192
7.7.	Функции связанных состояний и импульсные зависимости щелей	193
7.8.	T -матрица в ядерной среде	196
7.8.1.	Спектральное разложение для пропагатора	196
7.8.2.	T -матрица на массовой поверхности	198
7.8.3.	Выделение запаздывающей и опережающей частей из T -матрицы	202
7.9.	Случай ненулевого импульса центра масс	205
7.9.1.	Вычисление T -матрицы	205
7.9.2.	Сверхтекучие щели для ненулевого K	206
7.10.	Заключительные замечания	209
Заключение		211
Список литературы		215
Приложения		234
А. Детали расчетов в пакетном базисе		234

Б. Гауссов базис	235
В. Вычисление элементов матрицы оператора перестановки	236

Введение

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности.

Описание процессов в непрерывном спектре нескольких частиц является одной из самых востребованных, но и одной из самых трудоемких задач. Такие процессы представляют значимый источник информации о составных системах, о взаимодействии и структуре сталкивающихся частиц. Ярким примером здесь являются малонуклонные системы, расчет амплитуд упругих и неупругих столкновений в которых является важным тестом для современных моделей нуклон-нуклонного (NN) и трехнуклонного ($3N$) взаимодействий. При этом техника эксперимента постоянно совершенствуется, появляются новые данные о прямых реакциях с участием сложных многофрагментных частиц, таких как протонно- и нейтронно-избыточные ядра и др. Для корректной трактовки таких реакций требуется детальное решение задачи рассеяния нескольких тел.

Существенный прорыв в теории рассеяния нескольких тел произошел благодаря появлению формализма уравнений Фадеева [1–3], на основе которого развилась новая область прецизионных расчетов в малочастичных системах [4–9]. Однако на практике формулировка и решение таких задач сталкивается с различными проблемами, связанными со сложными граничными условиями, особенно выше порогов развала, с отделением физических решений от нефизических (например, запрещенных условиями симметрии и т.п.), с присутствием сложных движущихся особенностей по энергии и импульсам в ядрах уравнений. Кроме того, фазовое пространство стремительно растет при увеличении числа частиц, поэтому размерность решаемых интегральных или дифференциальных уравнений становится огромной [9]. Задачи рассеяния в ядерных системах имеют свои особенности, связанные с наличием тезорных компонент взаимодействия, большим числом спин-угловых конфигураций в парных подсистемах, использованием оптических нуклон-ядерных потенциалов, присутствием дальнodelствующего кулоновского взаимодействия.

Показателем этих трудностей служит современная ситуация, когда достаточно точно находят параметры связанных состояний в системах, состоящих из десятков частиц, но до сих пор сталкиваются с проблемами в аккуратной трактовке рассеяния в трех- и четырехчастичных системах. Так, решение задач упругого и неупругого

рассеяния в $3N$ системе с реалистическими взаимодействиями уже является очень трудоемким и требует использования многопроцессорных компьютеров. Детальные сравнительные расчеты для $4N$ системы появились относительно недавно [7, 8] и доступны только нескольким группам в мире, а $5N$ задача была решена только в 2018 году Р. Лазаускасом [9].

Поэтому развитие эффективных методов прецизионного решения задач в непрерывном спектре является весьма актуальным в настоящее время. Не менее востребованным является развитие эффективных техник для описания процессов в ядерной материи.

Здесь можно обратить внимание на методы, близкие к методам решения задач на связанные состояния систем, которые используют нормированные L_2 состояния. Такие методы L_2 -типа для решения задач рассеяния появились достаточно давно, а в настоящее время они продолжают активно развиваться. Среди таких подходов — решение задачи рассеяния в ящике [10], составляющее основу современных решеточных КХД расчетов, широко известный метод R -матрицы [11–16], техника эквивалентной квадратуры [17, 18] и метод моментов Стилтеса–Чебышева [19–21], метод интегральных преобразований (МИП) [22–26], метод осцилляторного представления (ОП) [27–33] и J -матричный подход [34–38], методы, использующие многоканальную редукцию, включая метод связанных каналов дискретизованного континуума (CDCC) [39–49], метод связанных каналов реакции (CRC) и его обобщение с учетом псевдоканалов дискретизованного континуума [50, 51], сходящийся метод сильной связи каналов (СМССК) [52–55], различные реализации метода комплексного поворота (complex scaling method) [56, 57], а также вариационные техники [58] и многие другие подходы (см. также недавний обзор [59]). Все эти подходы используются активно в атомной, химической, ядерной физике, а также в физике твердого тела и статистической физике.

Несмотря на такое многообразие подходов L_2 -типа многие из них используют свойства конкретных базисов или преобразований, часть из этих подходов разработана для конкретных задач или областей исследования. Вместе с тем большой интерес представляет изучение общих закономерностей, возникающих при формулировке задач рассеяния в терминах нормируемых состояний, а также развитие на этой основе общего подхода к решению задач рассеяния нескольких тел с помощью L_2 дискретизации

континуума. Можно ожидать, что такой подход будет универсален с точки зрения различных приложений, при этом схемы решения задач рассеяния будут близки к используемым для нахождения связанных состояний систем.

Цели и задачи диссертационной работы. Целью работы является развитие общего подхода к решению задач рассеяния нескольких тел на основе дискретизации континуума, а также его применение для описания различных процессов в малочастичных системах и в ядерной материи.

В основе такого подхода лежит специальный формализм нормированных аналогов функций рассеяния — стационарных волновых пакетов, разработанный автором диссертации. Состояния такого типа были введены как собственные дифференциалы точных функций непрерывного спектра в начале XX века учениками Давида Гильберта в спектральной теории сингулярных дифференциальных операторов. Эти объекты можно встретить в книгах и работах Германа Вейля [60], Евгения Вигнера [61], Ганса Бете [62] и др., где они используются для корректной трактовки ненормируемых состояний континуума (не принадлежащих гильбертову пространству) в рамках стандартной теории эрмитовых операторов в гильбертовом пространстве (см. также подробно в книгах [63, 64]).

В серии работ [65–90], составивших основу данной диссертационной работы, был предложен общий подход к решению задач рассеяния, в котором такие собственные дифференциалы или стационарные волновые пакеты рассматриваются как удобный базис, в который проектируются операторы и волновые функции системы. Поскольку базисные состояния явно связаны с исходными функциями рассеяния, многие сложные операторы, такие как свободная и канальная резольвенты, имеют явные аналитические конечномерные представления в таком базисе.

При этом в диссертационной работе решались следующие задачи:

- развитие формализма стационарных волновых пакетов и метода пакетной дискретизации континуума (МПДК) для решения двухчастичных многоканальных задач рассеяния на основе матричных аналогов интегральных уравнений;
- развитие методов решения многоканальных задач рассеяния на основе спектральных свойств полного и невозмущенного гамильтонианов;

- обобщение МПДК для решения задач рассеяния в трехчастичных системах на основе формализма уравнений Фадеева и применение развитого метода для описания упругого рассеяния и развала в $3N$ системе;
- описание прямых ядерных реакций на основе МПДК;
- обобщение МПДК для расчетов в ядерной материи.

Объект и предмет исследования. Объектом исследования в диссертации является задача рассеяния нескольких тел в свободном пространстве и в ядерной среде. Предметом исследования является развитие формализма для решения таких задач на основе дискретизации континуума.

Методология исследования. За основу в диссертации взят формализм теории рассеяния для малочастичных систем, а также формализм интегральных уравнений для бесконечной ядерной материи. При этом в работе получены проекции операторов в соответствующие базисы стационарных волновых пакетов и выведены матричные аналоги точных уравнений, которые далее используются для решения конкретных задач. Для каждого расчета исследованы вопросы сходимости результатов с увеличением размерности используемого базиса. Там, где это возможно, результаты, полученные на основе МПДК, сравнивались с результатами, найденными в рамках альтернативных подходов.

Численные расчеты проводились на основе программ, написанных непосредственно автором диссертации. Исключение составляют программы для решения задачи рассеяния в трехнуклонной системе, созданные В.Н. Померанцевым при частичном участии автора [91–93].

Научная новизна. В диссертации предложены и обоснованы новые способы решения задач в непрерывном спектре нескольких частиц, объединенные общей идеей дискретизации непрерывного спектра и использованием формализма стационарных волновых пакетов. При этом впервые выполнены расчеты в рамках обновленной версии дибарионного нуклон-нуклонного взаимодействия, учитывающего наличие ненуклонных степеней свободы. Существенно новыми являются результаты, полученные в многоканальной задаче, связанные с обобщением формализма функций спектрального сдвига. Впервые предложена корректная трактовка многоканальных псевдосостояний. Также впервые выполнены полные трехчастичные фаддеевские

расчеты в трехчастичном решеточном базисе, состоящем из нормированных состояний. В области прямых ядерных реакций впервые детально исследован вклад закрытых каналов, возникающих при редукции исходной задачи рассеяния трех тел к многоканальной двухчастичной задаче, и показано, что этот вклад увеличивается при уменьшении энергии столкновения. Кроме того, в диссертации разработан новый диагонализационный подход к вычислению матрицы реакции в ядерной среде, который приводит к более экономичным схемам нахождения уравнения состояния. Благодаря обобщению такого подхода на учет двухдырочных корреляций, в работе получен новый метод расчета сверхтекучих щелей в ядерной материи.

Научная и практическая значимость проведенных исследований заключается в развитии общего подхода к решению задач рассеяния в малочастичных системах, обладающего широкой областью применения. Разработанный в диссертации метод пакетной дискретизации континуума имеет ряд преимуществ перед традиционными подходами. Благодаря полученным явным конечномерным представлениям для резольвент гамильтонианов, становится возможным использовать матричные аналоги интегральных уравнений для волновых функций и операторов перехода. При этом в силу усреднения энергетических зависимостей в ядрах уравнений, последние уже не содержат сингулярностей и могут быть решены непосредственно при вещественных энергиях. Потенциалы взаимодействия представляются матрицами в пакетном базисе, поэтому не возникает отличий при рассмотрении нелокальных взаимодействий. В итоге, схема решения близка к алгоритмам, используемым для решения задач на связанные состояния.

Общий подход, разработанный в диссертации, может быть использован для решения задач не только в ядерной, но и в атомной физике, а также в физике твердого тела. При этом полученные спектральные разложения в дискретном представлении для резольвент, а также дискретизованные представления для спектральной плотности могут быть полезны для развития других подходов, использующих L_2 дискретизацию. Помимо базиса стационарных волновых пакетов также могут использоваться другие L_2 базисы, такие как неортогональный гауссов базис [94].

Некоторые элементы пакетной техники уже показали свою эффективность в рамках других подходов. Так, техника кулоновских волновых пакетов был успешно использована в рамках СМССК для описания сечения ионизации в ион-атомных

столкновениях при низких энергиях порядка 1 эВ [55], где такая методика позволила выявить новые особенности сечений, которые не были известны ранее.

Кроме того, на основе развитого формализма были выполнены первые параллельные вычисления на графическом процессоре (GPU) для трехнуклонной системы [92, 93]. Также этот формализм послужил основой для вычислений в рамках дибарионной модели нуклон-нуклонного взаимодействия [95–97], учитывающей дополнительные ненуклонные степени свободы.

Развитый диагонализационный подход для расчетов в ядерной материи допускает прямое обобщение для использования в рамках формализма самосогласованных функций Грина, где он должен привести к более экономичным схемам решения.

Степень достоверности результатов. Часть результатов работы получена на основе аналитических преобразований. Достоверность результатов численных расчетов подтверждается согласием с результатами, полученными на основе других подходов. Также для ряда конкретных примеров получено хорошее согласие с экспериментальными данными. Большая часть результатов опубликована в авторитетных международных журналах по рассматриваемой тематике.

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Вклад автора в работы по теме диссертации, выполненные с соавторами, заключался в разработке методов, постановке решаемых задач, анализе полученных результатов. Кроме того, большая часть практических вычислений, результаты которых приводятся в работе, выполнена автором самостоятельно. Исключение составляют коллективные расчеты в трехнуклонной системе, но и здесь автор принимала активное участие в разработке численной схемы решения.

Апробация работы Материалы диссертации неоднократно докладывались и обсуждались на научных семинарах НИИЯФ МГУ и ЛТФ ОИЯИ, на международных конференциях по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра в 2008, 2010, 2012 и 2020 годах, на международных конференциях по проблемам в малочастичных системах в 2009, 2015 и 2018 годах, а также на европейских конференциях по малочастичным системам в 2002, 2016 и 2019 годах.

Положения, выносимые на защиту:

1. Матрица резольвенты гамильтониана канала имеет диагональный вид в

собственном пакетном базисе этого гамильтониана. Собственные значения такой матрицы находятся в явном виде и зависят только от параметров дискретизации спектра.

2. Наблюдаемые в задачах рассеяния двух и трех тел находятся из решений конечномерных аналогов интегральных уравнений теории рассеяния в соответствующих пакетных базисах.
3. Элементы S -матрицы в многоканальных задачах рассеяния при многих энергиях вычисляются без решения уравнений на основе однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана системы в многоканальном пакетном базисе невозмущенного гамильтониана.
4. Вклады закрытых каналов при многоканальной редукции задач рассеяния составных частиц на ядрах важны при низких энергиях столкновения. Нефизические энергетические особенности, вызванные многоканальной редукцией, не проявляются в сечениях, если взаимодействия фрагментов частицы с ядром задаются комплексными оптическими потенциалами. Эффективные нелокальные потенциалы взаимодействия составных частиц вычисляются явно на основе пакетной техники.
5. Матрица реакции в ядерной среде при многих энергиях и относительных импульсах нуклонов вычисляется на основе однократной диагонализации матрицы эффективного двухчастичного гамильтониана, определенного в Паули-разрешенном двухчастичном подпространстве.
6. Импульсные зависимости сверхтекучих щелей в ядерной среде находятся из собственных функций эффективного гамильтониана, полученного для случая учета двухчастичных и двухдырочных корреляций.

Публикации. Соискатель имеет 35 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 26 работ [65–90], опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности. 9 из этих работ опубликованы в журналах, входящих в top-25 по классификации Web of Science.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из Введения, 7 глав, заключения, библиографии и трех приложений. Общий объем диссертации 239 страниц, включено 65 рисунков. Библиография включает 220 наименований на 19 страницах.

В первой главе описываются особенности решения задач рассеяния в терминах нормируемых состояний, а также приводится краткий обзор существующих L_2 методов. Во второй главе дается описание формализма стационарных волновых пакетов для двухчастичных задач, включая многоканальные. Здесь же приводятся примеры решения задач нуклон-ядерного и нуклон-нуклонного рассеяния, а также задачи рассеяния заряженных частиц. В главе 3 рассматривается общий метод решения многоканальных задач рассеяния без решения уравнений теории рассеяния, а лишь на основе спектральных свойств полного и свободного гамильтонианов. Такой подход использует результаты теории функции спектрального сдвига. Обобщение пакетного формализма на задачу рассеяния трех тел приводится в главе 4.

Главы 5, 6 и 7 посвящены практическому применению пакетного подхода. В главе 5 на основе фаддеевского формализма рассматривается упругое рассеяние и развал в трехнуклонной системе. Глава 6 посвящена описанию рассеяния составных частиц на ядрах с учетом их динамической поляризации. Также в этой главе описывается техника построения эффективных операторов взаимодействия между составными частицами, учитывающих их промежуточные возбуждения в континуум. Седьмая глава посвящена применению метода дискретизации континуума для описания процессов в ядерной среде. В конце работы приводится заключение с основными результатами работы. Для удобства читателей в диссертации размещены три Приложения, в которых приводятся сетки дискретизации, используемые в расчетах, дается описание параметров гауссова базиса, применяемого для части вычислений, а также выводится формула для матричных элементов оператора перекрывания в пакетном базисе для $3N$ системы.

Поскольку главы 5, 6 и 7 посвящены конкретным приложениям развитого подхода, а темы исследований в них заметно отличаются, автор посчитала уместным предварить каждую из этих глав небольшим введением с кратким обзором существующих методов. Также глава 3 представляет собой почти замкнутое исследование по методу дискретных спектральных сдвигов, поэтому во введении к ней приводится краткий обзор похожих техник.

Глава 1. Решение задач рассеяния с использованием нормированных состояний

1.1. Состояния непрерывного спектра

Введем сначала некоторые обозначения. В этой главе будет рассмотрена стационарная задача рассеяния двух частиц с короткодействующим, локальным и сферически симметричным потенциалом взаимодействия v . Таким образом, орбитальный момент сохраняется, и уравнение Шредингера для волновой функции системы сводится к уравнениям для радиальных частей волновых функций при фиксированном значении орбитального момента L . Ниже будут рассмотрены в основном радиальные части волновых функций, которые удовлетворяют уравнению Шредингера:

$$\left(\frac{1}{2\mu} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{L(L+1)}{r^2} \right] + v(r) \right) \psi^L(r, E) = E\psi^L(r, E), \quad (1.1)$$

где использованы единицы, в которых $\hbar = 1$, и μ — приведенная масса. Для удобства будем опускать индекс орбитального момента L там, где это возможно.

Оператор в левой части уравнения (1.1) — это полный гамильтониан h , который может быть записан в виде:

$$h = h_0 + v, \quad (1.2)$$

где h_0 — свободный гамильтониан (оператор кинетической энергии). Далее будем писать все соотношения в операторном виде, используя обозначения Дирака, преимущественно не выделяя координатное или импульсное представление. В этой главе предполагается, что гамильтонианы h_0 и h эрмитовы¹ и имеют простые непрерывные спектры $[0, \infty)$.

Полный гамильтониан h может также иметь дискретный спектр, отвечающий связанным состояниям системы. Соответствующие функции связанных состояний h обозначим как $\{|\psi_n^b\rangle\}_{n=1}^{N_b}$, в то время как функции непрерывного спектра обозначаются как $|\psi(E)\rangle$. Они удовлетворяют уравнению Шредингера (операторная форма уравнения (1.1))

$$h|\psi(E)\rangle = E|\psi(E)\rangle \quad (1.3)$$

¹ Случай с неэрмитовым полным гамильтонианом с комплексным потенциалом взаимодействия как в парной, так и в трехчастичной задачах, будут рассмотрены отдельно.

и условию ортогональности

$$\langle \psi(E) | \psi(E') \rangle = \delta(E - E'). \quad (1.4)$$

В этой работе также будут использоваться волновые функции непрерывного спектра $|\psi_q\rangle = \sqrt{\frac{q}{\mu}} |\psi(E)\rangle$, нормированные на δ -функцию по импульсу $q = \sqrt{2\mu E}$:

$$\langle \psi_q | \psi_{q'} \rangle = \delta(q - q'). \quad (1.5)$$

1.2. Формализм собственных дифференциалов

Одна из проблем описания непрерывного спектра некоторого гамильтониана $\hat{h}$ состоит в том, что соответствующие волновые функции не имеют конечной нормировки (в отличие от функций связанных состояний), а значит, не принадлежат гильбертову пространству. Строго говоря, такие ненормируемые состояния не являются собственными функциями гамильтониана $\hat{h}$ и некоторые основные свойства, такие как эрмитовость и даже ортогональность друг другу волновых функций непрерывного спектра, отвечающих разным энергиям E , не могут быть доказаны в обычном смысле [61, 63, 64].

В настоящее время эта проблема решается путем введения нормировки на δ -функцию Дирака (1.4) и обобщения гильбертова пространства на оснащенное гильбертово пространство. Однако в прошлом часто использовали другой формальный подход (см. например [61–64]), основанный на формализме собственных дифференциалов Вейля, который был развит учениками Давида Гильберта при изучении спектральной теории сингулярных дифференциальных операторов в начале XX века² [60].

Для определения собственного дифференциала следует ввести интервал непрерывного спектра с небольшой шириной ΔE вокруг рассматриваемого значения E . Далее собственный дифференциал вводится как интеграл ненормируемой волновой функции континуума по интервалу:

$$|\psi(E, \Delta E)\rangle = \int_E^{E+\Delta E} dE |\psi(E)\rangle. \quad (1.6)$$

² Интересно упомянуть, что впервые собственные дифференциалы появились в работе другого ученика Давида Гильберта — Эрнста Хеллингера, однако широкую известность они получили благодаря работам Германа Вейля, и поэтому, по-видимому, и носят его имя.

Легко видеть, что такое состояние имеет конечную нормировку (благодаря интегрированию) и принадлежит гильбертову пространству. Таким образом, можно обобщить понятие нормировки состояний: состояние $|\psi(E)\rangle$ считается нормируемым, если его собственный дифференциал имеет конечную норму [62].

Для трактовки всего непрерывного спектра его следует разбить на непересекающиеся интервалы (т.е. дискретизовать). Система собственных дифференциалов образует ортонормированный набор [64]:

$$\langle\psi(E', \Delta E')|\psi(E, \Delta E)\rangle = \begin{cases} \Delta E, & \text{для совпадающих интервалов,} \\ 0, & \text{для разных интервалов} \end{cases}. \quad (1.7)$$

Важно подчеркнуть, что набор собственных дифференциалов дает диагональное представление для гамильтониана:

$$\frac{\langle\psi(E', \Delta E')|h|\psi(E, \Delta E)\rangle}{\Delta E} = \begin{cases} E + \frac{1}{2}\Delta E, & \text{для совпадающих интервалов,} \\ 0, & \text{для разных интервалов} \end{cases}. \quad (1.8)$$

Также эти состояния имеют конечное перекрывание с исходными (ненормированными) функциями непрерывного спектра:

$$\langle\psi(E')|\psi(E, \Delta E)\rangle = \begin{cases} 1, & E' \in (E, E + \Delta E), \\ 0, & E' \notin (E, E + \Delta E) \end{cases}. \quad (1.9)$$

Полная система собственных функций для эрмитова гамильтониана h строится в рассматриваемом формализме из функций связанных состояний $|\psi_n^b\rangle$ и собственных дифференциалов [61, 64]. Другими словами, для произвольной волновой функции (из гильбертова пространства) $|\Phi\rangle$ верно следующее разложение:

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=1}^{N_b} C_n |\psi_n^b\rangle + \sum C(E) |\psi(E, \Delta E)\rangle, \quad (1.10)$$

где сумма по бесконечному, но счетному набору собственных дифференциалов имеет символический смысл. Переходя к пределу $\Delta E \rightarrow 0$, получаем привычное разложение волновой функции $|\Phi\rangle$ по функциям связанных состояний и состояний континуума гамильтониана h :

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=1}^{N_b} C_n |\psi_n^b\rangle + \int_0^\infty dE \tilde{C}(E) |\psi(E)\rangle \quad (1.11)$$

Дискретная сумма в правой части (1.10) стремится к интегралу в правой части (1.11) по функциям континуума $|\psi(E)\rangle$ в смысле интеграла Римана–Стилтьеса [64]. Также

можно показать [64], что конечная нормировка собственных дифференциалов (1.7) приводит к нормировке функций непрерывного спектра на δ -функцию по энергии (1.4).

Сейчас такой способ определения собственных функций непрерывного спектра гамильтониана не используется. Однако в этой работе будет развит подход, в котором собственные дифференциалы рассматриваются как базис для решения задач рассеяния в дискретном представлении. Ниже будет показано, что такой “классический” подход очень плодотворен для расчетов в малочастичных системах.

Есть также другие широко используемые состояния дискретизованного континуума, так называемые псевдосостояния. Ниже будет показано, что такие два типа состояний можно связать друг с другом.

1.3. Псевдосостояния и L_2 дискретизация континуума

Псевдосостояния возникают при приближенной трактовке непрерывного спектра квантовой системы, связанной с проектированием волновых функций рассеяния в ортонормированный L_2 базис $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^N$ конечной размерности N .

Если подставить разложение волновой функции гамильтониана по такому базису $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N C_n |\phi_n\rangle$ в уравнение Шредингера (1.3), получится следующая система линейных алгебраических уравнений для коэффициентов разложения $\{C_n\}_{n=1}^N$

$$\sum_{k=1}^N [h_{nk} - E\delta_{nk}] C_k = 0, \quad n = 1, \dots, N, \quad (1.12)$$

которая представляет собой задачу на собственные значения матрицы гамильтониана с элементами $h_{nk} \equiv \langle \phi_n | h | \phi_k \rangle$, решаемую на основе диагонализации этой матрицы. После такой диагонализации получаются набор собственных значений³ $\{\epsilon_n^*\}_{n=1}^N$ и собственных функций $|\psi_n\rangle = \sum_{k=1}^N C_k^n |\phi_k\rangle$ ($n = 1, \dots, N$). Этот дискретный набор можно поделить на две части: собственные функции с нижними собственными значениями являются приближениями для функций связанных состояний гамильтониана, если они существуют (для короткодействующего потенциала их число конечно), в то время как остальные состояния отвечают области непрерывного спектра и образуют дискретизованный континуум. В отличие от точных функций непрерывного спектра

³ Ниже мы обозначаем собственные значения верхним индексом * для того, чтобы отличить их от граничных точек интервалов дискретизации, которые появятся позже.

такие дискретные собственные функции имеют конечную нормировку. Эти состояния называются *псевдосостояниями* непрерывного спектра гамильтониана h .

Для псевдосостояний выполняются условия ортонормированности, аналогичные условиям для собственных дифференциалов (1.7-1.8):

$$\begin{aligned}\langle \psi_n | \psi_k \rangle &= \delta_{nk}, \\ \langle \psi_n | h | \psi_k \rangle &= \epsilon_n^* \delta_{nk}\end{aligned}\tag{1.13}$$

Трудность прямого использования псевдосостояний вместо точных функций рассеяния состоит в отличии нормировок первых и вторых. При этом функции псевдосостояний имеют схожее поведение с точными функциями рассеяния на конечном носителе, а далее первые убывают, что и обеспечивает их конечную нормировку. Несмотря на это, псевдосостояния вместе с функциями связанных состояний образуют полный набор состояний (представляющий ту же линейную оболочку, что и исходный базис), который можно использовать, например, для аппроксимации спектральных разложений операторов или волновых функций.

1.4. Эквивалентная квадратура

Часто необходимо найти не сам оператор, а только его среднее значение для некоторого нормированного состояния $|\Phi\rangle$. Примером такого использования является расчет вероятностей перехода между связанными состояниями подсистемы с учетом промежуточных возбуждений в континуум. В частности, вычисление функций отклика в методе интегральных преобразований [25] или вычисление элементов t -матрицы на основе спектрального разложения полной резольвенты системы [20].

Рассмотрим матричный элемент некоторого оператора $B = f(h)$, функционально зависящего от гамильтониана h . Запишем спектральное разложение для оператора B по полному набору состояний h [98]:

$$\langle \Phi | B | \Phi \rangle = \sum_{n=1}^{N_b} f(\epsilon_n^*) |\langle \Phi | \psi_n^b \rangle|^2 + \int_0^\infty dE f(E) |\langle \Phi | \psi(E) \rangle|^2.\tag{1.14}$$

Спектральное разложение (1.14) включает не сами волновые функции непрерывного спектра $|\psi(E)\rangle$, а квадратичные формы $|\langle \Phi | \psi(E) \rangle|^2$, которые являются конечными величинами, поэтому не возникает сложностей, связанных с ненормируемостью функций рассеяния. Более того, эти квадратичные формы положительно определены.

Поэтому интеграл по непрерывному спектру можно аппроксимировать дискретной суммой по псевдосостояниям:

$$\langle \Phi | B | \Phi \rangle \approx \sum_{n=1}^{N_b} f(\epsilon_n^*) |\langle \Phi | \psi_n^b \rangle|^2 + \sum_{n=N_b+1}^N f(\epsilon_n^*) |\langle \Phi | \psi_n \rangle|^2. \quad (1.15)$$

Такое “спектральное разложение” по псевдосостояниям можно трактовать как некоторую эффективную квадратуру для исходного интеграла по континууму (1.14). Такой подход был предложен для решения различных задач в атомной физике [17–20] на основе конечномерных аппроксимаций для функций Грина. Например, термин эквивалентная квадратура (ЭК) был введен в методе моментов для вычисления неотрицательных спектральных плотностей [17, 19]. Узловые точки ЭК совпадают с энергиями псевдосостояний, а соответствующие веса можно формально определить через соотношение между величинами, вычисленными с помощью псевдосостояний и функций непрерывного спектра при энергиях ϵ_n^* :

$$|\langle \Phi | \psi_n \rangle|^2 = \omega_n |\langle \Phi | \psi(\epsilon_n^*) \rangle|^2, \quad n = N_b + 1, \dots, N. \quad (1.16)$$

При развитии метода эквивалентной квадратуры было найдено, что веса квадратуры не зависят от выбора функции $|\Phi\rangle$, а зависят от функций псевдосостояний и спектральной плотности конкретной системы. В этом смысле значения ω_n можно рассматривать как коэффициенты перехода от нормированных состояний $|\psi_n\rangle$ к ненормируемым функциям $|\psi(\epsilon_n^*)\rangle$.

Следует отметить, что в общем случае поиск весов эквивалентной квадратуры — это весьма нетривиальная проблема, поскольку точные функции непрерывного спектра неизвестны. Однако для многих задач, в которых *полные спектральные разложения* заменяются на суммы по псевдосостояниям, точное знание таких весов и не требуется. Например, функции псевдосостояний используются для учета возбуждений в промежуточный континуум налетающей частицы или мишени при описании рассеяния составных частиц в атомной [54] и ядерной [48] физике. В этих случаях, как правило, псевдосостояния используются в разложении полной волновой функции системы для многоканальной редукции исходной задачи рассеяния нескольких тел.

Если же веса ЭК известны, то можно найти наблюдаемые в теории рассеяния непосредственно из отдельных функций псевдосостояний. Действительно, запишем

выражение для амплитуды упругого рассеяния:

$$A(E) = \langle \psi_0(E) | v | \psi(E) \rangle. \quad (1.17)$$

Легко видеть, что функция $v|\psi_0(E)\rangle$, где $|\psi_0(E)\rangle$ — функция свободного движения, является квадратично-интегрируемой в случае короткодействующего потенциала взаимодействия v . Поэтому, как и в случае с вычислением матричных элементов оператора, можно использовать нормированные функции псевдосостояний вместо точных функций рассеяния:

$$\bar{A}_n \approx \langle \psi_0(\epsilon_n^*) | v | \psi_n \rangle. \quad (1.18)$$

Для того, чтобы найти коэффициент перехода от исходной “непрерывной” амплитуды $A(E)$ к “дискретной” $\bar{A}_n$ можно воспользоваться определением веса ЭК (1.16), что приведет к явному выражению:

$$A(\epsilon_n^*) \approx \frac{\bar{A}_n}{\sqrt{\omega_n}}. \quad (1.19)$$

Фактически проблема нахождения весов ω_n связана с вычислением спектральной плотности непрерывного спектра гамильтониана h . Один из способов ее определения заключается в вычислении моментов распределения энергии из функций псевдосостояний. Затем веса ЭК могут быть найдены из решения системы нелинейных алгебраических уравнений [20]. В то же время, для нахождения ЭК можно воспользоваться и формализмом собственных дифференциалов.

1.5. Псевдосостояния как аппроксимации для собственных дифференциалов

В работах автора [68, 69, 75] был предложен следующий способ определения коэффициентов перехода от нормированных состояний континуума к исходным ненормируемым. Здесь используется схожесть свойств собственных дифференциалов и псевдосостояний. В частности, оба типа функций ведут себя в некоторой ограниченной области пространства так же, как точные функции рассеяния, в то время как в асимптотической области каждая из функций убывает по-своему. Кроме того, оба набора функций имеют конечную нормировку, и матрица гамильтониана в таких наборах диагональна.

Это означает, что следует трактовать функции псевдосостояний как аппроксимации для собственных дифференциалов, а не для точных функций

рассеяния. Такую аппроксимацию можно рассматривать, если считать, что собственные значения для матриц гамильтониана в обоих базисах совпадают. Следует отметить, что связь между псевдосостояниями и собственными дифференциалами была фактически показана в работе [48] в рамках подхода CDCC. В этом подходе, о котором будет написано подробнее в главе 6, рассматриваемые два типа состояний использовались для описания рассеяния составной частицы на ядре. Однако прямая связь между двумя наборами состояний была установлена только для случая эквидистантного разбиения спектра.

В работах автора было показано, что соответствие между двумя наборами состояний наблюдается и в случае произвольных сеток дискретизации. На Рис. 1.1 сравниваются волновые функции псевдосостояний свободного гамильтониана, найденные в неминимальном гауссовом базисе (см. детали в работе [75]), с точными собственными дифференциалами (нормированными на единицу), построенными так, чтобы воспроизвести собственные энергии псевдосостояний ϵ_n^* . Хорошо видно, что два типа функций практически совпадают в некоторой внутренней области:

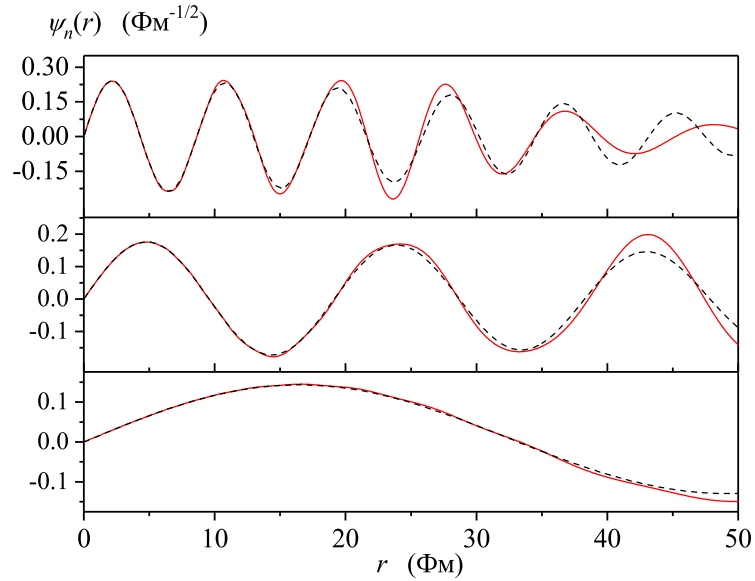


Рисунок 1.1. Сравнение псевдосостояний (сплошные кривые) гамильтониана свободного движения для NN системы, найденных в неминимальном гауссовом базисе, с точными собственными дифференциалами (штриховая кривая), построенными для такого же распределения собственных значений матрицы гамильтониана.

Используя такое явное соответствие между двумя типами функций, легко найти коэффициенты перехода к ненормированным состояниям континуума, поскольку для

собственных дифференциалов (см. определение (1.6)) они равны просто ширинам ΔE :

$$A(E) \approx \frac{\langle \psi_0(E) | v | \psi(E, \Delta E) \rangle}{\Delta E}. \quad (1.20)$$

Используя далее прямое соответствие между собственными дифференциалами (с учетом их нормировки) и псевдосостояниями (в общем случае ширина дискретизации может зависеть от индекса n), получаем примерное равенство:

$$\frac{\langle \psi_0(\epsilon_n^*) | v | \psi(\epsilon_n^*, \Delta E_n) \rangle}{\sqrt{\Delta E_n}} \approx \langle \psi_0(\epsilon_n^*) | v | \psi_n \rangle. \quad (1.21)$$

Сравнивая далее соотношения (1.19) и (1.20), получаем следующее приближенное выражение:

$$\omega_n \approx \Delta E_n. \quad (1.22)$$

Таким образом, получается интересный результат: коэффициенты перехода от псевдосостояний к точным функциям континуума определяются в первую очередь распределением их энергий ϵ_n^* , а не видом выбранного базиса $|\phi_n\rangle$. На самом деле, вид базисных функций, конечно, определяет и распределение дискретных псевдоэнергий, поэтому такие распределения будут отличаться для разных базисов.

В качестве иллюстрации рассмотрим свободное движение частицы в сферической полости размера a . Решения радиального уравнения Шредингера для S -волны имеют вид

$$\psi_{0n}(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin q_n^* r, \quad q_n^* = \frac{\pi n}{a}, n = 0, \dots, \quad (1.23)$$

в то время как точные s -волновые функции свободного движения:

$$\psi_{0q}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin qr. \quad (1.24)$$

В этом простом случае веса ЭК не зависят от индекса n и могут быть найдены явно:

$$\omega_n = \frac{\pi}{a}. \quad (1.25)$$

Эти величины точно совпадают с разностями дискретных импульсов $d_n = q_{n+1}^* - q_n^*$ (импульсные аналоги энергетических ширин (1.6)). Таким образом, можно определить веса эквивалентной квадратуры непосредственно из ширин дискретизации, не зная изначально прямого соответствия между нормированными и ненормированными волновыми функциями:

$$\omega_n = d_n. \quad (1.26)$$

В общем случае решение задачи рассеяния в некотором L_2 -базисе можно рассматривать как решение задачи в ящике с деформированной границей, однако эту границу сложно определить явно. В то же время вид этой границы влияет на распределение дискретных энергий, которое можно использовать для нахождения весов ЭК или ширин интервалов дискретизации. В целом, для нахождения наблюдаемых из псевдосостояний необходимо сначала определить параметры разбиения спектра, используя набор дискретных собственных значений ϵ_n^* . В общем случае ширины энергетических интервалов зависят от номера состояния n .

Конечно, приведенная здесь аргументация не является строгой. Необходимо, чтобы базис псевдосостояний был достаточно большим, чтобы они аппроксимировали точные функции во внутренней области действия потенциала, а интервалы дискретизации соответственно должны быть достаточно малыми. К сожалению, дать здесь более точные условия затруднительно. Некоторые оценки можно сделать, используя концепцию квазинепрерывности (см. главу 3).

В этой диссертации будет построена дискретная версия теории рассеяния на основе формализма собственных дифференциалов (стационарных волновых пакетов), позволяющая строить матричные аналоги операторов теории рассеяния. В то же время в практических расчетах собственные дифференциалы будут часто заменяться на псевдосостояния гамильтониана, найденные из диагонализации его матрицы в некотором базисе. Такой подход позволяет существенно упростить практическое решение задач рассеяния в малочастичных системах.

1.6. Подходы, использующие нормированные состояния для описания континуума

Здесь будут рассмотрены очень кратко только самые основные подходы к решению задач рассеяния с использованием нормированных базисов. Более подробный разбор можно найти в работе автора [99].

Самым простым вариантом решения задачи рассеяния с дискретизацией непрерывного спектра является решение задачи в ящике [10], или в сферической полости, уже упоминавшееся выше. При этом условие на границе тривиально — волновая функция обращается в ноль, поэтому спектр получается чисто дискретным.

Тем не менее, в таком представлении можно получить решение исходной задачи рассеяния в бесконечном пространстве в очень хорошем приближении, если размер полости a превышает радиус взаимодействия. Некоторые детали такого решения рассматриваются в главе 3 в связи с формализмом функции спектрального сдвига. В целом любая задача с дискретизацией спектра может рассматриваться как задача в ящике со сложной границей.

1.6.1. R -матричный подход

Основу R -матричного подхода [11, 12, 16] составляет разделение координатного пространства на внутреннюю и асимптотическую области, на границе между которыми $r = a$ волновая функция выходит на асимптотику. Во внутренней области волновая функция раскладывается по некоторому L_2 базису, и далее на границе такое разложение “сшивается” с точной асимптотикой. Для такой сшивки в уравнение вводится оператор граничного условия Блоха [16], обеспечивающий равенство производных построенных функций на границе. При этом при решении возникает R -матрица, которая связана с логарифмической производной точной волновой функции на границе. В случае, если в качестве базиса используются собственные функции оператора, равного сумме полного гамильтониана и оператора Блоха, R -матрица имеет вид диагональной суммы по вкладам от таких собственных функций, а дискретизованный спектр энергий совпадает со спектром задачи в сферической полости размера a . В конечном итоге решение задачи рассеяния, в частности, S -матрица, определяется через значение R -матрицы при энергии столкновения.

Для разложения волновых функций в этом подходе используются различные L_2 базисы, такие как базис Лагранжева типа, функции которого имеют нули, совпадающие с нулями полиномов Лежандра и Якоби [16]. Такой подход используется также и для случая нелокального потенциала взаимодействия.

В рамках метода R -матрицы точность приближенных выражений для волновой функции и матрицы рассеяния зависит от размерности “внутреннего” базиса N и радиуса сшивки a .

Следует отметить, что метод R -матрицы является одним из самых распространенных L_2 методов, используемых в задачах атомной, химической и ядерной физики [13–16]. Также он часто используется при практическом решении

задач на связанные каналы, которые получаются в результате многоканальной редукции многочастичных задач. Например, для описания прямых ядерных реакций в рамках подхода CDCC [49].

1.6.2. Метод J -матрицы

J -матричный подход объединяет группу методов [18, 27–38], использующих такие базисы, в которых матрица гамильтониана имеет трехдиагональный вид, т.е. является матрицей Якоби.

Одним из часто используемых подходов в ядерной физике является метод осцилляторного представления (ОП) [27–33], в котором используется ортонормированный базис функций гармонического осциллятора [31, 100], в котором трехдиагональна матрица оператора кинетической энергии h_0 :

$$R_{nl}(r) = A_{nl}(r/r_0)^{l+1} \exp(-r^2/2r_0^2) L_n^{l+1/2} \left(\frac{r^2}{r_0^2} \right), \quad n = 0, \dots \quad (1.27)$$

Здесь n — радиальное квантовое число, l — значение орбитального момента, r_0 — масштабный параметр, $L_n^l(x)$ — обобщенные полиномы Лагерра, а A_{nl} — нормировочные коэффициенты.

Второй базис, используемый в случае рассеяния заряженных частиц — это биортогональный Лагерровский базис, функции которого имеют вид [34, 37]:

$$\tilde{R}_{nl}(r) = \tilde{A}_{nl}(r/r_0)^{l+1} \exp(-r/2r_0) L_n^{2l+1}(r/r_0). \quad (1.28)$$

В таком базисе трехдиагональна матрица кулоновского гамильтониана, включающего оператор кинетической энергии и дальнегодействующее кулоновское взаимодействие.

В силу трехдиагональности матрицы невозмущенного гамильтониана (свободного или кулоновского), из матричной алгебры и рекуррентных соотношений легко найти (см. [18, 31]) коэффициенты разложения по функциям выбранного базиса для волновых функций свободного движения (или функций рассеяния на чисто кулоновском потенциале), регулярных и нерегулярных в начале координат (т.е. решений, пропорциональных синусу и косинусу при $l = 0$). Для нахождения коэффициентов разложения волновых функций полного гамильтониана здесь используется быстрое убывание матричных элементов короткодействующего потенциала $V_{n,n'}$ с ростом n и n' , что позволяет “обрезать” матрицу потенциала взаимодействия при некотором

числе осцилляторных функций N , т.е. принять условие $V_{n,n'} = 0$ при $n, n' > N$. Таким образом, единственным приближением J -матричного метода является замена истинного потенциала V “усеченным” оператором $\tilde{V}$, имеющим конечный ранг.

Для усеченного потенциала $\tilde{V}$ матрица полного гамильтониана в базисе (1.27) переходит в трехдиагональную матрицу оператора кинетической энергии (или кулоновского гамильтониана в биортогональном базисе (1.28)) при $n, n' > N$. При этом неизвестные коэффициенты разложения $a_{nl}(E)$ в асимптотической области находятся из условия сшивки на границе [31].

Таким образом, при использовании дифференциальной версии J -матричного подхода, волновые функции рассеяния определяются путем сшивки, но не в координатном пространстве, как в методе R -матрицы, а в пространстве квантовых чисел выбранного базиса. Если ограничиться только внутренней частью базиса, полный гамильтониан имеет дискретизованный спектр, по которому можно также восстановить информацию о рассеянии [32, 34] (см. также главу 3).

В интегральной версии подхода аналитический вид имеют и матричные элементы резольвенты свободного (или кулоновского) гамильтониана [18, 36]. При этом для модельного потенциала в методе J -матрицы можно найти аналитическое выражение для матричных элементов полной резольвенты [36] как в одноканальном, так и в многоканальном случаях. После этого легко найти элементы t -матрицы как на массовой поверхности, так и вне ее. Различные версии J -матричного метода используются и для нахождения параметров резонансов [33, 34].

J -матричный метод широко используется в атомной физике для вычисления сечений фотоионизации, а также сечений рассеяния электронов атомами. В ядерной физике в основном используется метод ОП [31] для расчетов нуклон-ядерного рассеяния и реакций с гиперядрами. Этот метод также активно используется в оболочечной модели для расчетов спектров ядер с учетом состояний континуума.

Трудности обобщения J -матричных методов на случай рассеяния нескольких тел связаны со сложным видом граничных условий, которые нужно сформулировать по номерам базисных функций. Тем не менее, частные решения можно найти в литературе [30]. Также решение существует для случая истинно многочастичного рассеяния, когда ни одна из подсистем сталкивающихся частиц не образует связанных состояний. В гиперсферическом представлении такая задача сводится к одномерной многоканальной

задаче [31].

На основе интегрального J -матричного подхода был также предложен дискретный формализм решения общей задачи рассеяния трех тел с учетом всех асимптотических каналов [37, 38]. Однако, насколько это известно автору, практические расчеты для такого подхода проводились только для частных задач при энергиях ниже трехчастичного порога развала.

1.6.3. Метод интегральных преобразований

Этот общий подход, предложенный [22] как альтернативный методу моментов [19], получил в последние годы значительное развитие для многих типов задач рассеяния [23–26]. В основе метода интегральных преобразований (МИП) лежит идея нахождения наблюдаемых величин без непосредственного нахождения волновой функции системы.

Например, функция отклика определяется как матричный элемент вида:

$$F(\epsilon) = \int df |\langle \Psi_f | \hat{O} | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \epsilon), \quad (1.29)$$

где ϵ — энергия возбуждения, $\hat{O}$ — оператор перехода, а $|\Psi_i\rangle$ и $|\Psi_f\rangle$ — функции начального и конечного состояний соответственно. МИП позволяет найти интегральное преобразование функции отклика $L(\sigma)$ без ее прямого вычисления. Наиболее часто в качестве такого преобразования используется интегральное преобразование Лоренца [25]. При этом саму функцию $L(\sigma)$ можно представить в виде нормы волновой функции, являющейся решением уравнения Шредингера с дополнительной функцией источника при комплексной энергии. Решение такого уравнения единственно и имеет конечную норму. Таким образом, для нахождения решения этого уравнения можно использовать те же методы, что используются для связанных состояний. Для нахождения исходной функции отклика (1.29) остается вычислить обратное интегральное преобразование функции $L(\sigma)$. По сути, аккуратное вычисление такого обратного преобразования и составляет основную сложность подхода [26].

Рассмотренная схема применима для нахождения наблюдаемых для инклюзивных реакций и для нахождения элементов немассовой t -матрицы. МИП позволяет находить инклюзивные и эксклюзивные сечения реакций взаимодействия нескольких тел [25]. В случае, когда в конечном состоянии имеется несколько частиц, функция источника в уравнения для эффективной волновой функции может не быть

короткодействующей (две частицы на асимптотике могут находиться рядом). Тогда используется модифицированное преобразование от функции плотности, приводящее к уравнению с конечной функцией источника.

МИП используется в основном для описания электромагнитных реакций, таких как фото- и электрорасщепление ядер, фотопоглощение, также он может быть использован для описания астрофизических реакций с участием нейтрино [25].

В целом можно сказать, что МИП можно отнести к методам нахождения наблюдаемых из полных спектральных разложений. Здесь не требуется явный учет граничных условий. Также у этого подхода есть некоторые общие черты с методом комплексного скейлинга.

1.6.4. Вариационные подходы

Вариационные принципы в задаче рассеяния формулируются для функционалов, имеющих вид матричного элемента от некоторого оператора по пробным функциям. При этом минимум такого функционала достигается на искомой функции рассеяния. Наиболее известны два таких принципа.

Вариационный принцип Швингера связан с интегральным формализмом теории рассеяния (с уравнением Липпмана–Швингера), поэтому он формулируется для немассового элемента t -матрицы [101].

Вариационный принцип Кона–Хюльтена связан с дифференциальным формализмом, поэтому он учитывает напрямую необходимые граничные условия для волновой функции. Такой подход оказывается эффективным для описания рассеяния заряженных частиц, например, для случая упругого pd рассеяния [102]. Эта задача может быть решена на основе фаддеевского формализма только приближенно из-за необходимости корректного учета кулоновского взаимодействия протонов. Однако при расчете на основе вариационного принципа пробная волновая функция трехчастичной задачи записывается в виде суперпозиции трех волновых функций, отвечающих трем наборам координат Якоби, в которых явно выделяются необходимые асимптотические части. Предметом поиска являются внутренние части волновых функций, а также элементы трехчастичной матрицы рассеяния. При этом внутренние части волновых функций раскладываются по базису парнокоррелированных гиперсферических гармоник. В конечном итоге, из вариационного принципа получается неоднородное

уравнение для коэффициентов разложения, учитывающее явно необходимые граничные условия [102].

Следует отметить, что приведенный выше R -матричный подход с оператором граничных условий Блоха можно рассматривать как метод, основанный на вариационном принципе Кона–Хюльтена.

Различные подходы, использующие многоканальную редукцию в задаче рассеяния нескольких тел, можно тоже отнести к методам L_2 типа. Более подробно такие подходы будут рассмотрены в главе 6, посвященной описанию прямых ядерных реакций.

Глава 2. Формализм стационарных волновых пакетов

Предметом рассмотрения в этой главе является двухчастичная задача рассеяния с центральными силами. Гамильтониан, описывающий движение частицы во внешнем центрально-симметричном поле или взаимодействие двух частиц, имеет вид

$$h = h_0 + v, \quad (2.1)$$

где h_0 — оператор кинетической энергии, а v — потенциал взаимодействия, который считается короткодействующим. Случай рассеяния заряженных частиц будет рассмотрен в конце этой главы. Также здесь рассматриваются волновые функции непрерывного спектра $h_0 |\psi_{0q}^L, LM\rangle$, отвечающие определенным значениям углового момента L и его проекции M на ось z . Угловые части $|LM\rangle$ содержат сферические функции Y_{LM} , заданные в координатном или импульсном представлении. Далее мы будем в основном обсуждать радиальные части волновых функций $|\psi_{0q}^L\rangle$.

2.1. Определение стационарных волновых пакетов

Ограничим непрерывный спектр h_0 сверху максимальным значением энергии $E_{\max}$ (в каждой парциальной волне L) и разделим интервал $[0, E_{\max}]$ на конечное число непересекающихся интервалов (бинов) $[\mathcal{E}_{i-1}, \mathcal{E}_i]_{i=1}^N$ (где $\mathcal{E}_0 = 0$ и $\mathcal{E}_N = E_{\max}$). Здесь предполагается, что величина $E_{\max}$ достаточно велика, чтобы обеспечить решение рассматриваемой задачи. Каждый такой энергетический бин соответствует интервалу импульсов $[q_{i-1}, q_i]$ на импульсной оси q , где $q = \sqrt{2\mu E}$ и μ — это приведенная масса. Будем обозначать такие бины и энергетические, и импульсные как $\mathfrak{D}_i$, где i — номер интервала. Также нам понадобятся в дальнейшем обозначения энергетических и импульсных ширин бинов соответственно:

$$d_i = q_i - q_{i-1}, \quad D_i = \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_{i-1}. \quad (2.2)$$

Рассмотрим далее полный набор состояний $|\psi_{0q}^L\rangle$ непрерывного спектра h_0 (плоских волн), нормированных на δ -функцию по импульсу q :

$$\langle \psi_{0q}^L, LM | \psi_{0q'}^{L'}, L'M' \rangle = \delta(q - q') \delta_{LL'} \delta_{MM'}. \quad (2.3)$$

Определим теперь свободные стационарные волновые пакеты (СВП) как интегралы от

функций непрерывного спектра свободного гамильтониана по импульсным би́нам:

$$|x_i^L\rangle = \frac{1}{\sqrt{B_i}} \int_{\mathfrak{D}_i} dq f(q) |\psi_{0q}^L\rangle, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.4)$$

где $f(q)$ — некоторая весовая функция и B_i — нормировочные коэффициенты, связанные друг с другом соотношением:

$$B_i = \int_{\mathfrak{D}_i} dq |f(q)|^2. \quad (2.5)$$

Благодаря интегрированию в определении (2.4), пакетные состояния оказываются нормированными, т.е. они принадлежат L_2 пространству. Как будет показано ниже, в координатном представлении эти функции убывают на бесконечности в отличие от исходных плоских волн. Таким образом, стационарные волновые пакеты принадлежат гильбертову пространству.

Обсудим подробнее основные свойства СВП $|x_i^L\rangle$. Перекрывание между различными функциями легко вычислить, используя определение (2.4) и свойство ортогональности исходных плоских волн (2.3):

$$\langle x_i^L | x_j^L \rangle = \frac{1}{\sqrt{B_i B_j}} \int_{\mathfrak{D}_i} \int_{\mathfrak{D}_j} dq dq' f^\dagger(q) f(q') \delta(q - q').$$

Поскольку би́ны не пересекаются, δ -функция под знаком интеграла дает ненулевой вклад только если оба интервала $\mathfrak{D}_i$ и $\mathfrak{D}_j$ совпадают, т.е. при $i = j$. Тогда получается следующее соотношение:

$$\langle x_i^L | x_j^L \rangle = \delta_{ij} \frac{1}{B_i} \int_{\mathfrak{D}_i} dq |f(q)|^2.$$

Используя далее определение (2.5), получаем, что набор $|x_i^L\rangle_{i=1}^N$ ортонормирован:

$$\langle x_i^L | x_j^L \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (2.6)$$

Будем далее называть линейную оболочку, натянутую на набор СВП $\{|x_i^L\rangle_{i=1}^N\}$, пакетным подпространством. Проектор на это подпространство (для данного L) имеет вид:

$$\mathfrak{p}_L = \sum_{i=1}^N |x_i^L\rangle \langle x_i^L|. \quad (2.7)$$

Ниже проекции операторов в пакетное подпространство будут обозначены готическими буквами.

Используя определение (2.4), легко получить правило проектирования в пакетный базис для исходных плоских волн:

$$\mathbf{p}_L|\psi_{0q}^L\rangle = \begin{cases} \frac{f(q)}{\sqrt{B_k}}|x_k^L\rangle, & q \in \mathfrak{D}_k, \\ 0, & q > q_N. \end{cases} \quad (2.8)$$

Таким образом, плоской волне в пакетном представлении отвечает одно базисное состояние, соответствующее интервалу, которому принадлежит импульс q .

Разные весовые функции ведут к различным наборам СВП. В практических вычислениях ниже используются два типа состояний:

- Энергетические СВП с весовыми множителями

$$f(q) = \sqrt{\frac{q}{\mu}}, \quad B_i = D_i \approx \frac{q_i^*}{\mu} d_i, \quad (2.9)$$

где D_i — ширины энергетических интервалов. Нетрудно показать, что такие СВП отвечают интегрированию по энергетическим бином волновых функций, нормированных на δ -функцию по энергии.

- Импульсные СВП с единичными весами. В этом случае нормировочные коэффициенты B_i совпадают с ширинами импульсных бинов d_i :

$$B_i = d_i, \quad f(q) = 1. \quad (2.10)$$

Этот базис удобен для расчетов в импульсном представлении.

2.2. Проекция операторов в пакетное подпространство

Свойство (2.8) позволяет найти в явном виде собственные значения любого оператора R , функционально зависящего от свободного гамильтониана h_0 . Действительно, запишем спектральное разложение для такого оператора (для фиксированного L):

$$R_L(h_0) = \int_0^\infty dq |\psi_{0q}^L\rangle R\left(\frac{q^2}{2\mu}\right) \langle\psi_{0q}^L|.$$

Поддействуем теперь оператором проектирования $\mathbf{p}_L$ справа и слева и воспользуемся соотношением (2.8). В результате получим следующее *диагональное* представление для проекции оператора R (в каждой парциальной волне L):

$$\mathfrak{R}_L \equiv \mathbf{p}_L R(h_0) \mathbf{p}_L = \sum_{i=1}^N |x_i^L\rangle R_i \langle x_i^L|, \quad (2.11)$$

где соответствующие собственные значения R_i определяются явно:

$$R_i \equiv \langle x_i^L | R(h_0) | x_i^L \rangle = \frac{1}{B_i} \int_{\mathfrak{D}_i} dq R\left(\frac{q^2}{2\mu}\right) |f(q)|^2. \quad (2.12)$$

В частности, собственные значения самого свободного гамильтониана в пакетном базисе определяются через интегралы

$$\langle x_i^L | h_0 | x_i^L \rangle \equiv \mathcal{E}_i^* = \frac{1}{B_i} \int_{\mathfrak{D}_i} dq |f(q)|^2 \frac{q^2}{2\mu}. \quad (2.13)$$

В случае энергетических пакетов собственные значения свободного гамильтониана совпадают с серединами энергетических бинов $\mathcal{E}_i^* = \frac{1}{2}(\mathcal{E}_{i-1} + \mathcal{E}_i)$.

В случае импульсных СВП эти собственные значения определяются немного более сложной формулой

$$\mathcal{E}_i^* = \frac{(q_i^*)^2}{2\mu} \left(1 + \frac{(d_i)^2}{12(q_i^*)^2} \right). \quad (2.13a).$$

Наиболее полезным следствием свойства проектирования для СВП базиса является диагональное представление для резольвенты свободного гамильтониана $g_0(E) = [E + i0 - h_0]^{-1}$:

$$\mathfrak{g}_0^L(E) \equiv \mathfrak{p}_L g_0(E) \mathfrak{p}_L = \sum_{i=1}^N |x_i^L\rangle g_i(E) \langle x_i^L|. \quad (2.14)$$

Здесь соответствующие комплексные собственные значения $g_i(E)$ определяются следующим образом:

$$g_i(E) = \frac{1}{B_i} \int_{\mathfrak{D}_i} dq' \frac{|f(q')|^2}{E + i0 - \frac{q'^2}{2\mu}}. \quad (2.15)$$

В случае импульсных волновых пакетов эти собственные значения имеют явный вид:

$$g_i(E) = \frac{\mu}{qd_i} \left\{ \ln \left| \frac{q - q_{i-1}}{q - q_i} \right| + \ln \left| \frac{q + q_i}{q + q_{i-1}} \right| - i\pi [\theta(q - q_{i-1}) - \theta(q - q_i)] \right\}, \quad (2.16)$$

где $q = \sqrt{2\mu E}$ и комбинация θ -функций Хэвисайда⁴ означает, что мнимая часть собственного значения отлична от нуля только на одном on-shell интервале с индексом $i = k$, к которому принадлежит значение энергии E . Поскольку подынтегральное выражение в уравнении (2.15) имеет особенность при $q' = q$, будем иногда называть этот интервал сингулярным. Хотя собственные значения (2.16) имеют логарифмические

⁴ Здесь используется θ -функция, определенная следующим образом: $\theta(q) = \begin{cases} 1, & q \geq 0 \\ 0, & q < 0 \end{cases}$.

особенности при значениях q , совпадающим с границами интервалов, конечномерное представление (2.14) для свободной резольвенты с собственными значениями (2.16) можно использовать непосредственно для вычисления наблюдаемых, если считать, что on-shell энергия не совпадает ни с одной границей бина [122]. Ниже, однако, будет использована процедура усреднения по энергии, которая позволит получить конечномерное представление для свободной резольвенты, которое уже не содержит особенностей на вещественной оси энергии.

Используя конечномерный “пакетный” аналог (2.14) свободной резольвенты, можно легко построить схему решения общей задачи рассеяния на основе интегрального формализма теории рассеяния.

2.3. СВП в конфигурационном и импульсном пространстве.

2.3.1. Координатное поведение СВП

Поведение СВП в конфигурационном пространстве можно легко проследить, используя определение этих функций.

Радиальная часть свободной волновой функции в координатном представлении имеет вид

$$\psi_{0q}^L(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} q r j_L(qr), \quad (2.17)$$

где j_L — сферическая функция Бесселя. Рассмотрим для простоты S -волновой случай, тогда в результате подстановки (2.17) в определение (2.4) имеем:

$$x_i^0(r) = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \int_{\mathfrak{D}_i} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(qr) dq.$$

Тогда получается явная связь между СВП и функцией свободного движения

$$x_i^0(r) = \sqrt{d_i} \psi_{0q_i^*}^0(r) \frac{\sin(d_i r/2)}{d_i r/2}, \quad (2.18)$$

где q_i^* — среднее значение импульса на рассматриваемом интервале $\mathfrak{D}_i$. Как видно, СВП почти совпадают с точными свободными волновыми функциями $\psi_{0q_i^*}^0(r)$ в области $r \ll r_i$, где:

$$r_i = \frac{2}{d_i}. \quad (2.19)$$

Таким образом, процедура “пакетирования”, определенная в (2.4), приводит к дополнительному убывающему множителю в волновой функции, который и обеспечивает нормируемость пакетных состояний.

В случае ненулевого углового момента L связь между СВП и функцией свободного движения будет аналогична (2.18) в области, где функция Бесселя (2.17) выходит на асимптотику, что можно увидеть из явного соотношения:

$$x_i^L(r) = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \int_{q_{i-1}}^{q_i} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(qr - \frac{L\pi}{2}\right) dq, \quad qr \gg 1.$$

Повторяя далее S -волновой вывод, получаем, что волновая функция пакетного состояния почти совпадает с функцией свободного движения при импульсе q_i^* в области $\frac{1}{q_i^*} \ll r \ll r_i$ ⁵.

Таким образом, можно использовать пакетные состояния $|x_i^L\rangle$ вместо точных функций непрерывного спектра $|\psi_{0q}^L\rangle$ в интегральных ядрах операторов если эффективный радиус потенциала взаимодействия v меньше эффективного радиуса пакетных состояний $r_{\min} = \min_i r_i$.

На Рис. 2.1 представлены координатные зависимости радиальных частей волновых функций пакетных состояний для случая широкого, среднего и узкого интервала (для $L = 0$). Видно, что эти L_2 функции не “исчезают” на очень дальней асимптотике вплоть до $qr \sim 100$. Таким образом, пакетный базис очень хорошо подходит для разложения волновых функций непрерывного спектра. Такое “дальнодействующее” поведение очень важно при использовании этого базиса в трехчастичном случае, особенно выше порога развала, поскольку позволяет воспроизвести правильное перекрывание базисных функций в различных наборах координат Якоби.

2.3.2. Вопрос полноты

Обратимся к вопросу, образует ли набор СВП $\{|x_i^L\rangle\}_{i=1}^N$ полный набор (для каждой парциальной волны). В полном координатном пространстве — конечно, нет.

Однако, если записать точный единичный оператор I_L в форме спектрального разложения

$$I_L \equiv \sum_{i=1}^N I_i + I_r = \sum_{i=1}^N \int_{q_{i-1}}^{q_i} |\psi_{0q}^L\rangle \langle \psi_{0q}^L| dq + \int_{q_N}^{\infty} |\psi_{0q}^L\rangle \langle \psi_{0q}^L| dq, \quad (2.20)$$

⁵ Заметим, что такое двойное неравенство имеет смысл для большинства бинов, поскольку на практике используются сетки с ширинами $d_i \ll q_i^*$. Только для первого бина, на котором $d_0 = 2q_0^*$, пакетная функция заметно отличается от исходной плоской волны. Однако это свойство никак не портит описываемой схемы.

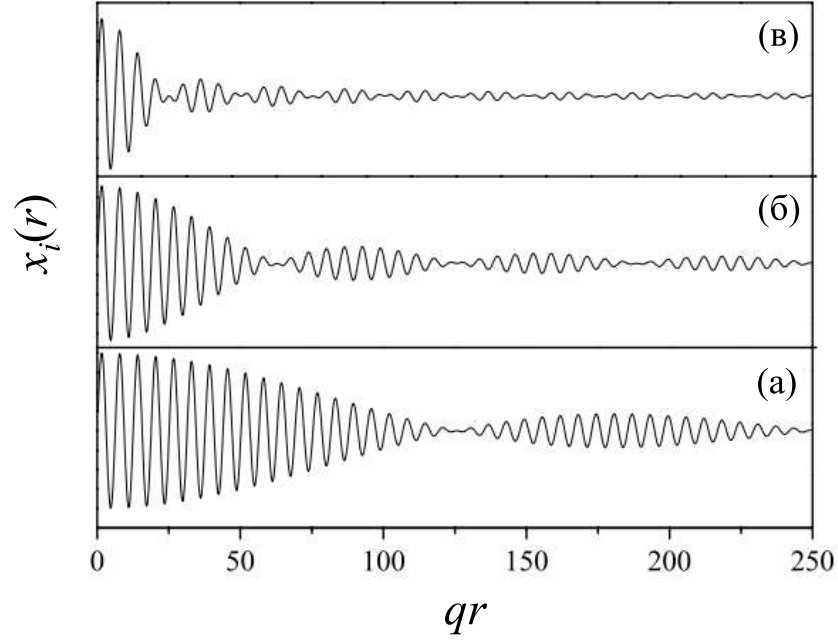


Рисунок 2.1. Координатное поведение S -волновых пакетных состояний $x_i(r)$ (в условных единицах) для различных значений ширин бинов d_i (в отношении к значению импульса q): $d_i/q = 0.05$ (а), $d_i/q = 0.1$ (б) и $d_i/q = 0.25$ (в).

становится видно, что при его замене на проектор $\mathbf{p}_L$ используются два приближения:

- (i) непрерывное распределение импульсов ограничивается некоторым максимальным значением q_N и при этом отбрасывается остаточный интеграл I_T ;
- (ii) точные проекторы I_i заменяются пакетными $|x_i^L\rangle\langle x_i^L|$.

Если рассмотреть средние значения операторов I_L и $\mathbf{p}_L$ по некоторому нормируемому состоянию $|\Phi\rangle$ с эффективным радиусом r_0 (например, задаваемому гауссианой), можно показать [99], что указанные выше приближения:

$$\langle\Phi|\mathbf{p}_L|\Phi\rangle \approx \langle\Phi|\sum_{i=1}^N I_i|\Phi\rangle, \quad \langle\Phi|I_t|\Phi\rangle \approx 0$$

выполняются, если ширины d_i и значение q_N удовлетворяют условиям:

$$d_i \ll \frac{1}{r_0} \ll q_N, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.21)$$

Таким образом, в практических вычислениях необходимо учитывать эти условия при построении разбиения спектра $[q_{i-1}, q_i]_{i=1}^N$. Затем можно проследить сходимость получаемых результатов с увеличением размерности базиса и соответствующем

уменьшении ширин разбиений при достаточно большом значении максимального импульса q_N .

Поскольку здесь бесконечный спектральный интеграл приближается конечной суммой, такой подход выглядит очень похожим на различные квадратурные методы вычисления интегралов (см. например [19]), которые упоминались в предыдущей главе. Однако основное отличие состоит в том, что в пакетном представлении операторы заменяются своими конечномерными проекциями (матрицами) в этом базисе, в то время как для квадратур ядра операторов берутся при дискретных значениях импульсов.

2.3.3. СВП в импульсном представлении

Интересная картина получается в импульсном представлении, где пакетные состояния представляются просто ступенчатыми функциями:

$$x_i^L(q) = \frac{\theta(q - q_{i-1}) - \theta(q - q_i)}{\sqrt{d_i}}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.22)$$

Получается, что дискретизация спектра свободного гамильтониана приводит к дискретному поведению волновых функций рассеяния и ядер операторов. С этой точки зрения пакетное представление можно рассматривать как дискретное импульсное представление. С другой стороны, здесь возникает аналогия с решеточными расчетами. Действительно, в пакетной схеме импульсное представление заменяется решеткой, одномерной в двухчастичной случае и многомерной для системы нескольких тел. Далее, интегральные операторы представляются в этой схеме матрицами, чьи элементы представляют собой интегралы от ядер операторов по ячейкам решетки. В результате такого интегрирования особенности ядер усредняются и сглаживаются.

Таким образом, можно рассматривать пакетный формализм как некоторое решеточное представление для решения интегральных уравнений.

2.4. Решение задачи рассеяния в представлении свободных волновых пакетов

2.4.1. Детали процедуры пакетной дискретизации

Процедура пакетной дискретизации континуума состоит из тех шагов:

- (i) все волновые функции непрерывного спектра представляются в виде разложений по пакетному базису;
- (ii) соответствующие операторы заменяются на их конечномерные представления в пакетном подпространстве;
- (iii) ядра операторов, имеющие энергетические или импульсные зависимости, дополнительно усредняются по бинам дискретизации.

Получившиеся объекты подставляются в интегральные уравнения теории рассеяния, которые становятся матричными и решаются непосредственно на вещественной оси.

На первый взгляд, такое разложение ненормируемых точных состояний рассеяния по конечному набору пакетных L_2 функций не должно сходиться. Однако в таком конечномерном представлении операторов и волновых функций есть непосредственный смысл, поскольку для нахождения наблюдаемых в большинстве случаев требуются только внутренние части волновых функций в случае короткодействующих потенциалов взаимодействия v . Действительно, амплитуду рассеяния можно найти из известной формулы

$$A(E) \sim \langle \psi_{0q}^L | v | \psi_q^{L(+)} \rangle,$$

где $|\psi_q^{(+)}\rangle$ — полная волновая функция системы. Внутренняя часть этой волновой функции (так же, как и функции свободного движения) эффективно обрезается потенциалом взаимодействия за границами его эффективного радиуса действия r_0 . Таким образом, если условия (2.21) для пакетного базиса выполняются, пункты (i) и (ii) дискретизации выглядят вполне обоснованно.

В пакетной схеме спектр проектированного гамильтониана дискретный, а импульсное пространство представляется решеткой. Поэтому, чтобы сделать схему замкнутой, желательно сделать схему дискретной и по 'on-shell' энергии, входящей в уравнения как внешний параметр. Таким образом, для зависящих от энергии операторов (например, свободной резольвенты) вводится дополнительное усреднение. При этом конечномерное представление (2.14) усредняется по энергии внутри бина $\mathfrak{D}_k$, которому принадлежит энергия ($E \in \mathfrak{D}_k$):

$$\mathfrak{g}_0^{(k)} = \frac{1}{D_k} \int_{\mathfrak{D}_k} \mathfrak{g}_0(E) dE = \sum_{i=1}^N |x_i^L\rangle g_i^{(k)} \langle x_i^L|, \quad (2.23)$$

где усредненные собственные значения представляются интегралами

$$g_i^{(k)} = \frac{1}{D_k} \int_{\mathfrak{D}_k} g_i(E) dE. \quad (2.24)$$

В случае импульсных волновых пакетов явная формула имеет вид:

$$g_i^{(k)} = \frac{1}{D_k d_i} \left[Q_{ki}^{(+)} - Q_{ki}^{(-)} \right] - \frac{i\pi}{D_k} \delta_{ik}, \quad (2.25)$$

где

$$Q_{ki}^{(\pm)} = \sum_{k'=k-1}^k \sum_{i'=i-1}^i (-1)^{k-k'+i-i'} [q_{k'} \pm q_{i'}] \ln |q_{k'} \pm q_{i'}|.$$

В случае энергетических волновых пакетов собственные значения свободной резольвенты также имеют явное выражение:

$$g_i^{(k)} = \frac{1}{D_i D_k} \sum_{k'=k-1}^k \sum_{i'=i-1}^i (-1)^{k-k'+i-i'} (\mathcal{E}_{k'} - \mathcal{E}_{i'}) \ln |\mathcal{E}_{k'} - \mathcal{E}_{i'}| - \frac{i\pi}{D_k} \delta_{ik}. \quad (2.26)$$

В таком чисто дискретном представлении коэффициенты $g_i^{(k)}$ уже не зависят непрерывным образом от энергии, а являются чисто дискретными величинами. При этом никаких особенностей они уже не имеют.

2.4.2. Волновые операторы Меллера и уравнение для волновой функции системы

Применим описанную выше процедуру пакетной дискретизации к уравнению Липпмана-Швингера (УЛШ) для волновой функции системы:

$$|\psi_q^{L(+)}\rangle = |\psi_{0q}^L\rangle + g_0^{(+)}(E)v|\psi_q^{L(+)}\rangle. \quad (2.27)$$

Тогда получим следующее матричное уравнение для пакетного аналога⁶ полной волновой функции $|z_k^{L(+)}\rangle$:

$$|z_k^{L(+)}\rangle = |x_k^L\rangle + \mathfrak{g}_0^{(k)} \mathfrak{v} |z_k^{L(+)}\rangle, \quad E \in \mathfrak{D}_k, \quad (2.28)$$

где

$$\mathfrak{v} = \mathfrak{p}_L v \mathfrak{p}_L = \sum_{i,j=1}^N |x_i^L\rangle v_{ij} \langle x_j^L| \quad (2.29)$$

⁶ Следует отметить, что это состояние не является точной проекцией полной функции рассеяния (т.е. $|z_k^{L(+)}\rangle \neq \mathfrak{p}_L |\psi_q^{L(+)}\rangle$), поскольку точная волновая функция $|\psi_q^{L(+)}\rangle$ находится для полного оператора взаимодействия v , в то время как решение $|z_k^{L(+)}\rangle$ соответствует проектированному оператору $\mathfrak{v}$.

— пакетное представление для оператора взаимодействия. Предполагается, что решение (2.28) разложено по базису СВП:

$$|z_k^{L(+)}\rangle = \sum_{i=1}^N O_i^{(k)} |x_i^L\rangle. \quad (2.30)$$

Легко видеть, что коэффициенты разложения $O_i^{(k)}$ определяются колонкой с индексом k следующей матрицы:

$$\mathbf{O}^{(k)} = (\mathbf{1} - \mathbf{g}_0^{(k)} \mathbf{v})^{-1}. \quad (2.31)$$

Здесь и ниже мы будем использовать жирный шрифт для обозначения матриц.

Полная матрица $\mathbf{O}$, построенная из таких колонок для $k = 1, \dots, N$

$$\mathbf{O} = \begin{pmatrix} O_{11}^1 & \dots & O_{1k}^k & \dots & O_{1N}^N \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ O_{m1}^1 & \dots & O_{mk}^k & \dots & O_{mN}^N \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ O_{N1}^1 & \dots & O_{Nk}^k & \dots & O_{NN}^N \end{pmatrix},$$

является матрицей оператора :

$$\mathfrak{O} = \sum_{i=1}^N |z_i^{L(+)}\rangle \langle x_i^L|, \quad (2.32)$$

который является пакетным аналогом волнового оператора Меллера [98]:

$$\Omega^{(+)} = \int_0^\infty dq |\psi_q^{L(+)}\rangle \langle \psi_{0q}^L|. \quad (2.33)$$

После вычисления элементов этой матрицы, амплитуда рассеяния $A_L(E)$ может быть найдена из известной формулы:

$$A_L(E) = \frac{\mu}{q} \langle \psi_{0q}^L | v | \psi_q^{L(+)} \rangle, \quad (2.34)$$

которая в пакетном представлении принимает вид:

$$A_L(E) = \frac{\langle x_k^L | \mathbf{v} | z_k^{L(+)} \rangle}{D_k}, \quad E \in \mathfrak{D}_k. \quad (2.35)$$

Таким же образом можно построить конечномерные аналоги для основных операторов теории рассеяния.

2.4.3. Уравнение для полной резольвенты

Для того, чтобы найти пакетное представление для резольвенты $g(\zeta) = [\zeta - h]^{-1}$ полного гамильтониана h , применим процедуру дискретизации к резольвентному тождеству (или УЛШ для резольвенты):

$$g(\zeta) = g_0(\zeta) + g_0(\zeta)vg(\zeta).$$

В результате получим следующее конечномерное уравнение:

$$\mathfrak{g}(\zeta) = \mathfrak{g}_0(\zeta) + \mathfrak{g}_0(\zeta)\mathfrak{v}\mathfrak{g}(\zeta), \quad (2.36)$$

где все операторы спроектированы в пакетное подпространство. Тогда матрица полной резольвенты определяется как:

$$\mathbf{g}(\zeta) = [(\mathbf{g}_0(\zeta))^{-1} - \mathbf{v}]^{-1}. \quad (2.37)$$

Можно показать, что выражение (2.37) определяет точную пакетную проекцию полной резольвенты $\bar{g}(\zeta) = [\zeta - h_0 - \mathfrak{v}]^{-1}$, соответствующей гамильтониану с проектированным оператором взаимодействия $\mathfrak{v}$ (конечного ранга N), определенным в (2.29).

Используя формулу (2.37), можно получить различные типы собственных состояний гамильтониана с конечномерным взаимодействием $\mathfrak{v}$: связанные состояния и состояния непрерывного спектра. В частности, трансцендентное уравнение по отношению к ζ

$$\det ||\mathbf{g}_0^{-1}(\zeta) - \mathbf{v}|| = 0 \quad (2.38)$$

определяет энергии связанных состояний для вещественных отрицательных ζ . Это уравнение подходит, в принципе, и для нахождения резонансов, однако здесь требуется аккуратное продолжение на нефизический лист энергий оператора $\mathfrak{g}_0(\zeta)$. Вопрос такого продолжения требует отдельного рассмотрения и прояснения.

В случае вещественных положительных значений ζ для решения задачи рассеяния, воспользуемся снова процедурой усреднения для свободной резольвенты. Тогда вместо уравнения (2.36) имеем следующий набор уравнений для каждого интервала дискретизации:

$$\mathfrak{g}^{(k)} = \mathfrak{g}_0^{(k)} + \mathfrak{g}_0^{(k)}\mathfrak{v}\mathfrak{g}^{(k)}, \quad E \in \mathfrak{D}_k, \quad (2.39)$$

где энергия теперь дискретный параметр. Решение последнего уравнения полностью аналогично решению (2.37)

$$\mathbf{g}^{(k)} = [(\mathbf{g}_0^{(k)})^{-1} - \mathbf{v}]^{-1}. \quad (2.40)$$

2.4.4. Дискретизованное представление для оператора перехода

Рассмотрим оператор перехода $t(E)$, удовлетворяющий УЛШ в форме:

$$t(E) = v + v g_0(E) t(E). \quad (2.41)$$

Здесь, как и в уравнении для волновой функции (2.27), предполагаются операторы, отвечающие “верхнему берегу” разреза при вещественных энергиях, однако верхний индекс (+) будем опускать. Элемент t -матрицы вне массовой поверхности обычно определяется следующим образом:

$$t_L(q_1, q_2; E) = \frac{\mu}{\sqrt{q_1 q_2}} \langle \psi_{0q_1}^L | t(E) | \psi_{0q_2}^L \rangle. \quad (2.42)$$

Применим теперь процедуру дискретизации к уравнению (2.41), которое при этом сводится к матричному виду:

$$\mathbf{t}^{(k)} = \mathbf{v} + \mathbf{v} \mathbf{g}_0^{(k)} \mathbf{t}^{(k)}, \quad E \in \mathfrak{D}_k. \quad (2.43)$$

Снова, как и в случаях, рассмотренных выше, решение может быть записано в явном виде

$$\mathbf{t}^{(k)} = [(\mathbf{v})^{-1} - \mathbf{g}_0^{(k)}]^{-1}. \quad (2.44)$$

Таким образом, пакетный аналог немассового элемента t -матрицы имеет энергетическую и импульсные зависимости в виде трехмерной гистограммы (здесь используется правило проектирования (2.8))

$$t_L(q_1, q_2; E) \approx \frac{\mu t_{i_1 i_2}^{(k)}}{\sqrt{q_{i_1}^* d_{i_1} q_{i_2}^* d_{i_2}}}, \quad \begin{array}{l} q_{1(2)} \in \mathfrak{D}_{i_{1(2)}}, \\ E \in \mathfrak{D}_k. \end{array} \quad (2.45)$$

Матричные элементы оператора $\mathbf{t}^{(k)}$ определяются как обычно:

$$t_{ij}^{(k)} \equiv \langle x_i^L | \mathbf{t}^{(k)} | x_j^L \rangle, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (2.46)$$

Парциальные фазовые сдвиги $\delta_L(E)$ можно получить непосредственно из элемента t -матрицы на массовой поверхности:

$$-\frac{e^{i\delta_L(E)} \sin \delta_L(E)}{\pi} \approx \frac{\mu t_{kk}^{(k)}}{q_k^* d_k} \approx \frac{t_{kk}^{(k)}}{D_k}, \quad E \in \mathfrak{D}_k. \quad (2.47)$$

Здесь знаки приближенного равенства означают, что пакетная техника дает приближенные значения для фазовых сдвигов исходной задачи с потенциалом v .

2.4.5. Условие унитарности для оператора перехода

Покажем, что определенный в пакетном подпространстве конечномерный оператор $\mathbf{t}^{(k)}$ удовлетворяет точному условию унитарности. Выражение (2.44) может быть переписано в виде

$$[\mathbf{t}^{(k)}]^{-1} = \mathbf{v}^{-1} - \mathbf{g}_0^{(k)}. \quad (2.48)$$

Воспользуемся также эрмитово сопряженным уравнением. Используя эти два уравнения, легко получить следующее выражение⁷:

$$\mathbf{t}^{(k)}([\mathbf{t}^{(k)}]^{-1} - [\mathbf{t}^{(k)\dagger}]^{-1})\mathbf{t}^{(k)\dagger} = \mathbf{t}^{(k)}([\mathbf{g}_0^{(k)}]^\dagger - \mathbf{g}_0^{(k)})\mathbf{t}^{(k)\dagger}.$$

Упрощая, получаем:

$$\mathbf{t}^{(k)\dagger} - \mathbf{t}^{(k)} = \mathbf{t}^{(k)}([\mathbf{g}_0^{(k)}]^\dagger - \mathbf{g}_0^{(k)})\mathbf{t}^{(k)\dagger}. \quad (2.49)$$

Из уравнения (2.49) следует, что скачок мнимой части диагонального элемента $\mathbf{t}^{(k)}$ связан непосредственно со скачком мнимой части матрицы свободной резольвенты

$$\text{Im}t_{ii}^{(k)} = \sum_{j=1}^N \text{Im}g_j^{(k)} |t_{ji}^{(k)}|^2. \quad (2.50)$$

Теперь, используя соотношение (2.25) или (2.26), получаем связь между немассовыми и полу-немассовыми элементами пакетной t -матрицы

$$\text{Im}t_{ii}^{(k)} = -\frac{\pi |t_{ki}^{(k)}|^2}{D_k}. \quad (2.51)$$

Упругий элемент S -матрицы связан с элементом t -матрицы следующим образом:

$$S^{(k)} = 1 - 2\pi i \frac{t_{kk}^{(k)}}{D_k}. \quad (2.52)$$

Подставляя условие для t -матрицы (2.51), получаем условие унитарности $|S^{(k)}| = 1$.

Таким образом, элемент S -матрицы, определяемый в пакетной технике (2.52), удовлетворяет условию унитарности. Это свойство является очень важным для практических приложений и обеспечивает устойчивость численных расчетов.

2.5. Случай комплексного потенциала взаимодействия

В случае комплексного потенциала взаимодействия полный гамильтониан уже неэрмитов, поэтому для in- и out-состояний⁸ получаются следующие уравнения (см.

⁷ Для эрмитова оператора взаимодействия v .

⁸ Для простоты записей индекс определенного углового момента L здесь опускается.

[103]) :

$$\begin{aligned} |\psi_q^{(+)}\rangle &= |\psi_{0q}\rangle + g_0^{(+)}(E)v|\psi_q^{(+)}\rangle, \\ |\psi_q^{(-)}\rangle &= |\psi_{0q}\rangle + g_0^{(-)}(E)v^\dagger|\psi_q^{(-)}\rangle. \end{aligned} \quad (2.53)$$

При таком определении волновых функций элементы S -матрицы будут определяться так же, как и в случае вещественного потенциала:

$$\langle \psi_q^{(-)} | \psi_q^{(+)} \rangle = S(E)\delta(q - q').$$

Наряду с функциями $|\psi_q^{(-)}\rangle$ и $|\psi_q^{(+)}\rangle$, можно определить биортогональные наборы состояний:

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_q^{(+)}\rangle &= |\psi_0\rangle + g_0^{(+)}(E)v|\tilde{\psi}_q^{(+)}\rangle, \\ |\tilde{\psi}_q^{(-)}\rangle &= |\psi_0\rangle + g_0^{(-)}(E)v|\tilde{\psi}_q^{(-)}\rangle. \end{aligned} \quad (2.54)$$

При этом верны следующие соотношения ортогональности:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\psi}_q^{(+)} | \psi_{q'}^{(+)} \rangle &= \delta(q - q'), \\ \langle \tilde{\psi}_q^{(-)} | \psi_{q'}^{(-)} \rangle &= \delta(q - q'). \end{aligned}$$

Можно показать [103], что все четыре набора функций в случае одноканального рассеяния связаны с функциями $|\psi_q\rangle$, отвечающими граничным условиям в форме стоячих волн, следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} |\psi_q^{(+)}\rangle &= e^{i\delta_L}|\psi_q\rangle, & |\tilde{\psi}_q^{(+)}\rangle &= e^{i\delta_L^*}|\psi_q\rangle; \\ |\psi_q^{(-)}\rangle &= e^{-i\delta_L^*}|\psi_q\rangle, & |\tilde{\psi}_q^{(-)}\rangle &= e^{-i\delta_L}|\psi_q\rangle, \end{aligned} \quad (2.55)$$

где δ_L — фазовые сдвиги. Сами функции $|\psi_q\rangle$ уже не являются вещественными, но отвечают *вещественному* соотношению ортогональности $\langle \psi_q | \psi_{q'} \rangle = \delta(q - q')$.

В рамках пакетного формализма можно определить наборы пакетных аналогов функций рассеяния: $|z_i^{(\pm)}\rangle$ и $|\tilde{z}_i^{(\pm)}\rangle$, удовлетворяющих проекциям соответствующих УЛШ. При этом для каждого типа состояний можно определить матрицы $\mathbf{O}$ аналогично (2.31) и определить соответствующие амплитуды из соотношений типа (2.35).

Также можно показать, что элементы S -матрицы можно найти из соотношения:

$$S^{(k)} = \frac{\langle \tilde{z}_k^{(-)} | z_k^{(+)} \rangle}{\langle \tilde{z}_k^{(-)} | \tilde{z}_k^{(-)} \rangle}.$$

Однако несмотря на такое многообразие решений УЛШ для волновых функций, для нахождения амплитуды рассеяния достаточно решить одно из этих уравнений или уравнение для t -матрицы такое же, как и для вещественной задачи (2.41).

2.6. Возмущенные волновые пакеты

Наряду с СВП для свободного гамильтониана можно определить такие состояния для любого гамильтониана h_1 , используя аналогичную процедуру дискретизации:

$$|z_i^L\rangle = \frac{1}{\sqrt{A_i}} \int_{q_{i-1}}^{q_i} dq w(q) |\psi_q^L\rangle, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.56)$$

где $|\psi_q^L\rangle$ — собственные состояния непрерывного спектра h_1 . Будем далее называть состояния (2.56) возмущенными волновыми пакетами (ВВП).

Эти состояния обладают абсолютно теми же свойствами по отношению к гамильтониану h_1 , что и СВП к гамильтониану h_0 . Кроме того, если у h_1 есть связанные состояния, то ВВП будут им ортогональны.

Таким образом, полный набор состояний для гамильтониана h_1 включает его связанные состояния $\{|\psi_n^L\rangle\}_{n=1}^{N_b}$ и ВВП. В частности, в таком представлении получается конечномерное спектральное разложение для резольвенты $g_1(E) = [E + i0 - h_1]^{-1}$ гамильтониана:

$$\mathfrak{g}_1^L(E) = \sum_{n=1}^{N_b} \frac{|\psi_n^L\rangle\langle\psi_n^L|}{E - \epsilon_n^{*L}} + \sum_{i=1}^N |z_i^L\rangle g_i(E) \langle z_i^L|, \quad (2.57)$$

где ϵ_n^{*L} — энергии связанных состояний, а собственные значения $g_i(E)$ определяются через параметры разбиения спектра по той же формуле (2.15), что и для свободных пакетов.

Согласно приведенной в первой главе аналогии между псевдосостояниями и собственными дифференциалами, для аппроксимации состояний $|z_i^L\rangle$ можно использовать подходящий L_2 базис. Собственно, это свойство используется далее в данной работе неоднократно. В главе 3 показано, как построить такие состояния для многоканального гамильтониана. В трехчастичной фаддеевской задаче в качестве такого базиса используется базис свободных волновых пакетов.

2.7. Решение задачи рассеяния заряженных частиц

2.7.1. Кулоновские волновые пакеты

Формализм волновых пакетов может быть использован и в том случае, когда оператор взаимодействия состоит из двух частей разной природы. В частности, в случае рассеяния заряженных частиц, когда полный потенциал взаимодействия

представляется в виде суммы дальнедействующего кулоновского v_C и некоторого короткодействующего v_S потенциалов:

$$v = v_C + v_S. \quad (2.58)$$

В этом случае роль невозмущенного гамильтониана в задаче рассеяния играет кулоновский гамильтониан (в этой работе рассматривается только случай отталкивающего потенциала):

$$h_C = h_0 + v_C. \quad (2.59)$$

Далее можно ввести кулоновские волновые пакеты (КВП) как интегралы по узким полосам от регулярных кулоновских функций $|F_L(q)\rangle$:

$$|x_i^C\rangle = \frac{1}{\sqrt{B_i}} \int_{\mathfrak{D}_i} f(q) |F_L(q)\rangle dq, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.60)$$

КВП являются по сути возмущенными волновыми пакетами и составляют собственное пакетное подпространство для кулоновского гамильтониана.

Проектор на подпространство КВП имеет вид:

$$\mathfrak{p}_C = \sum_{i=1}^K |x_i^C\rangle \langle x_i^C|. \quad (2.61)$$

Все свойства КВП по отношению к состояниям гамильтониана h_C такие же, как и свойства СВП для свободного гамильтониана.

Наиболее важным является свойство диагональности проекции кулоновской резольвенты $g_C^{(+)}(E) = [E + i0 - h_C]^{-1}$ в КВП-подпространство:

$$\mathfrak{g}_C^{(+)}(E) = \sum_{i=1}^K |x_i^C\rangle g_i(E) \langle x_i^C|, \quad E \in \mathfrak{D}_{k_0}. \quad (2.62)$$

При этом собственные значения этого конечномерного оператора определяются теми же формулами (2.15).

Легко показать, что аналогично СВП кулоновские пакеты $x_i^C(r)$ практически совпадают с регулярными кулоновскими функциями $F_L(q_i^*, r)$ в ограниченной области конфигурационного пространства, а далее убывают. Поэтому вместо короткодействующего потенциала v_S , радиус действия которого r_S находится внутри “конечного носителя”, можно использовать его конечномерную проекцию в подпространство КВП:

$$\mathfrak{v}_S = \mathfrak{p}_C \mathfrak{v}_S \mathfrak{p}_C. \quad (2.63)$$

Тогда дополнительная (кулоновско-ядерная) часть оператора перехода $\tilde{t}(E)$, удовлетворяющая уравнению:

$$\tilde{t}(E) = \mathbf{v}_S + \mathbf{v}_S g_C^{(+)}(E) \tilde{t}(E), \quad (2.64)$$

будет конечномерным оператором. Применяя процедуру усреднения для кулоновской резольвенты внутри каждой энергетической полосы в уравнении (2.64) и решая матричные уравнения, получаем дискретный набор кулоновско-ядерных операторов перехода, матрицы которых в КВП-представлении определяются следующими выражениями:

$$\tilde{\mathbf{t}}^{(k)} = \mathbf{v}_S + \mathbf{v}_S \mathbf{g}_C^{(k)} \tilde{\mathbf{t}}^{(k)}, \quad E \in \mathfrak{D}_k \quad (2.65)$$

Причем матрицы кулоновских резольвент $\mathbf{g}_C^{(k)}$ диагональные, и их собственные значения определяются выражением (2.26), как и в случае СВП.

Единственное отличие, которое здесь возникает, состоит в том, что для вычисления элементов кулоновско-ядерной t -матрицы, нужно домножить соответствующие матричные элементы на кулоновские фазовые множители [70]:

$$\tilde{t}_L(E_1, E_2; E) \approx e^{i(\sigma_L(E_1) + \sigma_L(E_2))} \frac{\langle x_{k_1}^C | \tilde{\mathbf{t}}^{k_0} | x_{k_2}^C \rangle}{D_{k_0}}, \quad E_{1(2)} \in \mathfrak{D}_{k_{1(2)}}, \quad E \in \mathfrak{D}_k, \quad (2.66)$$

где $\sigma_l(E)$ — кулоновский парциальный фазовый сдвиг. Применяя эту формулу на массовой поверхности, получаем следующее выражение для определения кулоновско-ядерного парциального фазового сдвига в пакетной технике:

$$- \frac{e^{i\delta_L(\mathcal{E}_k^*)} \sin \delta_L(\mathcal{E}_k^*)}{\pi} \approx \frac{\langle x_k^C | \tilde{\mathbf{t}}^k | x_k^C \rangle}{D_k}. \quad (2.67)$$

Таким образом, техника волновых пакетов распространяется и на случай суперпозиции короткодействующих и отталкивающих дальнедействующих взаимодействий. Более детальное описание дается в работе [70].

2.7.2. Сравнение точных кулоновских волновых пакетов и псевдосостояний.

Практические расчеты с кулоновскими волновыми пакетами приводятся в конце этой главы. Ограничимся здесь иллюстрацией, показывающей, что эти состояния можно аппроксимировать в некотором L_2 базисе. В качестве такого базиса используется базис гауссоид с комплексными параметрами (Б.5), предложенный в работе [104]. Детали расчета приводятся в работе [70].

На рисунке 2.2 показано сравнение координатного поведения точных кулоновских пакетов (найденных численно из регулярных кулоновских функций) и соответствующих функций псевдосостояний, полученных с использованием комплексного гауссова базиса, для четырех различных энергетических интервалов: при малых энергиях столкновения $E \sim 0.1$ МэВ (а) и $E \sim 1.0$ МэВ (б), средних энергиях $E \sim 10$ МэВ (в) и относительно высоких $E \sim 50$ МэВ (г). В качестве кулоновского гамильтониана здесь выбран гамильтониан взаимодействия двух α частиц на асимптотике (т.е. без ядерной части взаимодействия). Как видно из рисунка, оба типа базисных функций практически

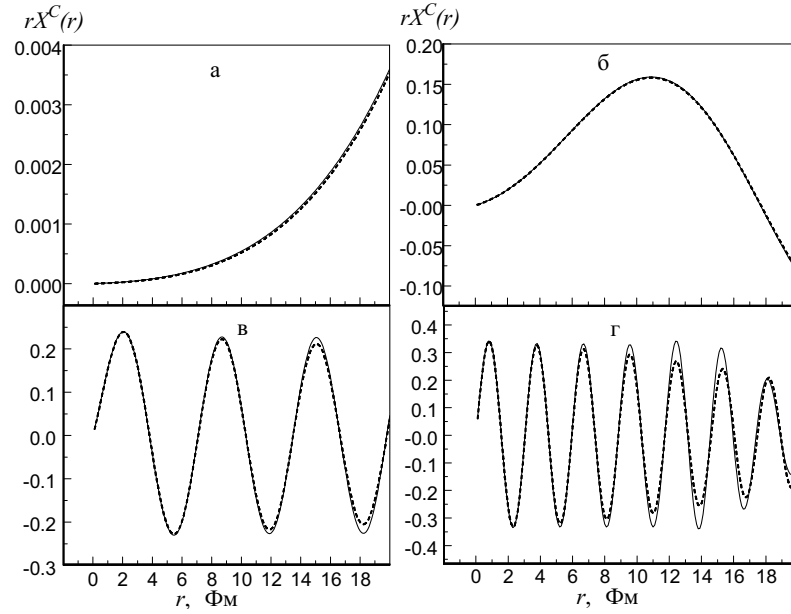


Рисунок 2.2. Сравнение точных кулоновских волновых пакетов (штриховые кривые) и соответствующих псевдосостояний, построенных с использованием комплексного гауссова базиса (сплошные кривые), для четырех разных энергетических интервалов со следующими собственными значениями энергии $\mathcal{E}_k^*$ и ширинами D_k : а) $\mathcal{E}_k^* = 0.109$ МэВ, $D_k = 2.4 \cdot 10^{-2}$ МэВ; б) $\mathcal{E}_k^* = 1.01$ МэВ, $D_k = 1.9 \cdot 10^{-1}$ МэВ; в) $\mathcal{E}_k^* = 10.6$ МэВ, $D_k = 1.65$ МэВ; г) $\mathcal{E}_k^* = 49.9$ МэВ, $D_k = 7.8$ МэВ.

совпадают даже при достаточно большой энергии $E \sim 50$ МэВ вплоть до расстояний $r \sim 10$ Фм, превышающих радиус ядерного $\alpha - \alpha$ потенциала (около 4 Фм).

Отметим, что небольшое отличие в величине максимумов между точными пакетами и соответствующими псевдосостояниями легко объяснить. В самом деле, точные пакетные функции, будучи нормированы на единицу, убывают на асимптотике как $\sin(\frac{1}{2}d_i r)/(\frac{1}{2}d_i r)$, т.е. степенным образом, тогда как функции псевдосостояний (нормированные также на единицу) спадают к нулю экспоненциально.

В результате этого более быстрого убывания при $r \rightarrow \infty$ и при той же нормировке амплитуда осцилляций для функций псевдосостояний будет всегда несколько выше, чем соответствующая амплитуда для более медленно убывающих точных волновых пакетов.

Замечательное свойство совпадения псевдосостояний с КВП позволяет строить конечномерные аппроксимации для кулоновской резольвенты практически в любом базисе. При этом требуется всего лишь однократная диагонализация матрицы кулоновского гамильтониана в этом базисе (см. также работу [94]).

2.8. Многоканальная задача

Рассмотрим также двухчастичную многоканальную задачу. Часто многочастичные задачи в атомной, ядерной и молекулярной физике сводятся к эффективным многоканальным, хотя число связанных каналов может быть большим. Также многоканальные задачи возникают в двухчастичном случае, когда потенциал взаимодействия не является сферически симметричным.

Полный многоканальный гамильтониан системы может быть записан в матричном виде (здесь индексы ν, ν' определяют начальные экспериментальные каналы)

$$h_{\nu\nu'} = h_{0\nu}\delta_{\nu\nu'} + v_{\nu\nu'}, \quad \nu, \nu' = 1, \dots, K. \quad (2.68)$$

Здесь $h_{0\nu}$ — свободный гамильтониан в канале ν , имеющий простой непрерывный спектр $[\Omega_\nu, \infty)$ с порогом Ω_ν , $v_{\nu\nu'}$ — потенциалы связи. Матрица свободного многоканального гамильтониана $\mathbf{h}_0$ диагональна, поэтому его спектр является объединением спектров гамильтонианов $h_{0\nu}$, $\nu = 1, \dots, K$. Таким образом, непрерывный спектр многоканального гамильтониана является вырожденным в отличие от одноканального случая. При этом степень вырождения d равна числу открытых каналов и в общем случае зависит от энергии. При каждой энергии существует d линейно независимых функций рассеяния, отвечающих различным граничным условиям (например, падающим волнам в каждом из открытых каналов).

2.8.1. Пакетный базис для многоканальной задачи

Определим теперь наборы СВП для каждого свободного гамильтониана $h_{0\nu}$. При этом удобно определить разбиения непрерывного спектра в каждом канале

таким образом, чтобы интервалы дискретизации в различных каналах совпадали. Для этого граничные точки интервалов находятся при одинаковых энергиях во всех открытых каналах. В результате получается вырожденный дискретизованный спектр многоканального свободного гамильтониана $\mathbf{h}_0$.

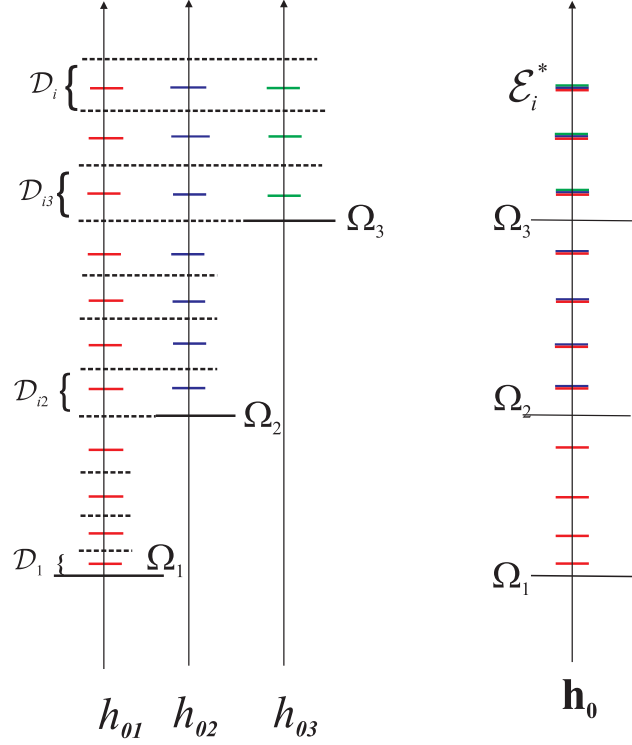


Рисунок 2.3. Структура дискретизованного спектра для отдельных свободных гамильтонианов $h_{0\nu}, \nu = 1, 2, 3$ (слева) и получающийся в результате вырожденный дискретизованный спектр многоканального свободного гамильтониана $\mathbf{h}_0$ (справа). Штриховые линии представляют границы интервалов, в то время как цветные сплошные линии отвечают собственным значениям свободного гамильтониана $\mathcal{E}_i^*$.

Такой вырожденный спектр строится следующим образом. Берется разбиение непрерывного спектра для первого канала, при этом область $[\Omega_1, E_{\max}]$ разбивается, как обычно, на конечное число N энергетических интервалов $\mathfrak{D}_i \equiv [\mathcal{E}_{i-1}, \mathcal{E}_i]_{i=1}^N$. При этом границы интервалов выбираются так, чтобы порог Ω_ν каждого канала ν совпадал с границей некоторого бина i_ν . Тогда для всех бинов с индексами $i < i_\nu$ открыты $\nu - 1$ каналов. Здесь предполагается, что каналы нумеруются в порядке возрастания пороговых энергий Ω_ν и $i_1 = 1$. Структура построенного таким образом дискретизованного вырожденного спектра показана на Рис. 2.3.

Соответствующий набор свободных волновых пакетов (энергетических) для

каждого канала ν определяется как и в одноканальном случае:

$$|x_i^\nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{D_i}} \int_{\mathfrak{D}_i} dE |\psi_0^\nu(E)\rangle, \quad \nu = 1, \dots, K, \quad i = i_\nu, \dots, N, \quad (2.69)$$

где $|\psi_0^\nu(E)\rangle$ — точные собственные функции свободного гамильтониана $h_{0\nu}$, и энергия E включает кинетическую энергию в рассматриваемом канале и порог Ω_ν .

2.8.2. Уравнение для оператора перехода

Теперь легко построить конечномерное представление для всех свободных резольвент каналов $g_0^\nu(E) = [E + i0 - h_{0\nu}]^{-1}$ аналогично одноканальному случаю. Резольвенты каналов g_0^ν входят в спектральное разложение многоканальной свободной резольвенты $\mathfrak{g}_0(E)$. В результате этот оператор имеет следующее разложение в пакетном базисе:

$$\mathfrak{g}_0(E) = \sum_{\nu=1}^K \sum_{i=i_\nu}^N |x_i^\nu\rangle g_i^\nu(E) \langle x_i^\nu|, \quad (2.70)$$

где комплексные собственные значения $g_i^\nu(E)$ определяются по тем же формулам, что и в одноканальном случае.

Далее можно получить конечномерные представления для основных операторов, полностью аналогично одноканальному случаю. В частности, элементы оператора перехода определяются из многоканального уравнения Липпмана–Швингера:

$$t_{\nu\nu'}(E) = v_{\nu\nu'} + \sum_{\mu=1}^K v_{\nu\mu} g_0^\mu(E) t_{\mu\nu'}(E), \quad \nu, \nu' = 1, \dots, K. \quad (2.71)$$

Решение многоканальной задачи рассеяния находится из решения матричного аналога уравнения (2.71) как простое обобщение одноканального уравнения (2.41).

В главе 4 будет показано, как можно построить спектральное разложение для полной многоканальной резольвенты и, соответственно, получить явное выражение для элемента t -матрицы вне массовой поверхности без решения уравнений, а на основе спектрального разложения для полного многоканального гамильтониана.

2.9. Приложения в двухчастичной задаче

2.9.1. Расчеты для оптического нелокального нуклон-ядерного потенциала

Пакетная техника является универсальной с точки зрения используемых потенциалов взаимодействия, в частности, численная процедура решения одинакова

для локальных и нелокальных потенциалов.

В качестве иллюстрации рассмотрим модельную задачу рассеяния нейтронов на ядре с оптическим нелокальным потенциалом Перея–Бака: [105]

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V\left(\frac{1}{2}|\mathbf{r} + \mathbf{r}'|\right) \cdot W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (2.72)$$

где $V(x)$ — это обычный потенциал Вудса–Саксона, зависящий от аргумента $x = \frac{1}{2}|\mathbf{r} + \mathbf{r}'|$

$$V(x) = \frac{V_0}{e^{\left(\frac{x-R}{a_s}\right)} + 1} + i \frac{4V_d \cdot e^{\left(\frac{x-R}{a_d}\right)}}{\left[e^{\left(\frac{x-R}{a_d}\right)} + 1\right]^2}, \quad R = r_0 A^{\frac{1}{3}}, \quad (2.73)$$

где A — массовое число ядра. При этом нелокальная часть W берется в виде гауссианы

$$W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{\exp[-(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\beta)^2]}{\pi^{3/2}\beta^3} \quad (2.74)$$

с масштабным параметром β .

В расчете использовались следующие значения параметров потенциала: $V_0 = -70$ МэВ, $r_0 = 1.25$ Фм, $a_s = 0.65$ Фм, $V_d = -7.0$ МэВ, $a_d = 0.65$ Фм и $\beta = 1.0$ Фм для нелокальной части. Такие параметры отвечают рассеянию нейтронов на ядре ^{56}Fe [105]. Массы нейтрона и ядра взяты как 1 а.е.м и 56 а.е.м. соответственно.

Для оценки точности метода результаты пакетного подхода сравниваются с результатами прямого численного интегрирования уравнения Шредингера на основе метода Нумерова для локальных фазово-эквивалентных потенциалов (ЛФЭП), которые обеспечивают те же дифференциальные сечения рассеяния при энергиях падающих нейтронов $E_n = 7$ и 26 МэВ [105]. Такие потенциалы также имеют вид (2.73). Параметры этих потенциалов следующие: $V_0 = -40.31$ МэВ, $r_0 = 1.32$ Фм, $a_s = 0.62$ Фм, $V_d = -3.94$ МэВ и $a_d = 0.65$ Фм для $E = 7$ МэВ; $V_0 = -34.80$ МэВ, $r_0 = 1.31$ Фм, $a_s = 0.62$ Фм, $V_d = -3.34$ МэВ и $a_d = 0.65$ Фм для $E = 26$ МэВ.

Для расчета в пакетном базисе использовалась эквидистантная сетка дискретизации по энергии (A.1). На Рис. 2.4 а и б представлены реальные части S -волновых парциальных фазовых сдвигов, а также параметров неупругости $\eta_0 \equiv |\exp(2i\delta_0(E))|$ для различных размерностей N используемых пакетных базисов. Значение максимальной энергии $E_{\max} = 200$ МэВ, использовавшееся в этом расчете, позволяет получить достаточно точные фазовые сдвиги и параметры неупругости для широкого диапазона энергий от нуля до 100 МэВ. При этом, несмотря на достаточно широкие бины (~ 10 МэВ), базис размерности $N = 20$ вполне достаточен для

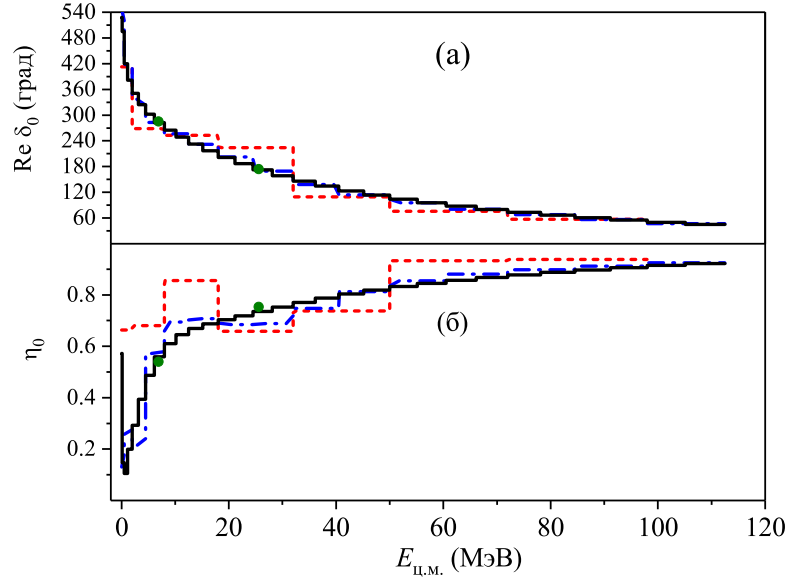


Рисунок 2.4. Реальные части S -волновых фазовых сдвигов $\text{Re } \delta_0$ (а) и параметры неупругости η_0 (б) для рассеяния нейтронов на ядре ^{56}Fe (при использовании нелокальных оптических потенциалов), полученные на основе пакетной техники с различной размерностью базиса: $N = 10$ (штриховая кривая), $N = 20$ (штрих пунктирная кривая) и $N = 40$ (сплошная кривая). Точки соответствуют результатам для ЛФЭП, полученным на основе прямого численного интегрирования уравнения Шредингера.

сходимости результатов. Также результаты пакетных расчетов прекрасно согласуются с результатами прямых расчетов для ЛФЭП.

Такая же сходимость получается при использовании распределения Чебышева (А.2) для границ бинов по энергии (см. детали в Приложении А). При этом получилось, что расчеты, проведенные на различных распределениях дискретизации, приводят к совпадающим результатам. Таким образом, при достижении сходимости процедура дискретизации *не зависит* от параметров разбиения спектра, а сами результаты отвечают решениям исходных интегральных уравнений.

Структура сетки Чебышева (А.2) позволяет также исследовать сходимость решения к точному с увеличением размерности базиса при фиксированной энергии E . Для этого удобно положить общий параметр сетки равным исследуемому значению энергии $E_{\text{mid}} = E$, т.к. при этом энергия среднего бина (с индексом $k = \frac{1}{2}N + 1$) почти совпадает со значением E_{mid} (для четных N). В таблице 2.1 представлены s -волновые фазовые сдвиги и параметры неупругости для различных N при двух энергиях падающих нейтронов 7 и 26 МэВ. Из таблицы видно, что пакетный подход

Таблица 2.1. Реальные части S -волновых фазовых сдвигов $\text{Re } \delta_0$ (град) и параметры неупругости η_0 для рассеяния нейтронов на ядре ^{56}Fe , полученные на основе сетки Чебышева при различной размерности базиса N . Результаты ЛФЭП соответствуют прямому численному решению уравнения Шредингера для локальных потенциалов.

E_n (МэВ)	7		26	
N	$\text{Re } \delta_0$	η_0	$\text{Re } \delta_0$	η_0
10	195.56	0.561	184.64	0.682
20	285.03	0.502	175.76	0.727
40	283.28	0.529	174.07	0.741
60	284.34	0.534	173.80	0.745
80	284.90	0.534	173.71	0.745
100	285.10	0.534	173.67	0.745
ЛФЭП	285.23	0.538	174.42	0.754

позволяет получить достаточно точные фазы при $N = 100$, которые практически совпадают с результатами для ЛФЭП при рассматриваемых энергиях.

Наконец, на Рис. 6.2 представлены дифференциальные сечения рассеяния нейтронов на ядре ^{56}Fe при $E_n = 7$ МэВ, полученные на основе пакетной техники на сетке Чебышева размерности $N = 100$, взятой в каждой парциальной волне (до $L_{\max} = 10$), необходимой для сходимости парциально-волнового разложения. Полученные в пакетной технике сечения практически совпадают с результатами для ЛФЭП.

2.9.2. Рассеяние двух α -частиц

В качестве примера решения задачи с заряженными частицами рассмотрим ставшую классическим тестом задачу рассеяния двух α -частиц.

Для нахождения парциальных фазовых сдвигов кулоновско-ядерного рассеяния построим сначала базис кулоновских волновых пакетов, отвечающих чисто кулоновскому гамильтониану:

$$h_C = h_0 + \frac{4e^2}{r}, \quad (2.75)$$

описывающему отталкивание двух точечных α частиц на асимптотике.

Для построения этих состояний используем диагонализацию кулоновского гамильтониана в базисе комплексных гауссоид (Б.4) (см. Приложение Б). Выше

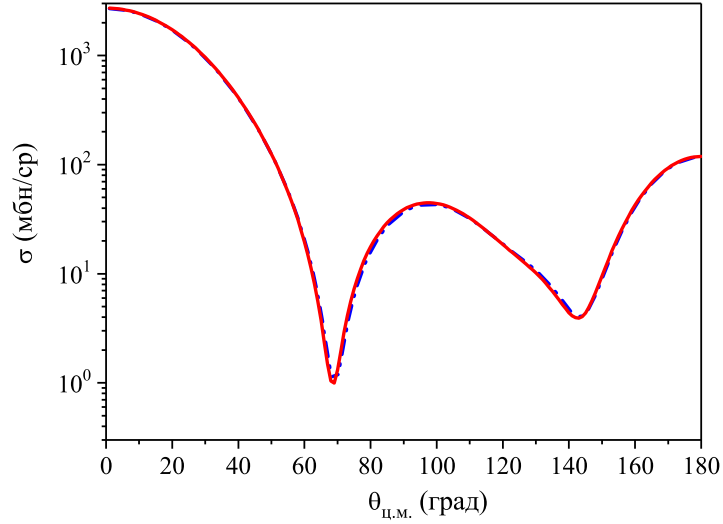


Рисунок 2.5. Дифференциальное сечение рассеяния нейтронов на ядре ^{56}Fe при $E_n = 7$ МэВ, полученные на основе пакетной техники на сетке Чебышева $N = 100$ (штрих пунктирная кривая) в сравнении с полученными на основе прямого численного решения уравнения Шредингера для ЛФЭП (сплошная кривая).

уже было показано, что построенные таким образом КВП практически совпадают с точными.

В качестве потенциала взаимодействия двух α -частиц в работе [107] был предложен глубокий потенциал с запрещенными уровнями:

$$v_{\alpha\alpha}(r) = v_C(r) + \frac{V_0}{1 + \exp(\frac{r-R_v}{a})}, \quad (2.76)$$

со следующими значениями параметров:

$$V_0 = -125 \text{ МэВ}, \quad R_v = 1.78 \text{ Фм}, \quad a = 0.66 \text{ Фм}. \quad (2.77)$$

Характерной особенностью этого потенциала является наличие низколежащих связанных состояний (запрещенных принципом Паули) в S - и D -волнах, а также трех ярко выраженных резонансов при $\alpha - \alpha$ рассеянии в S -, D - и G -парциальных волнах. Это узкий S -волновой резонанс при энергии порядка сотни кэВ, и более широкие резонансы при энергиях $E_R = 2.89$ МэВ ($L = 2$) и $E_R = 11.79$ МэВ ($L = 4$),

В качестве кулоновского $\alpha - \alpha$ взаимодействия берется потенциал:

$$v_C(r) = \frac{4e^2}{r} \text{erf}(\gamma r), \quad (2.78)$$

отвечающий электростатическому взаимодействию двух протяженных зарядов $2e$ с гауссовым пространственным распределением плотности для каждого заряда, при этом параметр ширины такого распределения $\gamma = 0.75 \text{ Фм}^{-1}$. После выделения точечного кулоновского взаимодействия, входящего в асимптотический гамильтониан (2.75), короткодействующая часть потенциала принимает вид:

$$v_S = \frac{V_0}{1 + \exp(\frac{r-R_v}{a})} - \frac{4e^2}{r} \text{erfc}(\gamma r) \quad (2.79)$$

Метод пакетной дискретизации континуума в сочетании с исключительно гибким комплексным гауссовым базисом позволяет весьма точно воспроизвести резонансное поведение $\alpha - \alpha$ фазовых сдвигов.

Чтобы сделать вычисления матричных элементов потенциала полностью аналитическими, удобно заменить потенциал Вудса-Саксона на эквивалентный ему гауссов потенциал Бака [108]:

$$U(r) = U_0 e^{-\beta r^2} \quad (2.80)$$

с параметрами $U_0 = -122.7 \text{ МэВ}$ и $\beta = 0.22 \text{ Фм}^{-2}$, для которого матричные элементы в гауссовом базисе имеют аналитический вид.

На рисунке 2.6а представлена энергетическая зависимость найденных на основе МПДК S -, D - и G -волновых парциальных фазовых сдвигов в сравнении с “точными” фазами, полученными путем прямого численного интегрирования уравнения Шредингера. Видно, что при расчетах в пакетном базисе хорошо воспроизводится резонансное поведение каждой из фаз рассеяния. Детали расчетов можно найти в работе [70]. В частности, относительная точность вычислений фазовых сдвигов при размерности базиса $N = 80$ составляет в среднем десятые доли процента.

2.9.3. Описание NN рассеяния в дибарионной модели

В качестве примера решения многоканальной задачи рассмотрим рассеяние двух нуклонов с реалистическим потенциалом, предложенным недавно для связанных парциальных каналов 3S_1 и 3D_1 в рамках дибарионной модели [89].

Особенность этой модели состоит в том, что в ней учитываются ненуклонные степени свободы. Таким образом, полное пространство модели включает внешний и внутренний канал. Внешний канал отвечает относительному движению двух нуклонов, в то время как внутренний отвечает шестикварковому мешку (дибариону). В

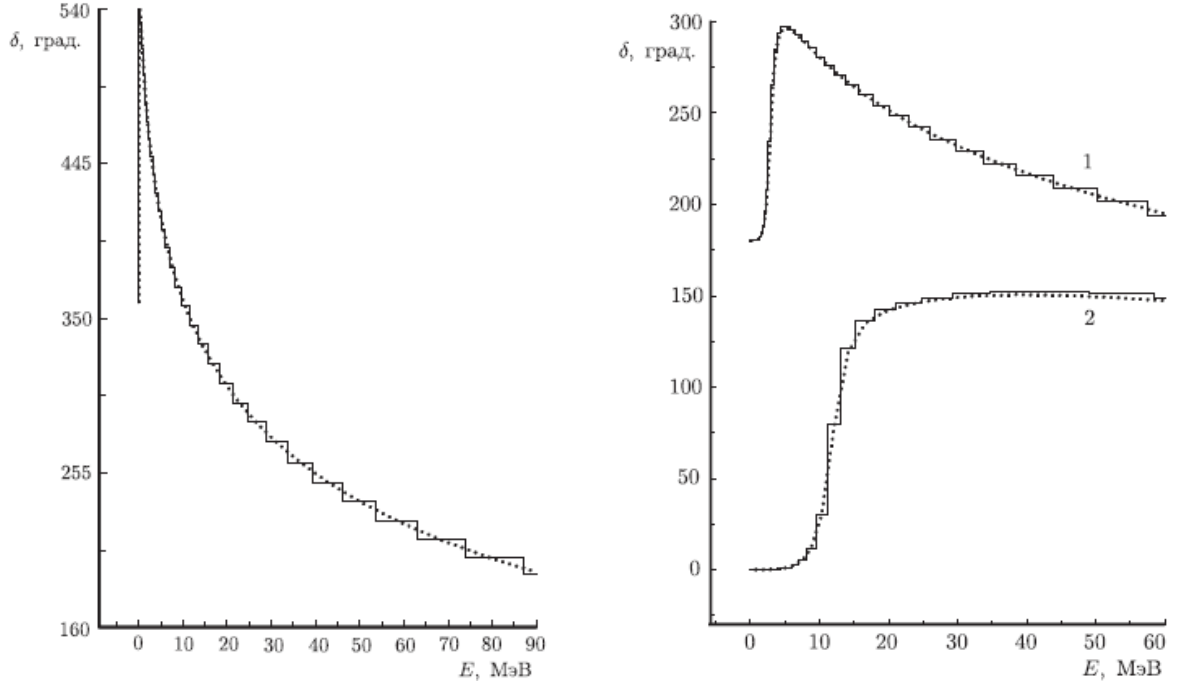


Рисунок 2.6. Сравнение точных (пунктирная кривая) и построенных на основе формализма кулоновских пакетов (сплошная кривая) S -волновых (слева), D -волновых (справа, 1) и G -волновых (справа, 2) парциальных фазовых сдвигов $\alpha - \alpha$ рассеяния.

простейшем случае внутреннее подпространство одномерно, в нем есть одно состояние $|\alpha\rangle$ с энергией E_0 . Поэтому полный гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = \begin{pmatrix} h_{NN} & |\Phi\rangle\langle\alpha| \\ |\alpha\rangle\langle\Phi| & E_0|\alpha\rangle\langle\alpha| \end{pmatrix}, \quad (2.81)$$

где h_{NN} — гамильтониан во внешнем канале, включающий периферический потенциал однопионного обмена, а формфактор перехода $|\Phi\rangle$ определен во внешнем канале и представляет собой проекцию полной $6q$ функции на NN канал. Для рассматриваемого случая связанных парциальных волн 3S_1 – 3D_1 $|\Phi\rangle$ — это двухкомпонентный столбец (см. работу [89]).

Потенциал однопионного обмена $V_{\text{ОПЕР}}$, входящий в гамильтониан h_{NN} , задается в стандартной форме⁹ [96]. Для S -волнового взаимодействия в модели учитываются также свойства симметрии шестикварковой системы, приводящие к дополнительному

⁹ Для улучшенной аппроксимации парциальных фазовых сдвигов здесь используется немного уменьшенное значение параметра обрезания $\Lambda_{\pi NN} = 0.62$ ГэВ (вместо значения 0.65 ГэВ из работы [96]).

слагаемому с отталкиванием V_{orth} :

$$V_{\text{orth}} = \lambda_0 |\phi_0\rangle\langle\phi_0|. \quad (2.82)$$

При $\lambda_0 \rightarrow \infty$ такой потенциал отвечает полному исключению симметричной шестикварковой компоненты $|s^6[6]\rangle$ из функции NN рассеяния, для того чтобы обеспечить доминирование компоненты смешанной симметрии $|s^4p^2[42]\rangle$. Оператор типа V_{orth} похож на потенциалы с запрещенными состояниями, используемые для описания взаимодействия ядер, и заменяет традиционный отталкивающий кор в NN системе [109].

Строгое условие ортогональности требует предела $\lambda_0 \rightarrow \infty$ в уравнении (2.82). Однако недавно [89] была предложена модификация такого потенциала, учитывающая возможность сильной связи S -волнового NN канала с каналом NR , где R — нуклонный резонанс Ропера. В этом варианте модели константа λ_0 остается конечной (см. детали в работе [89]). При этом наличие потенциала (2.82) приводит к тому, что волновые функции относительного движения двух нуклонов при низких энергиях практически ортогональны состоянию $|\phi_0\rangle$, в то время как при промежуточных энергиях состояния рассеяния имеют заметную примесь этого состояния.

Таким образом, полный внешний гамильтониан состоит из трех слагаемых:

$$h_{NN} = h_0 + V_{\text{OPEP}} + V_{\text{orth}}. \quad (2.83)$$

Можно далее исключить по Фешбаху внутренний канал, и получить эффективный гамильтониан во внешнем канале, который зависит от энергии:

$$H_{\text{eff}}(E) = h_{NN} + \frac{1}{E - E_0} |\Phi\rangle\langle\Phi|. \quad (2.84)$$

Однако пакетная техника позволяет решать задачу явно в двухканальном пространстве.

Формфакторы, входящие в уравнения (2.81) и (2.82), берутся в виде осцилляторных функций (1.27), отвечающих орбитальному моменту L и радиальному квантовому числу n , равному числу узлов в волновой функции относительного движения двух нуклонов. В частности, $|\phi_0\rangle$ имеет вид S -волнового состояния с $n = 0$ и радиальным параметром r_0 . “Дибарионный” формфактор $|\Phi\rangle$ имеет две компоненты, отвечающие S - и D -волнам, т.е. $|\Phi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_S |\phi_S\rangle \\ \lambda_D |\phi_D\rangle \end{pmatrix}$. Здесь $|\phi_S\rangle$ — осцилляторная функция с одним узлом и тем же радиальным параметром r_0 , что

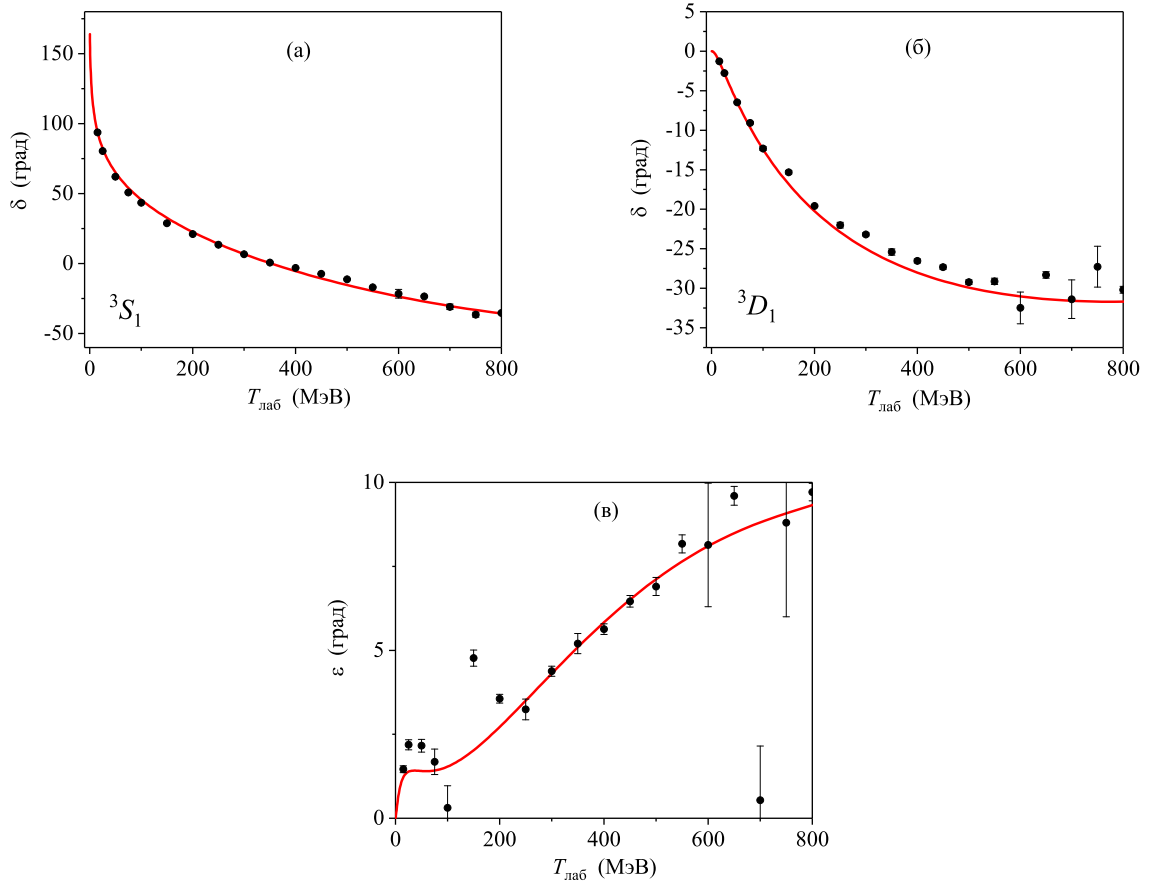


Рисунок 2.7. Парциальные фазовые сдвиги (а), (б) и угол смешивания (в) для связанных NN каналов 3S_1 – 3D_1 , найденные в дибарионной модели (сплошная кривая), в сравнении с данными парциально-волнового анализа группы SAID [110] (точки).

и $|\phi_0\rangle$. Таким образом, эти формфакторы ортогональны друг другу. D -волновая часть $|\phi_D\rangle$ представляется безузловой осцилляторной функцией (1.27), отвечающей $L = 2$, с радиальным параметром r_D . Значения параметров, использованные в модели, следующие: $E_0 = 440$ МэВ, $\lambda_0 = 165$ МэВ, $r_0 = 0.475$ Фм, $\lambda_S = 248.1$ МэВ, $\lambda_D = 65.9$ МэВ, $r_D = 0.6$ Фм.

На Рис. 2.7 представлены парциальные фазовые сдвиги и угол смешивания, полученные для такого потенциала, в сравнении с данными парциально-волнового анализа (ПВА) группы SAID [110]. Видно хорошее описание фазовых сдвигов в широком диапазоне энергий. В этом случае наряду со связанным состоянием (дейтрон) у полного гамильтониана есть достаточно узкий резонанс при лабораторной энергии порядка 960 МэВ (при этом полная инвариантная энергия $\sqrt{s}$ близка к порогу канала NR), который проявляется в фазовых сдвигах только в очень узкой области вблизи его

положения.

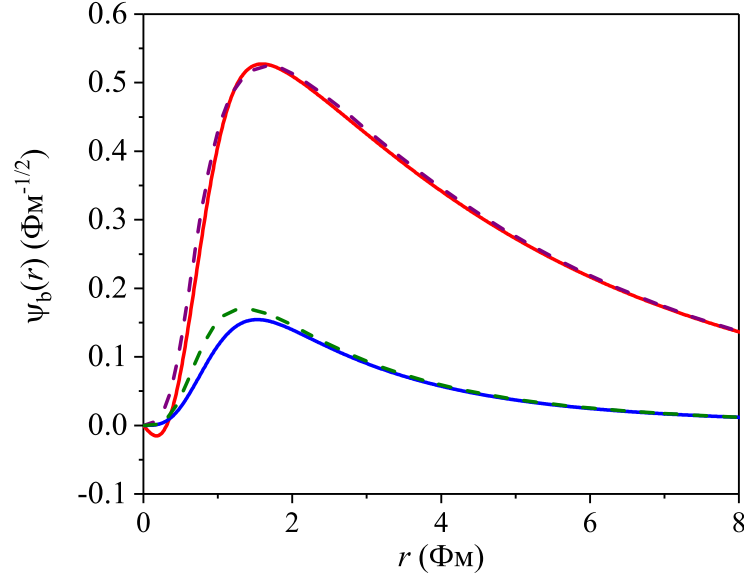


Рисунок 2.8. S - и D -волновые части волновой функции дейтрона, найденные для дибарионного потенциала (сплошные кривые) и для наймегенского потенциала [111] (штриховые кривые).

Поскольку полный гамильтониан (2.81) не зависит от энергии, в пакетном базисе можно также найти функцию связанного состояния (см. Рис. 2.8) и псевдосостояния континуума из прямой диагонализации матрицы гамильтониана. Здесь видно, как проявляет себя потенциал (2.82) в случае конечной константы λ_0 . S -волновая часть функции связанного состояния имеет узел на малых расстояниях, в отличие от функции для стандартного наймегенского потенциала [111], которая при малых r подавлена из-за сильного отталкивания во взаимодействии (см. Рис. 2.8)

Также интересный вид имеют псевдосостояния при энергиях, близких к положению резонанса. S -волновые компоненты двух таких функций приводятся на рисунке 2.9. Как видно из рисунка, в области взаимодействия волновые функции имеют большую примесь фактора $\phi_0(r)$, в то время как за границей этой области они выходят на нужную асимптотику. Такое поведение псевдосостояний соответствует известному поведению функции рассеяния при энергии, близкой к резонансу [112].

В полностью реалистичном расчете, приведенном в работе [89], учитываются также возможные неупругие процессы при упругом NN рассеянии. Для

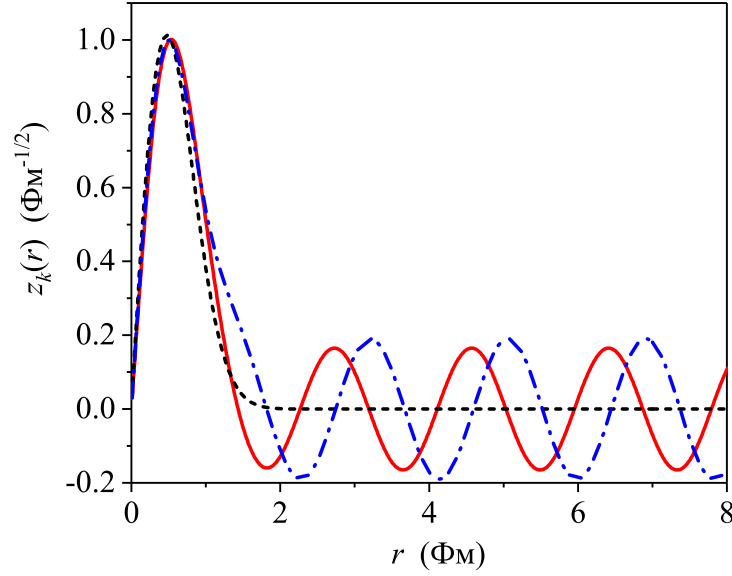


Рисунок 2.9. S -волновые части псевдосостояний полного гамильтониана при энергиях, близких к положению резонанса, — сплошная и штрих пунктирная кривые. Координатная зависимость формфактора $\phi_0(r)$ показана штриховой кривой. Все функции нормированы на общий максимум для сравнения.

этого используется дополнительное приближение, в котором внутреннее состояние приобретает ширину, учитывающую вероятность его распада по неупругим каналам (внутреннее состояние становится “частично одетым”). В этом случае дибарионная модель позволяет описать также и параметры неупругости в амплитуде рассеяния, а эффективный гамильтониан имеет высоколежащий резонанс вблизи порога канала NR (теперь уже не узкий), параметры которого близки к экспериментальным значениям (см. детали в работе [89]).

Следует упомянуть здесь, что недавно на основе пакетной техники были сделаны расчеты для других парциальных каналов NN рассеяния в рамках дибарионной модели [95–97].

2.10. Обсуждение результатов

В этой главе был развит формализм стационарных волновых пакетов, позволяющий сводить решение интегрального уравнения Липпмана-Швингера (или систему связанных уравнений в многоканальном случае) к матричной схеме. Метод

имеет ряд существенных преимуществ. Например, не возникает дополнительной сложности при рассмотрении нелокальных потенциалов, поскольку они представляются матрицами в пакетном базисе. Благодаря дополнительному усреднению по энергиям, уравнения не содержат никаких особенностей и решаются непосредственно на вещественной оси энергий.

Важным результатом является развитие формализма кулоновских волновых пакетов для решения интегрального уравнения для кулоновско-ядерной t -матрицы. Дело в том, что обычно УЛШ решается в импульсном представлении, в котором регулярные кулоновские функции имеют существенные особенности. Поэтому часто задача заряженных частиц решается в интегральном виде приближенно для экранированного кулоновского потенциала, а затем применяется перенормировка решения с учетом точной кулоновской фазы. В предложенном формализме соответствующие кулоновские волновые пакеты могут быть найдены численно в координатном представлении или их можно аппроксимировать в подходящем L_2 базисе, а кулоновская резольвента задается явной диагональной матрицей. Таким образом, нахождение кулоновско-ядерной амплитуды не отличается по сложности от нахождения амплитуды для нейтральных частиц. В обоих случаях решается матричный аналог интегрального уравнения без каких-либо энергетических или импульсных особенностей.

Также в этой главе были приведены конкретные примеры решения актуальных двухчастичных задач на основе предложенного формализма. В главе 4 развитый формализм будет обобщен на случай рассеяния трех частиц. В следующей главе приводится описание метода дискретных спектральных сдвигов, позволяющего находить S -матрицу в многоканальной задаче на основе диагонализации матриц полного и свободного гаимльтонианов без решения уравнений, т.е. решать задачи рассеяния практически так же, как и задачи на связанные состояния систем.

Результаты этой главы опубликованы в работах [65, 67–72, 75, 85].

Глава 3. Решение задач рассеяния на основе спектральных разложений

3.1. Вводные замечания

В предыдущей главе было показано, как решается задача рассеяния на основе пакетных аналогов интегральных уравнений. Однако есть возможность найти наблюдаемые в задаче рассеяния без явного привлечения уравнений теории рассеяния и явного вида граничных условий. Существует ряд подходов, использующих спектральные свойства полного и свободного гамильтонианов [32, 78, 114–117]. Как правило, такие соотношения используются в теории твердого тела, квантовой статистике и теории хаоса. Известным примером здесь является вириальное разложение, в котором полные спектральные суммы содержат парциальные фазовые сдвиги и матрицу рассеяния [118–120].

Удобным языком для построения спектральных разложений является формализм функции спектрального сдвига (ФСС) [121–126], развитый в математической теории рассеяния и спектральной теории операторов. Ввиду того, что корректно сама функция спектрального сдвига определяется через детерминант Фредгольма (т.е. фактически через оператор рассеяния), этот формализм не привел к новым способам нахождения наблюдаемых и, по-видимому, в силу этого практически не известен среди физиков. Однако, в ранних работах И.М. Лифшица [127, 128], в которых изучались свойства квазинепрерывного (дискретизованного) спектра, функция спектрального сдвига фактически уже была введена (хотя сам термин появился позднее). Эта функция характеризует изменение дискретизованного спектра свободного гамильтониана при добавлении взаимодействия. Такое “раннее” определение наряду с более поздними результатами в теории ФСС позволило создать новый общий подход к решению задач рассеяния на основе дискретизации континуума — метод дискретных спектральных сдвигов (ДСС) [76, 78, 84], в котором наблюдаемые находятся из спектральных свойств полного и свободного гамильтонианов без решения каких-либо уравнений теории рассеяния.

Как будет показано ниже, в одноканальном случае для таких расчетов может быть использован практически любой L_2 базис, спектр матрицы гамильтониана в котором

является квазинепрерывным. Метод обобщается также на многоканальный случай, здесь используется многоканальный базис стационарных волновых пакетов.

3.2. Дискретное представление для ФСС

3.2.1. Функция спектрального сдвига

Функция спектрального сдвига $\xi(E) = \xi(E; h, h_0)$ определяется для пары эрмитовых операторов: невозмущенного h_0 и возмущенного $h = h_0 + v$. При этом предполагается, что возмущение v не является малым. Чтобы ФСС существовала, оператор v должен быть ядерным, т.е. быть компактным оператором с конечным следом (см. [124]). Считается, что впервые ФСС была введена в работе И.М. Лифшица [121], где была выведена формула следов, связывающая след разности двух одинаковых функций f от возмущенного и невозмущенного операторов с одной спектральной функцией ξ :

$$\mathrm{Tr}[f(h) - f(h_0)] = \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\lambda) f'(\lambda) d\lambda. \quad (3.1)$$

В той же работе [121] было дано формальное определение такой функции через разность спектральных мер двух операторов (позднее было показано, что такая разность не всегда существует, и было дано более корректное определение).

Далее была создана строгая математическая теория функции спектрального сдвига [122, 123]. М.Ш. Бирман и М.Г. Крейн показали, что ФСС непосредственно связана с оператором рассеяния S :

$$\det S(E) = \exp(-2\pi i \xi(E)), \quad (3.2)$$

где детерминант понимается в операторном смысле. Прямым следствием формулы Бирмана–Крейна в одноканальном случае, когда спектры свободного и возмущенного операторов невырождены, является соотношение:

$$\xi(E) = -\frac{1}{\pi} \delta(E), \quad (3.3)$$

где $\delta(E)$ — парциальный фазовый сдвиг. Таким образом, в области непрерывного спектра в одноканальных задачах функция спектрального сдвига определяет фазу рассеяния. Заметим, что в области дискретного спектра $\xi(E)$ является целой

функцией и меняется на единицу при прохождении энергии связанного состояния¹⁰ [78]. Благодаря этому свойству, фазовый сдвиг, определенный через ФСС, в точности удовлетворяет теореме Левинсона.

После появления формулы (3.2) саму функцию спектрального сдвига стали определять более корректно через аргумент детерминанта Фредгольма (фактически, через S -матрицу). Дальнейшее развитие теории носило скорее математический характер, поэтому ФСС мало известна среди физиков (в то время как фаза рассеяния известна, конечно, всем).

Следует отметить, что соотношение, аналогичное уравнению (3.2), но только связывающее производную S -матрицы и спектральную плотность, было найдено также в физике твердого тела [129–131] (см. также он-лайн издание [132]).

ФСС связана с различными объектами теории рассеяния, и поэтому имеет много разных определений. Часть из них приводится в работе [125], посвященной “многоликости” этой замечательной функции.

3.2.2. Квазинепрерывный спектр

Для того, чтобы определить функцию спектрального сдвига для дискретизованного спектра, воспользуемся результатами работы [128], в которой было введено понятие квазинепрерывного спектра. Рассмотрим семейство эрмитовых операторов $\{h_0^{(\alpha)}\}$, в котором каждый оператор зависит от малого параметра α и имеет дискретный спектр, состоящий из собственных значений $\{E_j^{0(\alpha)}\}$. Согласно [128], это семейство имеет квазинепрерывный спектр по отношению к малому параметру α , если его собственные значения можно аппроксимировать одной монотонной непрерывной функцией $\lambda(u)$:

$$E_j^{0(\alpha)} = \lambda(j\alpha) + O(\alpha), \quad j = 1, \dots, \quad (3.4)$$

при этом можно ввести шаг квазинепрерывности

$$D_j^{(\alpha)} = E_{j+1}^{0(\alpha)} - E_j^{0(\alpha)} = \alpha \left[\frac{d\lambda}{du} \Big|_{u=j\alpha} + O(\alpha) \right]. \quad (3.4a)$$

Понятие квазинепрерывности включает два важных свойства: (i) точки дискретизованного спектра $\{E_j^{0(\alpha)}\}$ лежат на некоторой гладкой кривой λ ; (ii) спектры

¹⁰ Строго говоря, при прохождении энергии связанного состояния ФСС меняется на целую величину, равную размерности собственного подпространства.

для разных значений малого параметра α отвечают той же самой зависимости от переменной $j\alpha$. Второе свойство необходимо для обеспечения сходимости результатов, полученных для конечных значений α , в пределе $\alpha \rightarrow 0$ к результатам, отвечающим исходной задаче с непрерывным спектром. При $\alpha \rightarrow 0$ из семейства $\{h_0^{(\alpha)}\}$ получается предельный оператор h_0 с непрерывным спектром. Таким образом, понятие квазинепрерывности является очень естественным для любой процедуры дискретизации континуума.

Если теперь к любому оператору из семейства $\{h_0^{(\alpha)}\}$ добавить взаимодействие конечного ранга v (так называемое возмущение, которое, однако, не считается малым), то получится семейство возмущенных операторов $h^{(\alpha)} = h_0^{(\alpha)} + v$ с квазинепрерывным возмущенным спектром $\{E_j^{(\alpha)}\}$ [128]. При этом одно или несколько собственных состояний возмущенного спектра могут оказаться ниже порога непрерывного спектра предельного оператора h_0 , т.е. они будут соответствовать истинному дискретному спектру предельного полного гамильтониана h . Зато оставшиеся состояния квазинепрерывного спектра гамильтониана $h^{(\alpha)}$ образуют перемежающуюся последовательность с невозмущенными собственными значениями $\{E_j^{0(\alpha)}\}$. Поэтому имеет место *локальное* соотношение между возмущенными и невозмущенными собственными значениями:

$$E_j^{(\alpha)} = E_j^{0(\alpha)} + \alpha \frac{d\lambda}{du} \Big|_{u=u_j} \xi_j + o(\alpha). \quad (3.5)$$

Важное свойство соотношения (3.5) состоит в том, что функция $\xi_j = \xi(E_j^{(\alpha)})$ является общей для всего семейства операторов, т.е. она не зависит от малого параметра α , а значит, относится к паре, образованной самими предельными операторами h и h_0 .

Фактически представление (3.5) и является самым первым определением ФСС. В работах [127, 128] соотношение (3.5) было доказано путем построения в явном виде функции $\xi(E)$ для случая возмущения конечного ранга. В частности, легко показать, что в случае возмущения первого ранга явное выражение для $\xi(E)$ с точностью до множителя $(-\pi)$ совпадает с выражением для фазового сдвига для одночленного сепарабельного потенциала (см. приложение к работе [78]).

В работах [127, 128] уравнение (3.5) использовалось для построения возмущенного дискретного спектра из невозмущенного в случае, когда $\xi(E)$ известна. Для решения задач рассеяния удобно использовать равенство (3.5) с обратной целью: для вычисления самой ФСС путем сравнения возмущенного и невозмущенного

дискретизованных спектров:

$$\xi(E_j^{(\alpha)}) \approx \frac{E_j^{(\alpha)} - E_j^{0(\alpha)}}{D_j^{(\alpha)}}. \quad (3.6)$$

Здесь использовано определение шага квазинепрерывности (3.4а).

3.3. Метод дискретных спектральных сдвигов

Наиболее удобный для физических приложений пример операторов с квазинепрерывным спектром — это последовательность операторов $h^{(N)}$, соответствующих матрицам гамильтониана h в некотором полном базисе L_2 типа, когда размерность базиса N увеличивается до бесконечности. Следует отметить, что при использовании L_2 базиса не всегда очевидна связь между параметром квазинепрерывности α и размерностью базиса N . Ясно только, что α стремится к нулю с увеличением N . В этом случае каждый оператор семейства имеет конечный дискретный спектр (в отличие от бесконечного квазинепрерывного спектра, введенного выше), однако мы можем рассматривать сходимость получаемых величин с увеличением размерности базиса и следить за пределом при $N \rightarrow \infty$.

3.3.1. Определение фазовых сдвигов из спектральных сдвигов

Рассмотрим некоторый базис $\{|\phi_j\rangle\}$ в гильбертовом пространстве и диагонализуем матрицы свободного и полного гамильтонианов на одной и той же оболочке $\{|\phi_j\rangle\}_{j=1}^N$. Тогда мы получим набор собственных значений $\{E_j^0\}_{j=1}^N$ и $\{E_j\}_{j=1}^N$ и соответствующих собственных функций $\{|x_j\rangle_{j=1}^N\}$ и $\{|z_j\rangle_{j=1}^N\}$ для гамильтонианов $h_0^{(N)}$ и $h^{(N)}$. Для упрощения обозначений будем опускать верхний индекс (N) у собственных значений там, где это возможно. Все собственные значения E_j^0 матрицы свободного гамильтониана положительны и представляют дискретизованный (квазинепрерывный) спектр.

Некоторые из собственных функций полного гамильтониана h $\{|z_j\rangle\}_{j=1}^{N_b}$ соответствуют отрицательным собственным значениям $E_j < 0$ и являются аппроксимациями для связанных состояний в системе, в то время как остальные собственные функции и собственные значения, лежащие в области непрерывного спектра (псевдосостояния), как раз и относятся к квазинепрерывному спектру. Их также можно рассматривать как аппроксимации для ВВП (2.56), введенных в главе 2.

Если для рассматриваемого базиса выполняется условие квазинепрерывности по отношению к малому параметру $\alpha \sim 1/N$, то, используя представление (3.6) для ФСС и ее явную связь с фазовым сдвигом (3.3), легко получить формулу для нахождения фазовых сдвигов непосредственно из разностей дискретных собственных значений гамильтонианов $h^{(N)}$ и $h_0^{(N)}$:

$$\delta(E_j) \approx -\pi \frac{E_j - E_j^0}{D_j}, \quad (3.7)$$

где E_j^0 и E_j — собственные значения матриц гамильтонианов в выбранном базисе, а индекс j нумерует положительные собственные значения полного гамильтониана. Представление (3.7) для фаз и составляет основу метода дискретных спектральных сдвигов.

На практике обычно встает вопрос корректного определения величин D_j для свободного спектра. Дело в том, что при дагонализации получаются только собственные значения E_j^0 , а D_j нужно вычислять по ним. При этом при достаточно небольших размерностях базиса определение D_j через разности ближайших собственных значений согласно левой части (3.4а), как правило, приводит к погрешностям в вычислениях. Более точные результаты получаются, если считать шаги дискретизации через производные от характеристической функции (как в правой части (3.4а)). Если такую функцию трудно восстановить для используемого базиса, то D_j можно считать по собственным значениям E_j^0 , используя формулы конечных разностей для производной. С увеличением размерности базиса, разные варианты формул для D_j приводят к практически неотличимым результатам.

Ряд численных иллюстраций на основе формализма ДСС приводится в работах [76, 78, 84].

3.3.2. Случай комплексного потенциала взаимодействия

Случай неэрмитова взаимодействия требует отдельного обоснования, поскольку ФСС была определена изначально для пары эрмитовых операторов [121, 127, 128]. Вместе с тем этот формализм можно распространить на некоторые частные случаи, например, в математической теории ФСС были получены аналоги формулы следов и обобщение формулы Бирмана–Крейна для пар диссипативных операторов и пар сжатий [133].

Ниже будет рассмотрен случай модельного потенциала, имитирующего оптический потенциал взаимодействия нуклона с ядром.

В случае комплексного потенциала (неэрмитова возмущения) есть пара операторов h_0 и h с вещественным непрерывным спектром $[0, \infty)$, однако, полный гамильтониан h не является самосопряженным. Поэтому диагонализация матрицы такого гамильтониана в вещественном L_2 базисе приводит к набору комплексных собственных значений $\{E_i\}_{i=1}^N$, которые, на первый взгляд, не имеют ничего общего с исходным вещественным непрерывным спектром h .

Однако, если предположить, что функция спектрального сдвига теперь становится комплексной, и воспользоваться общим формализмом, предложенным выше, получаются следующие аппроксимации для реальной и мнимой частей фазового сдвига:

$$\operatorname{Re}\delta(E_j) \approx -\pi \frac{\operatorname{Re}E_j - E_j^0}{D_j}, \quad (3.7a)$$

$$\operatorname{Im}\delta(E_j) \approx -\pi \frac{\operatorname{Im}E_j}{D_j}, \quad (3.7b)$$

где мнимые части собственных значений полного гамильтониана прямо определяют мнимые фазы.

В качестве примера рассмотрим локальный гауссов потенциал с комплексными параметрами:

$$V(r) = V_0 \exp(-\gamma r^2), \quad V_0 = -(40 + i10) \text{ МэВ}, \quad \gamma = 0.25 \text{ Фм}^{-2}. \quad (3.8)$$

В качестве базиса берется обычный (вещественный) осцилляторный базис. Зависимости мнимых частей комплексных собственных значений $\{E_j\}_{j=1}^N$ от реальных, полученных для потенциала (3.8) в вещественном осцилляторном базисе, показаны на Рис. 3.1а. Ясно видно, что для каждой размерности базиса N собственные значения формируют некоторую траекторию в комплексной плоскости. На первый взгляд, эти комплексные собственные значения не соответствуют исходному вещественному континууму гамильтониана h . Однако с увеличением размерности базиса N ширины дискретизации уменьшаются, и комплексные траектории “прижимаются” к вещественной оси. Из формулы для мнимой части фазового сдвига получается соотношение:

$$\operatorname{Im}E_j = \operatorname{Im}\xi(E_j^0)D_j, \quad (3.9)$$

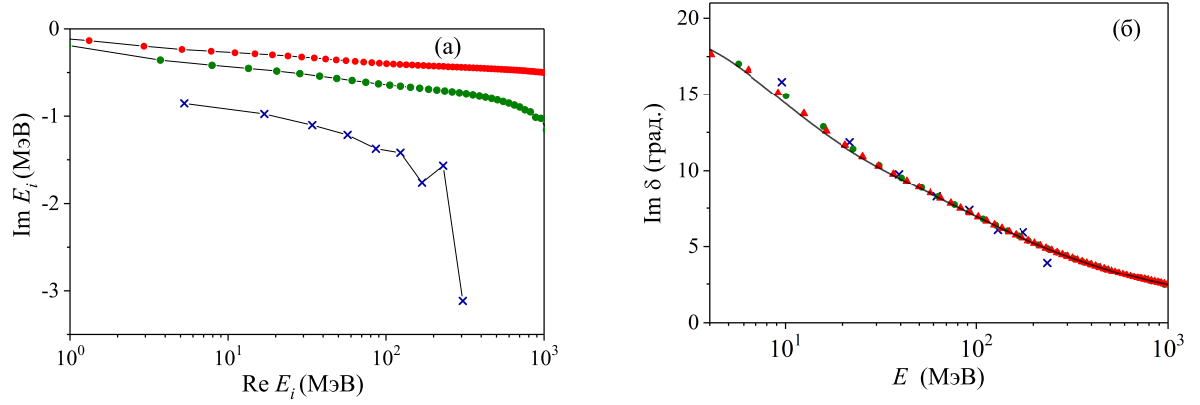


Рисунок 3.1. Комплексные собственные значения (а) для гауссова потенциала (3.8), а также мнимые части парциальных фазовых сдвигов (б) рассеяния на этом потенциале, найденные в осцилляторных базисах различной размерности N : 10 (крестики), 40 (зеленые точки) и 100 (красные точки). Сплошная кривая на панели (б) отвечает мнимой части фазы, найденной на основе численного решения уравнения Шредингера.

где $\text{Im}\xi(E_j^0)$ — мнимая часть ФСС. Это соотношение показывает, что мнимые части собственных значений уменьшаются пропорционально шагам дискретизации D_j при увеличении размерности базиса.

На Рис. 3.1б приведены мнимые части парциальных фазовых сдвигов для потенциала (3.8), полученных по формуле (3.7b). Эти фазы сравниваются с “точными” значениями, найденными из численного решения уравнения Шредингера для рассматриваемого потенциала. Как видно из рисунка, метод ДСС работает здесь отлично.

Таким образом, здесь получились два важных результата:

- (i) если потенциал взаимодействия v становится комплексным, функция спектрального сдвига может быть определена (как и фазовый сдвиг), и она связана с фазой по формуле Бирмана–Крейна (3.3);
- (ii) когда размерность базиса N увеличивается, мнимые части собственных значений уменьшаются пропорционально ширинам дискретизации при каждой энергии.

Можно ожидать, что в случае квазинепрерывного спектра эти собственные значения станут вещественными в пределе $N \rightarrow \infty$.

3.4. Вычисление ФСС из разности интегральных плотностей спектра

3.4.1. Связь ФСС со спектральной плотностью

Как уже упоминалось выше, ФСС связана со спектральной плотностью. Действительно, спектральная плотность для некоторого гамильтониана h формально определяется как след следующего оператора [134, 135]:

$$\rho(E) = \text{Tr}[\delta(E - h)], \quad (3.10)$$

где $\delta(E)$ — дельта-функция Дирака (которую не следует путать с фазовым сдвигом).

Для дискретного спектра гамильтониана h спектральная плотность записывается в виде конечной суммы:

$$\rho_d(E) = \sum_{n=1}^{n_b} \delta(E - E_n), \quad (3.11)$$

где $\{E_n\}_{n=1}^{n_b}$ — собственные значения h в области дискретного спектра.

Для непрерывного спектра h след в уравнении (3.10) не существует, и спектральную плотность для h нельзя определить. Однако существует разность плотностей полного и свободного гамильтонианов:

$$\Delta(E) = \text{Tr}[\delta(E - h) - \delta(E - h_0)]. \quad (3.12)$$

В области непрерывного спектра эта функция известна как плотность состояний континуума (ПСК)¹¹, которая определяется через след от разности (см. напр. [115]):

$$\Delta(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr}\{\text{Im}[g(E) - g_0(E)]\}, \quad (3.12a)$$

где $g_0(E)$ и $g(E)$ — резольвенты невозмущенного и возмущенного гамильтонианов:

$$g_0(E) = [E + i0 - h_0]^{-1}, \quad g(E) = [E + i0 - h]^{-1}. \quad (3.13)$$

Следует отметить, что определение (3.12a) по-видимому математически более корректно, чем формула (3.12). Однако последняя также включает область дискретного спектра h , что важно для дальнейшего вывода. Таким образом, используемая здесь $\Delta(E)$ совпадает с ПСК в области непрерывного спектра h и h_0 , а в области дискретного равна спектральной плотности $\rho_d(E)$ ¹².

¹¹ По-английски она называется continuum level density (CLD).

¹² Здесь нужно отметить, что в работах [78, 84] функция $\Delta(E)$ была определена, как и ПСК, только для области непрерывного спектра, поэтому часть $\rho_d(E)$ там рассматривалась отдельно.

Если формально подставить $f(H) = \delta(E - h)$ в формулу следов (3.1), то получается, что $\Delta(E)$ равна производной ФСС с обратным знаком или равна производной от фазового сдвига (с учетом множителя $(1/\pi)$) в области непрерывного спектра h :

$$\Delta(E) = -\frac{d\xi(E)}{dE}, \quad \Delta(E) = \frac{1}{\pi} \frac{d\delta(E)}{dE}. \quad (3.14)$$

Вторая формула известна (см. например [131]). Она используется для нахождения параметров резонансов [115], причем есть ее обобщение для расчетов в комплексной плоскости [116]. При этом левая формула в (3.14), выражающая связь между функцией $\Delta(E)$ и функцией спектрального сдвига, также подходит и для энергий в области дискретного спектра, где $\Delta(E) = \rho_d(E)$.

Таким образом, ФСС может быть определена как интеграл от функции $\Delta(E)$, включающий область дискретного спектра:

$$\xi(E) = - \int_{-\infty}^E dE' \Delta(E'). \quad (3.15)$$

3.4.2. ФСС для квазинепрерывного спектра

Заметим, что, если в условии квазинепрерывности (3.4) свободные энергии точно лежат на некоторой непрерывной кривой, т.е. $E_j^{0(\alpha)} = \lambda(j\alpha)$ и поправка $O(\alpha)$ отсутствует, правая часть уравнения (3.5) сводится к первым слагаемым в разложении в ряд Тейлора для функции $\lambda(u)$ в точке $j\alpha$:

$$E_j^{(\alpha)} \approx E_j^{0(\alpha)} + \alpha \frac{d\lambda}{du} \Big|_{u=u_j} \xi_j = \lambda(u_j) + \alpha \frac{d\lambda}{du} \Big|_{u=u_j} \xi_j, \quad u_j = j\alpha.$$

Получается, что квазинепрерывный спектр полного гамильтониана $h^{(\alpha)}$ приближенно определяется той же функцией $\lambda(u)$, что и спектр невозмущенного гамильтониана $h_0^{(\alpha)}$, но со “сдвинутым” аргументом:

$$E^{(\alpha)}(u_j) \approx \lambda(u_j + \alpha \xi_j) = \lambda(\alpha[j + \xi_j]), \quad u_j = j\alpha. \quad (3.16)$$

Таким образом, ξ_j — это сдвиг целочисленного индекса j , который переводит собственное значение свободного гамильтониана в собственное значение полного гамильтониана при движении вдоль одной и той же функции $\lambda(u)$. Ниже будет показано, что такая трактовка согласуется с определением ФСС через интеграл от функции $\Delta(E)$.

Для операторов h_0 и h с дискретизованным спектром можно явно определить спектральные плотности в виде дискретных сумм $\bar{\rho}_{0d}(E) = \sum_{j=1}^N \delta(E - E_j^0)$ и $\bar{\rho}_d(E) = \sum_{j=1}^N \delta(E - E_j)$. Таким образом, здесь можно определить отдельные интегральные плотности состояний для h_0 и h как интегралы до энергии E от спектральных плотностей:

$$J_0(E) = \int_{-\infty}^E \bar{\rho}_{0d}(E') dE', \quad J(E) = \int_{-\infty}^E \bar{\rho}_d(E') dE'. \quad (3.17)$$

В результате интегрирования получаются ступенчатые функции, которые удовлетворяют условиям $J(E_j) = j$ и $J_0(E_j^0) = j$.

Однако в случае квазинепрерывного спектра есть возможность определить интегральные плотности для семейства $h_0^{(\alpha)}$ как непрерывные гладкие функции $X_0^{(\alpha)}(E)$, используя функцию $\lambda^{-1}(E) \equiv u$, обратную к функции $\lambda(u)$ из уравнения (3.4):

$$\alpha X_0^{(\alpha)}(E) = \lambda^{-1}(E). \quad (3.18)$$

Эти функции совпадают со ступенчатыми функциями J_0 при энергиях, равных собственным значениям невозмущенного гамильтониана $h_0^{(\alpha)}$, т.е. $X_0^{(\alpha)}(E_j^0) = J_0(E_j^0) = j$.

В качестве иллюстрации на Рис. 3.2 приводятся ступенчатая функция $J_0(E)$ и гладкая функция $X_0(E)$ для случая рассеяния в сферической полости радиуса a (см. следующий раздел).

Аналогичным образом можно определить гладкие интегральные плотности $X^{(\alpha)}(E)$ для семейства полных гамильтонианов $h^{(\alpha)}$.

Теперь, используя соотношение (3.15), определим непрерывную функцию спектрального сдвига $\xi^{(\alpha)}(E)$ как разность интегральных плотностей X :

$$\xi^{(\alpha)}(E) = -(X^{(\alpha)}(E) - X_0^{(\alpha)}(E)). \quad (3.19)$$

Фактически это соотношение представляет собой уравнение (3.16), но в обратной форме, т.е. равенство составлено для аргументов функции λ , $\xi^{(\alpha)}(E) + X^{(\alpha)}(E) = X_0^{(\alpha)}(E)$. Здесь функции X и X_0 представляют непрерывное обобщение индексов j для собственных значений полного и невозмущенного гамильтониана.

Таким образом, получилось, что для случая квазинепрерывного спектра можно определить гладкие интегральные плотности $X(E)$ и $X_0(E)$, а также и фазовый сдвиг через их разность:

$$\delta^{(\alpha)}(E) = \pi(X^{(\alpha)}(E) - X_0^{(\alpha)}(E)). \quad (3.20)$$

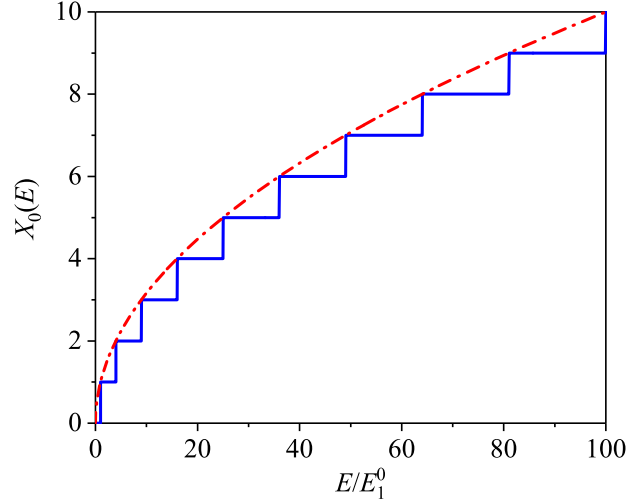


Рисунок 3.2. Ступенчатая функция $J_0(E)$ (сплошная кривая) и гладкая функция $X_0(E)$ (штрих пунктирная кривая) для задачи в сферической полости. Энергия приводится в отношении к первому собственному значению E_1^0 (см. уравнение (3.23)).

Здесь верхний индекс α показывает, что определенный таким образом фазовый сдвиг является приближением для точного фазового сдвига, отвечающего исходной задаче с гамильтонианами h и h_0 , имеющими непрерывный спектр.

Из полученных гладких интегральных плотностей $X_0^{(\alpha)}(E)$ и $X^{(\alpha)}(E)$ можно теперь определить спектральные плотности отдельно для возмущенного и невозмущенного гамильтонианов как соответствующие производные, а ПСК как их разность:

$$\rho_0^{(\alpha)}(E) \equiv \frac{dX_0^{(\alpha)}(E)}{dE}, \quad \rho^{(\alpha)}(E) \equiv \frac{dX^{(\alpha)}(E)}{dE}, \quad \Delta^{(\alpha)}(E) = \rho^{(\alpha)}(E) - \rho_0^{(\alpha)}(E). \quad (3.21)$$

Следует подчеркнуть, что пары функций $X_0^{(\alpha)}(E)$ и $X^{(\alpha)}(E)$, $\rho_0^{(\alpha)}(E)$ и $\rho^{(\alpha)}(E)$ не имеют предельных функций, когда α стремится к нулю. Их форма зависит от применяемого типа дискретизации континуума, в частности, от функции $\lambda(u)$. Это согласуется с тем, что для исходных гамильтонианов h и h_0 такие функции не существуют. Однако соответствующие разности, $\xi^{(\alpha)}(E)$ и $\Delta^{(\alpha)}(E)$, имеют пределы и должны сходиться к исходной ФСС и ПСК для пары операторов h и h_0 при $\alpha \rightarrow 0$.

Рассмотрим предложенную формулу для фазового сдвига (3.20) при энергиях, равных собственным значениям полного гамильтониана $E_j^{(\alpha)}$, для которых функция

$X^{(\alpha)}(E)$ известна явно и равна целому индексу:

$$\delta^{(\alpha)}(E_j) = j\pi - \pi X_0^{(\alpha)}(E_j), \quad j = n_b + 1, \dots, N, \quad (3.22)$$

здесь n_b — число возможных связанных состояний полного гамильтониана. Поскольку фазовый сдвиг определяется с точностью до целого числа π , получается интересный результат — для вычисления фазового сдвига достаточно знать спектральную функцию свободного гамильтониана X_0 в точках дискретизованного спектра полного гамильтониана h .

Ниже будет показано, как это свойство реализуется в двух известных подходах, где функция X_0 известна в явном виде.

3.4.3. Интегральная плотность для задачи рассеяния в ящике

Рассмотрим случай, когда система помещается в конечный объем (в сферическую полость) размера a . В качестве невозмущенного гамильтониана выступает оператор кинетической энергии $h_0 = T$ для определенного значения орбитального момента l и $h = h_0 + v$ — полный гамильтониан.

Случай нулевого орбитального момента

Для $l = 0$ собственные значения оператора кинетической энергии T находятся из условия на границе:

$$\sin(k_n^0 a) = 0 \Rightarrow k_n^0 = n \frac{\pi}{a}, \quad E_n^0 = \frac{1}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2, \quad n = 1, \dots, \quad (3.23)$$

где m — приведенная масса. Легко показать, что спектр (3.23) удовлетворяет условию квазинепрерывности (3.4), причем и малый параметр и сама функция λ известны: $\alpha = 1/a$, $\lambda(u) \sim u^2$.

Таким образом, интегральная плотность для невозмущенного гамильтониана пропорциональна квадратному корню из энергии:

$$X_0^{(a)}(E) = \frac{a}{\pi} \sqrt{2mE}. \quad (3.24)$$

Поэтому при собственных значениях полного гамильтониана $E = E_n$, согласно уравнению (3.20), парциальный фазовый сдвиг с точностью до целых значений π определяется соотношением:

$$\delta^{(a)}(E_n) = -a \sqrt{2mE_n}, \quad n = n_b + 1, \dots \quad (3.25)$$

Это приближение для точного фазового сдвига для исходной задачи с непрерывным спектром. Соотношение (3.25) можно найти явно из граничного условия для собственной функции полного гамильтониана:

$$\sin \left(a\sqrt{2mE_n} + \delta^{(a)}(E_n) \right) = 0. \quad (3.26)$$

Случай ненулевого орбитального момента

В случае, когда орбитальный момент l отличен от нуля, спектр оператора кинетической энергии определяется из условия:

$$j_l(k_{nl}^0 a) = 0, \quad E_{nl}^0 = \frac{(k_{nl}^0)^2}{2m}, \quad (3.27)$$

где $j_l(ka)$ — сферическая функция Бесселя.

Для того, чтобы найти функцию $X_0(E)$ явно, можно воспользоваться формализмом R -матрицы [11, 16]. Согласно этому формализму, парциальный фазовый сдвиг находится из разности:

$$\delta_l(E) = \eta_l(E) - \phi_l(E), \quad (3.28)$$

где первое слагаемое зависит от взаимодействия v и определяется через значение R -матрицы при данной энергии E , в то время как второе слагаемое не зависит от взаимодействия и представляет фазовый сдвиг рассеяния на твердой сфере [16]:

$$\phi_l(E) = \tan^{-1} \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}, \quad k = \sqrt{2mE}. \quad (3.29)$$

В уравнении (3.29), $n_l(z)$ — сферическая функция Неймана. Аргумент функции $\tan^{-1}$ обращается в ноль в точках E_{nl}^0 спектра невозмущенного гамильтониана $h_0^{(a)}$ благодаря условию (3.27), поэтому можно определить функцию $\tan^{-1}$ как монотонно возрастающую функцию, совпадающую с арктангенсом с точностью до π , умноженного на целое число.

Таким образом, интегральная плотность невозмущенного квазинепрерывного спектра будет пропорциональна фазовому сдвигу рассеяния на твердой сфере ϕ_l :

$$X_{0l}^{(a)}(E) = \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}, \quad k = \sqrt{2mE}. \quad (3.30)$$

Для $l = 0$ это выражение сводится к формуле (3.24).

Теперь получается, что первое слагаемое в уравнении (3.28) должно соответствовать интегральной плотности $X_l(E)$ для квазинепрерывного спектра полного гамильтониана h . Эта фаза определяется через значения R -матрицы $R_l(E)$, проницаемости $P_l(E)$ и функции сдвига $S_l(E)$ следующим образом [16]:

$$\eta_l(E) = \tan^{-1} \left(\frac{R_l(E)P_l(E)}{1 - R_l(E)S_l(E)} \right). \quad (3.31)$$

Собственные функции полного гамильтониана $h^{(a)}$ формируют базис, в котором R -матрица диагональна. Можно показать, что фазовый сдвиг η_l равен целому числу π при каждой энергии спектра полного гамильтониана E_{nl} . Здесь снова $\tan^{-1}$ определяется как монотонно возрастающая функция.

Таким образом, парциальные фазовые сдвиги (с точностью до целого числа π) в точках спектра полного гамильтониана E_{nl} определяются фазовым сдвигом для твердой сферы ϕ_l :

$$\delta^{(a)}(E_{nl}) = -\pi X_0^{(a)}(E_{nl}) = -\phi_l(E_{nl}). \quad (3.32)$$

Это соотношение известно в R -матричном формализме.

Рассеяние заряженных частиц

Аналогичные соотношения можно получить из R -матричного подхода в случае, когда невозмущенный гамильтониан включает кулоновское взаимодействие (отталкивание зарядов z_1 и z_2). $h_0 = T + z_1 z_2 e^2 / r$, и полный гамильтониан h отличается от невозмущенного h_0 короткодействующим взаимодействием v . В этом случае подход позволяет найти так называемый дополнительный фазовый сдвиг, отвечающий короткодействующей части взаимодействия.

Здесь весь формализм остается прежним, однако фазовый сдвиг для твердой сферы определяется с помощью регулярной и нерегулярной кулоновских функций $F_l(ka)$ и $G_l(ka)$ соответственно [16]. Поэтому фазовый сдвиг в точках дискретизованного спектра полного гамильтониана с точностью до целого числа π определяется следующим образом:

$$\delta^{(a)}(E_{nl}) = -\pi X_0^{(a)}(E_{nl}) = -\tan^{-1} \frac{F_l(k_n a)}{G_l(k_n a)}, \quad k_n = \sqrt{2mE_{nl}}. \quad (3.33)$$

3.4.4. J -матричный формализм

Соотношение, аналогичное (3.20), известно и эффективно используется в J -матричном подходе [32, 34]. Как уже упоминалось в главе 1, в этом подходе используются, как правило, осцилляторный базис (1.27) или биортогональный Лагерровский базис (1.28), в которых матрицы оператора кинетической энергии T и кулоновского гамильтониана имеют, соответственно, трехдиагональный вид, что позволяет решать задачу рассеяния на основе сшивки по номеру базисного состояния. При этом матрица потенциала ограничивается внутренним базисным пространством размерности N , а граничное условие формулируется по номерам базисных функций [31].

В работах [32, 34] было показано, что фазовый сдвиг при энергиях, равных собственным значениям матрицы полного гамильтониана во внутреннем пространстве, вычисляется по упрощенной формуле:

$$\delta(E_{nl}) = f_{Nl}(E_{nl}), \quad f_{Nl}(E) \equiv -\tan^{-1} \frac{S_{N+1,l}(E)}{C_{N+1,l}(E)}. \quad (3.34)$$

Здесь $S_{nl}(E)$ и $C_{nl}(E)$ — коэффициенты разложения для сферических функций Бесселя и Неймана $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$ в осцилляторном представлении (для оператора кинетической энергии) или коэффициенты разложения регулярной и нерегулярной кулоновских функций $F_l(kr)$ и $G_l(kr)$ по биортогональному базису Лагерра, если h_0 — кулоновский гамильтониан. По сути, формула (3.34) представляет J -матричный аналог формул (3.32) и (3.33) для R -матричного формализма. Функция $\tan^{-1}$ в определении $f_{Nl}(E)$ — это монотонная возрастающая функция (см. детали в работе [32]).

Получается, что функция $f_{Nl}(E)$ пропорциональна интегральной плотности для невозмущенного спектра в выбранном представлении:

$$X_0^{(N)}(E) = -\frac{1}{\pi} f_{Nl}(E). \quad (3.35)$$

Эта функция определяет фазовый сдвиг в точках спектра матрицы полного гамильтониана $E = E_{nl}$ именно потому, что интегральная плотность для полного гамильтониана $X(E)$ принимает целые значения в этих точках, а соответствующая фаза приобретает слагаемые, кратные π (см. уравнение (3.22)).

Сама функция $X(E)$ также может быть определена при всех энергиях так же как в уравнении (3.31). Здесь она будет определяться при помощи элементов матрицы G , зависящей от взаимодействия.

Упрощенная формула для парциального фазового сдвига (3.34) составляет основу для метода SS-HORSE¹³, который используется для нахождения резонансов в малочастичных системах. В частности, на основе этого метода изучался вопрос о существовании тетранейтрона [33].

3.4.5. Вычисление фазового сдвига через линейную аппроксимацию для интегральной плотности

Воспользуемся теперь представлением для ФСС через разность интегральных плотностей (3.19) в общем случае, когда функция X_0 не известна аналитически. Воспользуемся уравнением для фазового сдвига (3.22) и разложим в его правой части функцию $X_0(E)$ в ряд Тейлора в точке невозмущенного спектра E_i^0 , ближайшей к энергии E_j полного гамильтониана. Оставляя первые два слагаемых ряда разложения, получаем:

$$\delta(E_j) \approx \pi \left(j - i - (E_j - E_i^0) \frac{\partial X_0}{\partial E} \Big|_{E=E_i^0} \right)$$

Далее производную функции $X_0(E)$ можно вычислить через производную обратной функции $E_0(X)$:

$$\frac{\partial X_0}{\partial E} \Big|_{E=E_i^0} = \frac{1}{\partial E / \partial X_0} \Big|_{E=E_i^0} \approx 1/D_i,$$

где D_i — это шаг квазинепрерывности из уравнения (3.4а). Здесь использовано то, что X — это “непрерывный индекс”, равный целому значению i в точке дискретизованного спектра E_i^0 .

В результате получается следующее приближение для фазового сдвига:

$$\delta^{(\alpha)}(E_j) \approx \pi \frac{E_i^0 - E_j}{D_i} + (j - i)\pi. \quad (3.36)$$

Хотя эта формула очень похожа на приведенную выше формулу (3.7), она имеет немного другой смысл. В выражение (3.7) входят собственные функции гамильтонианов h_0 и h с одним и тем же индексом, в то время как в уравнении (3.36) стоят просто два ближайших друг к другу собственных значения этих операторов, а соответствующее “расхождение” индексов компенсируется слагаемым $(j - i)\pi$.

Отличия в результатах будут видны в случае, когда фаза превышает π (или меньше $-\pi$), т.е. в системе есть связанные состояния или, наоборот, есть сильное

¹³ Single-state harmonic oscillator representation of scattering equations.

отталкивание (пример такого потенциала будет рассмотрен ниже). Численно эти отличия связаны с разными значениями шагов дискретизации D_i . В целом эти отличия должны пропадать при увеличении размерности базиса и уменьшении D_i . Однако при небольших размерностях базиса выражение (3.36) должно давать более точные результаты, поскольку в нем берутся ближайшие друг другу собственные значения полного и свободного гамильтонианов. Следует отметить, что, если фаза меняется в интервале меньшем, чем π , обе формулы приводят к одинаковым выражениям.

3.5. Вычисление ФСС в гауссовом базисе

Базис, состоящий из гауссиан, очень удобен для расчетов в системе нескольких тел, поскольку переходы между базисными функциями, определенными для различных наборов координат Якоби, задаются аналитически [136]. Однако использование таких базисов для решения задач рассеяния сопряжено с определенными трудностями. В частности, такие базисы неминимальны, поскольку базисные функции не ортогональны друг другу. Это приводит к численным неустойчивостям при достаточно небольших размерностях базиса. Вторая проблема состоит в том, что базисные функции не очень подходят для воспроизведения сильно осциллирующих волновых функций, таких как высоковозбужденные связанные состояния или состояния континуума, отвечающие высоким импульсам. Для того, чтобы обойти эти трудности вводят некоторые модификации базиса, такие как уже упоминавшийся ранее базис комплексных гауссоид (см. работы [94, 136]). Ниже будет показано, однако, как можно использовать дискретизованные спектры полного и невозмущенного гамильтонианов в обычном гауссовом базисе для достаточно аккуратного вычисления фазовых сдвигов.

3.5.1. Гауссов базис на сетке Чебышева

Рассмотрим набор гауссиан (Б.1), масштабные параметры β_j которого определены на следующей сетке Чебышева, немного отличающейся от (Б.2):

$$\beta_j = g_N(j), \quad g_N(j) = \beta_0 \left[\tan \left(\frac{j}{N+1} \frac{\pi}{2} \right) \right]^t, \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.37)$$

Спектр матрицы гамильтониана в таком базисе определяется из обобщенной задачи (Б.3) на собственные значения (см. Приложение Б).

Обратимся сначала к вопросу, являются ли спектры, полученные в результате диагонализации матрицы невозмущенного гамильтониана, квазинепрерывными. Полностью удовлетворить условию квазинепрерывности здесь не получится, поскольку размерность базиса меняется. Однако можно говорить о квазинепрерывности в некоторой области спектра (причем достаточно большой). Разумно предположить, что малый параметр здесь должен быть пропорционален $(N + 1)^{-1}$ аналогично малости, возникающей в сетке для масштабных параметров β_j в уравнении (3.37). Спектры свободного гамильтониана для различных размерностей базисов с $t = 1$ и $t = 3$ показаны на Рис. 3.3 как функции общей переменной $u = j\alpha$. Оказалось, что параметры β_0 должны также уменьшаться с увеличением N обратно пропорционально $(N + 2)$, для того, чтобы точки ложились на общую зависимость. При таком подборе параметров собственные значения для базисов различной размерности при одном и том же значении t практически принадлежат одной общей функции $\lambda(u)$ (за исключением пары собственных значений в начале каждого набора).

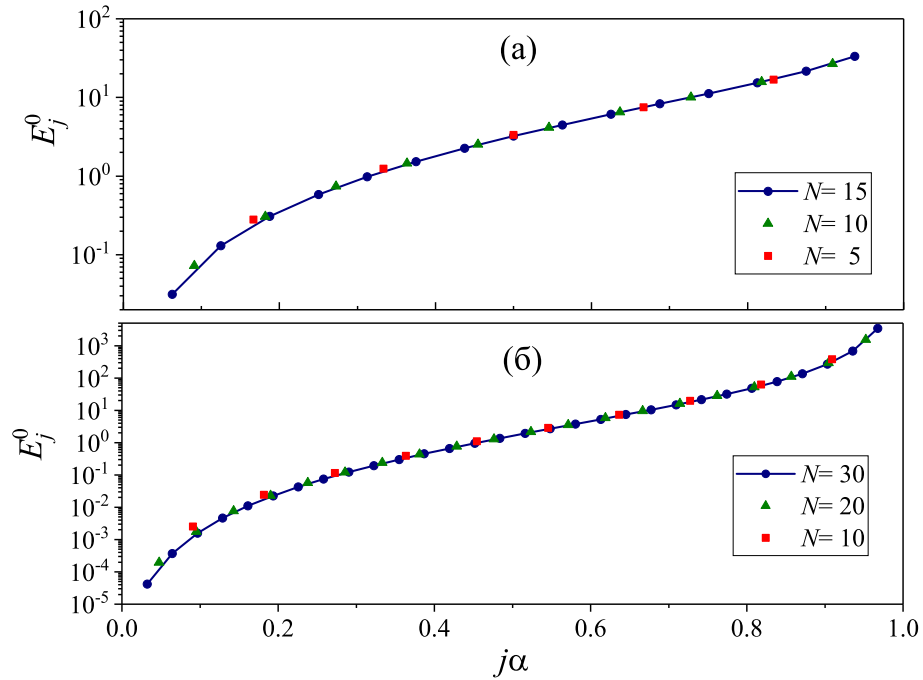


Рисунок 3.3. Зависимость собственных значений E_j^0 (в относительных единицах) невозмущенного гамильтониана для гауссовых базисов различной размерности N при $t = 1$ (а) и $t = 3$ (б) от переменной $j\alpha$. Здесь $\alpha = (N + 1)^{-1}$.

Таким образом, хотя условие квазинепрерывности (ii) не может быть строго выполнено из-за изменения размерности базиса N , собственные значения

удовлетворяют некоторой общей функциональной зависимости, а значит, гладкие функции X и X_0 здесь можно определить, при этом можно ожидать сходимости их разности к ФСС при увеличении размерности базиса N .

При $t = 1$ базис становится неустойчивым уже при относительно небольшой размерности $N \sim 18$, что не позволяет получить достаточно точные результаты. При увеличении параметра t можно увеличить “предельную” размерность используемого базиса, однако дискретизованный спектр оказывается при этом достаточно разреженным. В результате линейная аппроксимация для фазы (3.36) не совсем применима. Ниже будет показано как обойти эту проблему и получить более плотный дискретизованный спектр, используя набор из нескольких базисов одной относительно небольшой размерности.

3.5.2. Набор гауссовых базисов

Рассмотрим набор сеток для масштабных параметров β_j , построенных на основе общего распределения (3.37):

$$\{\beta_j^m = g_N(j + a_m - 1), \quad j = 1, \dots, N\}_{m=1}^M, \quad (3.38)$$

где $\{a_m\}_{m=1}^M$ — набор параметров, расположенных в порядке возрастания и удовлетворяющих условию $0 < a_m \leq 1$. Используя такие наборы сеток β_j^m , можно построить M различных гауссовых базисов (для каждого значения m) одной размерности N . При этом параметры всех этих базисов задаются одной функцией с непрерывным аргументом x :

$$\beta(x) = g_N(x), \quad 0 < x \leq N. \quad (3.39)$$

Обозначим соответствующие собственные значения невозмущенного гамильтониана как E_j^{0m} (с дополнительным индексом m) и предположим, что они принадлежат одной общей функции $\lambda(x\alpha)$, как было в случае квазинепрерывного спектра, но теперь величины x не являются целыми, т.е.:

$$E_j^{0m} = \lambda(x\alpha), \quad x = j + a_m - 1. \quad (3.40)$$

Оказывается, что это свойство выполняется. На Рис. 3.4 показана иллюстрация к уравнению (3.40) для сетки размерности $N = 20$ при $t = 3$. Здесь взято эквидистантное

распределение для параметров a_m и $M = 5$. На рисунке дискретные собственные значения, отвечающие каждому из базисов (т.е. построенные на сетке с фиксированным m) показаны одинаковыми символами. Видно, что полный набор дискретных энергий укладывается на одну кривую $\lambda(u)$. Это свойство оказывается очень удобным для

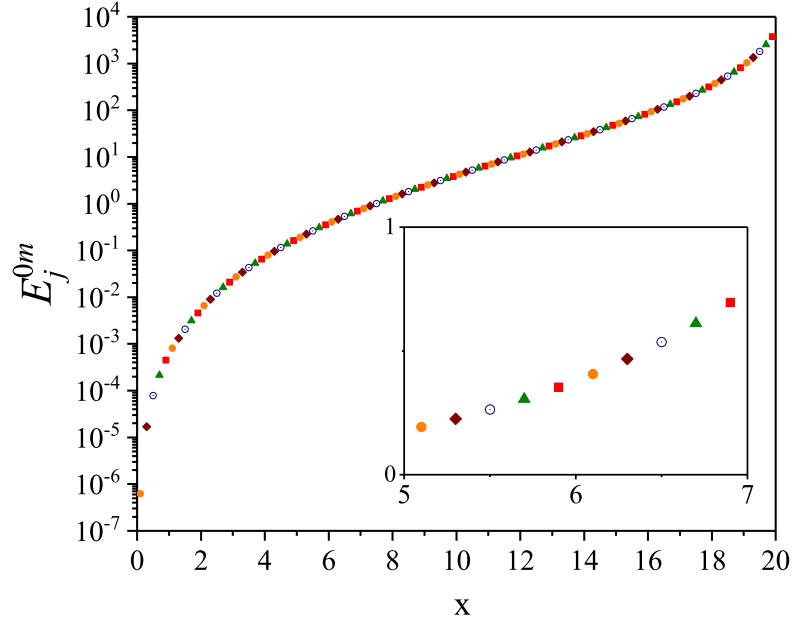


Рисунок 3.4. Зависимость собственных значений E_j^{0m} (в относительных единицах) от обобщенного индекса $x = j + a_m - 1$ для 5 разных наборов гауссовых базисов, построенных с использованием общего распределения. Небольшая панель показывает этот же рисунок для интервала $x \in [5, 7]$. Точки спектра для разных m показаны с помощью различных символов.

практических приложений, поскольку позволяет построить плотный дискретизованный спектр, используя M независимых расчетов при относительно небольших размерностях базиса N вместо того, чтобы увеличивать эту размерность. Здесь это свойство позволит восстановить функцию $X_0(E)$ во всех точках E_j^{0m} , принимая во внимание обобщенный индекс x в правой части уравнения (3.40).

На данном этапе исследований, у автора нет аккуратного обоснования такого свойства гауссовых базисов, построенных с помощью общей функции распределения параметров. По-видимому, такое поведение связано с существованием (не вполне очевидным) однозначного отображения между масштабными параметрами β_j и собственными значениями энергии E_j^0 . При этом относительно малый сдвиг a_m всех

масштабных параметров одновременно приводит к малым сдвигам энергий в ту же сторону. Так или иначе, это свойство требует прямой проверки перед расчетами. Для расчетов в этой работе это свойство было проверено для сеток с $t = 2$ и $t = 3$ и размерностью $N \geq 5$. Следует отметить, что аналогичный подход можно использовать для других базисов, если соответствующие дискретизованные спектры можно объединить в общую зависимость $E(x)$.

3.5.3. Вычисление интегральных плотностей и фазовых сдвигов

Используя соотношение (3.40), можно объединить все собственные значения в один набор $\{\{E_j^{0m}\}_{m=1}^M\}_{j=1}^N$. Интегральная плотность состояний может быть определена теперь как обратная функция $\lambda(u)$ на основе (3.18) и (3.40):

$$X_0^{(N)}(E_j^{0m}) = j + a_m - 1, \quad m = 1, \dots, M, \quad j = 1, \dots, N, . \quad (3.41)$$

На Рис. 3.5 показана такая функция $X_0(E)$, восстановленная с помощью уравнения (3.41) на основе 20 базисов ($M = 20$) с $t = 3$ и $N = 20$. Таким образом, полное число точек составляет $N \times M = 400$.

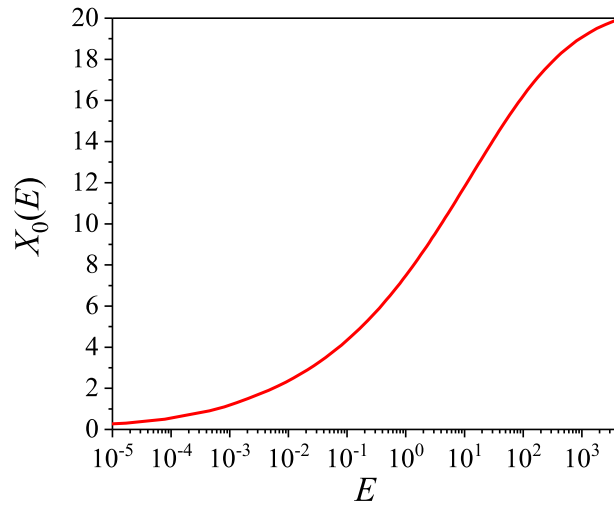


Рисунок 3.5. Интегральная спектральная плотность для свободного гамильтониана, найденная на основе диагонализации его матрицы в 20 базисах гауссиан. Энергия приводится в относительных единицах.

Из Рисс. 3.4 и 3.5 видно, что дискретные спектры свободных гамильтонианов, найденные в нескольких базисах гауссоид, построенных с помощью общего

распределения, соответствуют одной функции $X_0(E)$. Это численный аналог аналитических функций (3.30) и (3.35) для R -матричного и J -матричного подходов.

Повторим теперь эту процедуру диагонализации для полного гамильтониана h и обозначим соответствующие собственные значения как $\{E_k^m, \quad m = 1, \dots, M\}_{k=1}^N$. Далее можно восстановить функцию $X(E)$ при нецелых индексах:

$$X^{(N)}(E_k^m) = k + a_m - 1, \quad m = 1, \dots, M, \quad k = 1, \dots, N. \quad (3.42)$$

Теперь фазовые сдвиги при произвольной энергии E могут быть найдены из разности функций X и X_0 по формуле (3.20). При этом вместо уравнения (3.22) получается следующее соотношение:

$$\delta^{(N)}(E_k^m) = \pi \left[k + a_m - 1 - X_0^{(N)}(E_k^m) \right], \quad 1 \leq m \leq M, \quad n_b < k \leq N. \quad (3.43)$$

Фактически это соотношение является обобщением уравнения (3.22), позволяющего определить фазу в точках возмущенного спектра. Однако количество π в первом слагаемом (3.43) теперь не является целым.

Если теперь в соотношении (3.36) воспользоваться линейным разложением функции X_0 возле точки E_j^{0n} , ближайшей к E_k^m , то получится следующая формула:

$$\delta^{(N)}(E_k^m) \approx \pi (k + a_m - j - a_n) + \pi \frac{E_j^{0n} - E_k^m}{D_j^n}, \quad (3.44)$$

где $D_j^n = dE_0(x)/dx|_{x=j+a_n-1}$ — производная от функции $E_0(x)$ для свободного спектра, для вычисления которой можно использовать соответствующие ближайшие собственные значения комбинированного спектра свободного гамильтониана.

Следует отметить, что, поскольку такой метод позволяет получить значения фазового сдвига на достаточно плотной сетке энергий, можно построить также и производную от фазового сдвига или ПСК $\Delta(E)$ на основе прямого численного дифференцирования.

3.5.4. Фазовые сдвиги для модельного потенциала

В качестве примера рассмотрим потенциал, предложенный в работе [34], который моделирует взаимодействие в задачах атомной физики:

$$V(r) = -8 \exp(-0.16r^2) + 4 \exp(-0.04r^2), \quad (3.45)$$

где все величины берутся в атомных единицах. В рассматриваемом примере невозмущенный гамильтониан h_0 — это оператор кинетической энергии, и орбитальный момент $l = 0$.

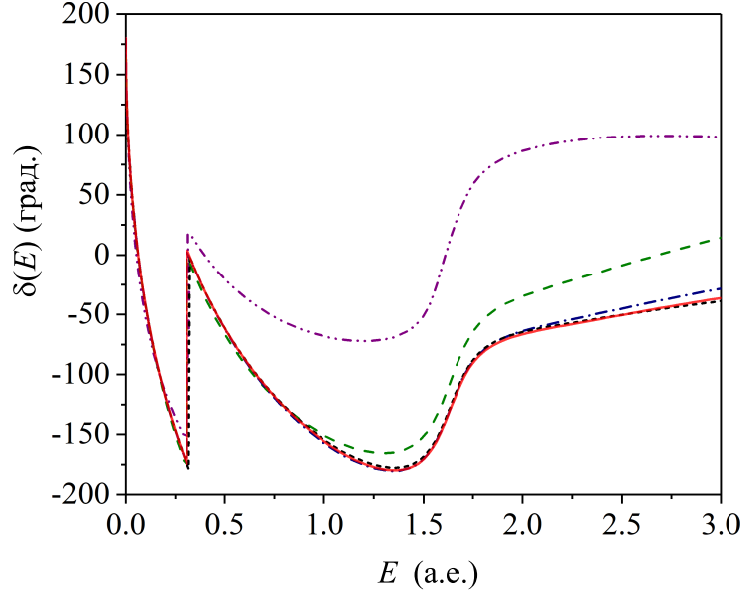


Рисунок 3.6. Парциальные фазовые сдвиги для потенциала (3.45), найденные из собственных значений свободного и полного гамильтонианов в гауссовых базисах различной размерности: $N = 10$ (штрих-пунктир-пунктирная кривая), $N = 20$ (штриховая кривая), $N = 30$ (штрих-пунктирная кривая) и $N = 35$ (сплошная кривая). Результаты, полученные из численного решения уравнения Шредингера, показаны черной кривой с короткими штрихами.

Для практических расчетов здесь использовались гауссовы базисы, построенные на сетке Чебышева (3.37) с $t = 3$ и с равномерно распределенными a_m при $M = 20$. Парциальные фазовые сдвиги, найденные на основе предложенного подхода, показаны на Рис. 3.6 в сравнении с результатами, полученными из численного решения уравнения Шредингера для той же задачи, которые здесь будем считать “точными”¹⁴. Видна сходимость результатов к “точным” с увеличением размерности базиса до $N = 35$, несмотря на достаточно сложный вид спектра, в котором есть связанное состояние и два резонанса. Предложенная процедура, включающая M диагонализаций свободного и полного гамильтонианов, позволяет найти фазовые сдвиги в довольно широком диапазоне энергий. Однако при более высоких энергиях такого базиса становится не

¹⁴ Численное решение уравнения Шредингера получено В.Н. Померанцевым [139].

достаточно для аккуратного воспроизведения фазового сдвига. Возможная причина такого расхождения состоит в том, что соответствующий импульс $p = \sqrt{2E}$ становится большим, и гауссианы с выбранными параметрами β_j не воспроизводят осциллирующие состояния рассеяния в области взаимодействия.

Посмотрим, как влияет наличие резонансов на поведение интегральной спектральной плотности $X(E)$. На Рис. 3.7а и б приведены функции $E(x)$ и $X(E)$ для полного гамильтониана для $N = 30$ и $M = 20$. Интересно, что присутствие резонансов в спектре приводит к поведению функции $E(x)$, очень похожему на наблюдаемое в стабилизационном подходе Хази и Тейлора [114], когда зависимость энергии уровня от размерности базиса имеет характерное плато в области резонанса. Таким образом,

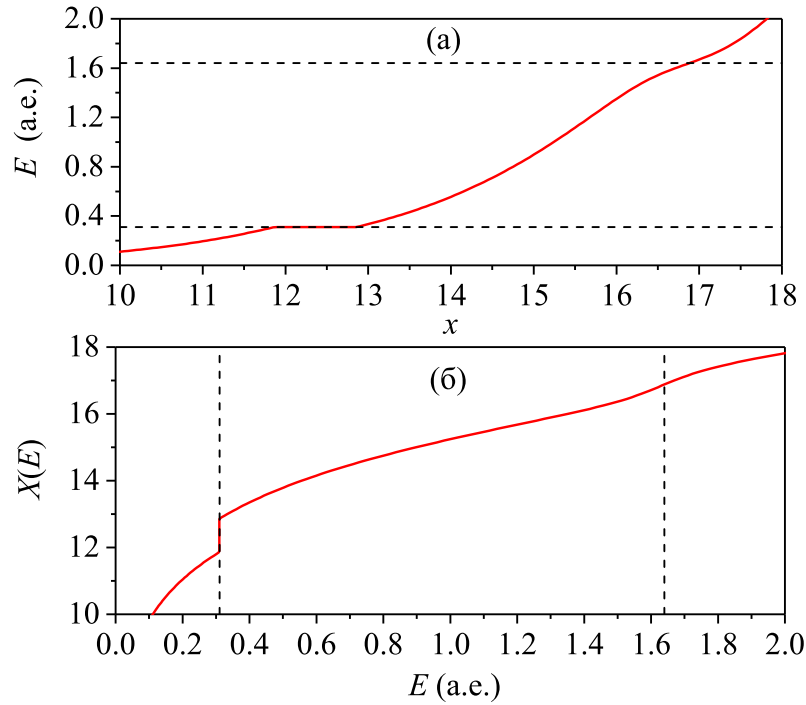


Рисунок 3.7. Спектральное распределение $E(x)$ (а) и интегральная плотность $X(E)$ (б) для квазинепрерывного спектра полного гамильтониана, найденные в гауссовом базисе для потенциала (3.45). Штриховые линии соответствуют резонансным энергиям E_R .

комбинирование наборов гауссиан приводит к тому же эффекту, что и увеличение размерности базиса в стабилизационном подходе.

На Рис. 3.8 приводится плотность состояний континуума, построенная из численной производной фазового сдвига. Видно, что базисы достаточно малой размерности позволяют воспроизвести верное резонансное поведение. При этом

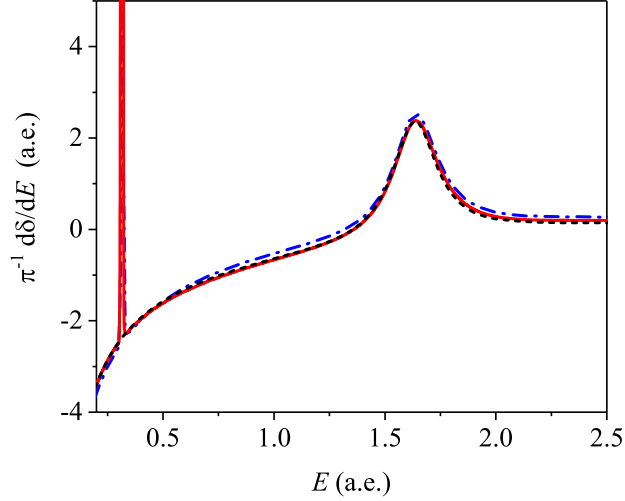


Рисунок 3.8. Плотность состояний континуума для потенциала (3.45), найденная из собственных значений свободного и полного гамильтонианов в гауссовых базисах различной размерности: $N = 20$ (штрих-пунктирная кривая), $N = 30$ (сплошная кривая). Штриховая кривая соответствует производной от фазовых сдвигов, полученных из решения уравнения Шредингера.

максимум ПСК соответствует резонансной энергии E_R , в то время как ширина резонанса Γ может быть найдена из соотношения¹⁵ [115, 137]:

$$\left. \frac{d\delta(E)}{dE} \right|_{E=E_R} = \frac{2}{\Gamma}. \quad (3.46)$$

Таким образом, для второго резонанса получаются следующие значения $E_R = 1.64$ а.е. и $\Gamma = 0.27$ а.е, которые хорошо согласуются с положением резонанса в комплексной плоскости $E = 1.632 - i0.123$ а.е., найденным в работе [34].

Для узкого резонанса производная фазового сдвига определяется в основном быстро меняющейся функцией $X(E)$ согласно (3.21). Поэтому параметры такого резонанса можно найти из минимума производной функции $E(x)$. Действительно, для узкого резонанса получаем $d\delta(E)/dE \approx 1/\pi [dE(x)/dx]^{-1}$, что приводит к приближению:

$$\min \frac{dE(x)}{dx} \approx \frac{\pi\Gamma}{2}, \quad (3.47)$$

где резонансная энергия $E_R = E(x_R)$ определяется как энергия в точке минимума x_R производной dE/dx .

¹⁵ Эти параметры резонансов соответствуют параметризации Брейта–Вигнера для фазового сдвига.

На Рис. 3.9 приведены численные производные функций $E(x)$ для $N = 25$ и $N = 35$. Здесь положения минимумов x_R зависят от размерности базиса, поскольку значение

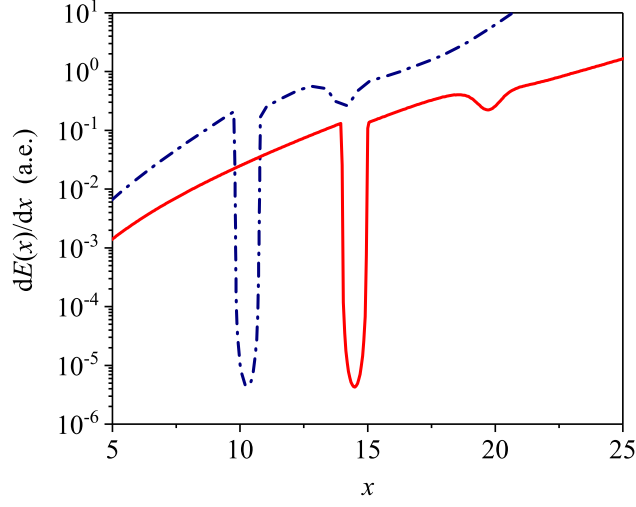


Рисунок 3.9. Производные спектрального распределения $E(x)$ как функции непрерывного индекса x , полученные в гауссовых базисах различной размерности: $N = 25$ (штрих-пунктирная кривая), $N = 35$ (сплошная кривая).

x связано с индексом резонансного состояния, который сдвигается при увеличении размерности. Однако значения производных dE/dx в точках минимума очень близки друг к другу. Полученные параметры резонанса следующие: $E_R = 0.31009$ а.е. и $\Gamma = 2.74 \cdot 10^{-6}$ а.е.

3.5.5. Рассеяние протонов на ядре ^{12}C

В качестве второй иллюстрации рассмотрим пример из ядерной физики, в котором также учитывается кулоновское взаимодействие: рассеяние протона p на ядре ^{12}C [16]. Здесь невозмущенный гамильтониан h_0 включает оператор кинетической энергии T и кулоновское отталкивание:

$$h_0 = T + \frac{6e^2}{r} \quad (3.48)$$

короткодействующая часть взаимодействия берется в простой гауссовой форме:

$$V(r) = V_0 \exp(-(r/r_0)^2), \quad (3.49)$$

где $V_0 = -73.8$ МэВ, $r_0 = 2.70$ Фм и используются следующие значения констант: $\hbar^2/m_N = 41.472$ МэВ Фм² (где m_N — масса нуклона), $e^2 = 1.44$ МэВ·Фм и приведенная

масса определяется как $m = 12/13m_N$.

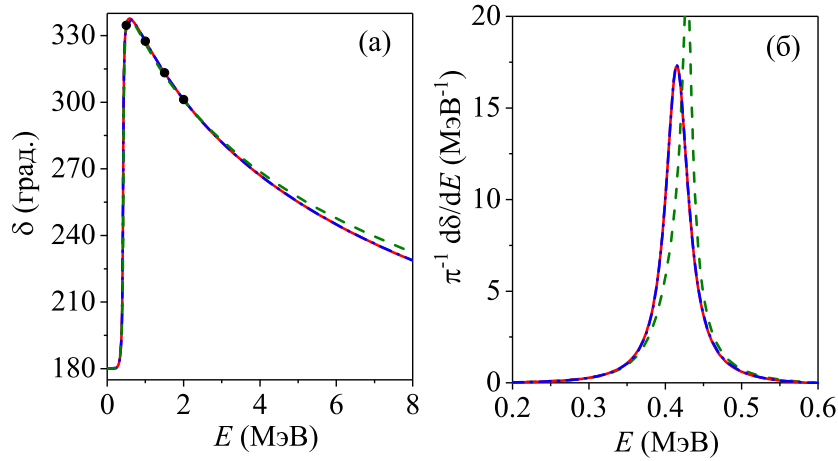


Рисунок 3.10. S -волновые парциальные фазовые сдвиги (а) и ПСК (б) p - ^{12}C рассеяния, найденные из собственных значений кулоновского и полного гамильтонианов в гауссовом базисе различной размерности: $N = 10$ (штриховая кривая), $N = 20$ (штрих-пунктирная кривая) и $N = 30$ (сплошная кривая). Две последние кривые визуальнo неотличимы на рисунках. Результаты работы [16] для того же потенциала показаны кружками на панели (а).

Соответствующие S -волновые парциальные фазовые сдвиги показаны на Рис. 3.10а в сравнении с результатами работы [16] для той же системы. Следует отметить, что у полного гамильтониана с потенциалом (3.49) есть одно запрещенное связанное состояние, что приводит к поднятию фазы на π при нулевой энергии в соответствии с теоремой Левинсона. Соответствующая функция $X(E)$ и полученная в методе ДСС фаза учитывают это свойство, как видно из рисунка. Поэтому данные из работы [16] сдвинуты на 180 градусов выше.

Как видно, в этом случае базис небольшой размерности $N = 20$ позволяет воспроизвести очень хорошо фазовые сдвиги. На Рис. 3.10б приводятся производные от фазового сдвига, позволяющие определить положение резонанса $E_R = 0.415$ МэВ и его ширину $\Gamma = 37$ кэВ, которые согласуются с результатами из работы [16].

3.6. Многоканальная задача

Решение многоканальной задачи на основе интегрального формализма уже было рассмотрено в главе 2. Многоканальный гамильтониан системы можно записать в виде

(2.68). Повторим эту формулу здесь для удобства:

$$h_{\nu\nu'} = h_{0\nu}\delta_{\nu\nu'} + v_{\nu\nu'}, \quad \nu, \nu' = 1, \dots, K,$$

где $h_{0\nu}$ — невозмущенные гамильтонианы каналов, имеющие простой непрерывный спектр в областях $[\Omega_\nu, \infty)$, Ω_ν — порог в канале ν и $v_{\nu\nu'}$ — потенциалы связи каналов. В дальнейшем будем использовать также представление собственных каналов, в котором S -матрица диагональна. Собственные каналы будем обозначать индексом $\varkappa$.

3.6.1. Дискретизованный вырожденный спектр

При обобщении дискретного формализма ФСС на многоканальный случай возникают две проблемы.

Первая состоит в том, что в строгой теории функции спектрального сдвига в многоканальном случае с помощью формулы Бирмана–Крейна (3.2) можно определить только одну ФСС, которая в данном случае будет суммой всех собственных фаз $\delta^{(\varkappa)}(E)$:

$$\xi(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\varkappa}^K \delta^{(\varkappa)}(E), \quad (3.50)$$

где K — число собственных каналов $\varkappa$, открытых при данной энергии. При этом отдельные собственные фазовые сдвиги, не говоря уже о полной S -матрице, определить нельзя.

Здесь следует напомнить, что собственные фазы связаны с определением S -матрицы в представлении собственных каналов [140–142], в котором она диагональна. Более подробно этот вопрос будет рассмотрен в подразделе 3.6.3, посвященном многоканальным псевдосостояниям.

Вторая проблема связана с использованием L_2 дискретизации. Дело в том, что при одной энергии в многоканальном случае существует несколько решений задачи рассеяния, отвечающих различным граничным условиям, т.е. непрерывный спектр вырожден. В дискретизованном представлении спектр, вообще говоря, уже не вырожден, и все псевдосостояния полного гамильтониана имеют различные энергии, поэтому невозможно их сопоставить с точными функциями рассеяния в различных каналах. Для решения этой проблемы в L_2 представлении приходится добавлять к гамильтониану специальные операторы граничных условий, либо проводить сшивку состояний с асимптотическими функциями в различных каналах [138].

Обе проблемы связаны с вырожденностью спектра. В работах автора [76, 78] было показано, как найти решение для этих проблем. Необходимо, чтобы дискретизованный спектр невозмущенного многоканального гамильтониана был вырожден с той же кратностью вырождения, что и исходный непрерывный спектр. Тогда добавление взаимодействия (возмущения) приведет к снятию такого вырождения, и спектр полного гамильтониана будет состоять из серий уровней, представляющих как бы расщепление вырожденного уровня невозмущенного спектра.

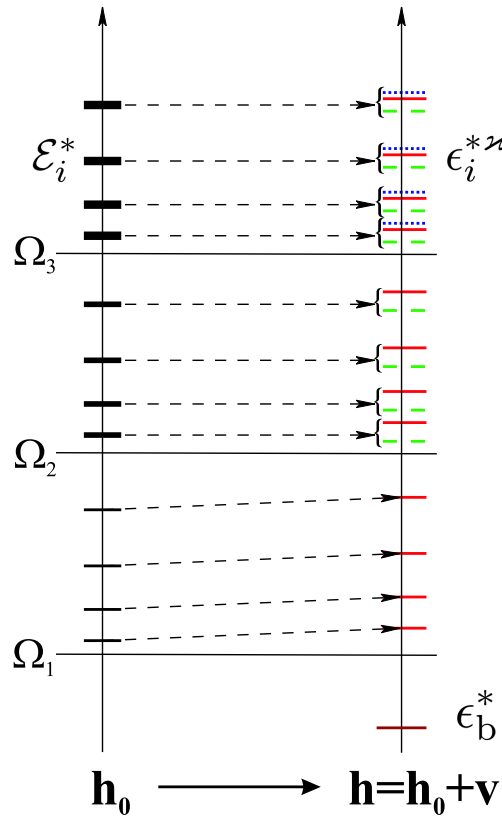


Рисунок 3.11. Схема уровней невозмущенного и полного гамильтонианов для многоканальной задачи с различными порогами Ω_d . После добавления взаимодействия v каждое вырожденное собственное значение $\mathcal{E}_j^*$ кратности d расщепляется на d собственных значений ϵ_j^{*z} в области $\Omega_d < E < \Omega_{d+1}$. ϵ_b^* — изолированное собственное значение, отвечающее связанному состоянию.

Поясним это утверждение с помощью Рис. 3.11. Слева на нем изображен дискретизованный спектр свободного многоканального гамильтониана $\mathbf{h}_0$ с тремя порогами Ω_d ($d = 1, 2, 3$). В каждой области между порогами степень вырождения непрерывного спектра будет постоянна и равна d . Дискретизованный спектр $\mathbf{h}_0$ обозначен горизонтальными линиями, толщина которых зависит от степени вырождения этих уровней. Так, выше порога Ω_1 спектр простой, выше Ω_2 каждый

уровень двукратно вырожден, выше Ω_3 — кратность вырождения уровней уже равна трем. Теперь, если добавить к невозмущенному гамильтониану взаимодействие $\mathbf{v}$, которое будет включать связь каналов, то получим полный гамильтониан $\mathbf{h}$, спектр которого представлен в правой части Рис. 3.11. Из-за добавления взаимодействия, спектр $\mathbf{h}$ уже не является вырожденным. Уровни невозмущенного гамильтониана расщепились на серии, состоящие из нескольких подуровней. Причем просматривается четкая структура этих серий, при которой порядок следования расщепившихся состояний (они обозначены различными линиями: сплошной, точечной и штриховой) сохраняется. Таким образом, хотя спектр полного гамильтониана не является вырожденным, в нем можно выделить отдельные ветви, которые получаются из объединения соответствующих подуровней из каждой серии. Так, на Рис. 3.11 можно выделить три ветви в спектре полного гамильтониана: первая задается уровнями из сплошных линий, вторая — уровнями из штриховых, а третья — уровнями из точечных. Заметим также, что в спектре полного гамильтониана могут быть также связанные состояния, которые, согласно терминологии [127, 128], считаются отщепившимися от общего квазинепрерывного спектра.

После того, как ветви дискретизованного спектра удалось разделить, можно определить спектральные сдвиги внутри каждой серии уровней $\epsilon_j^{*(\kappa)}$ относительно невозмущенного вырожденного уровня $\mathcal{E}_j^*$ и далее ввести серию функций спектрального сдвига вместо единственной:

$$\xi^{(\kappa)}(E) \approx -\frac{\epsilon_j^{*(\kappa)} - \mathcal{E}_j^*}{D_j}, \quad \kappa = 1, \dots, d, \quad (3.51)$$

где ϵ_j^* — собственные значения полного гамильтониана, $\mathcal{E}_j^*$ — собственные энергии многоканального базиса для невозмущенного гамильтониана $\mathbf{h}_0$, d — степень вырождения спектра при данной энергии (количество открытых каналов), а κ нумерует ветви спектра.

Теперь, имея набор функций спектрального сдвига для многоканального спектра, можно обобщить формулу Бирмана–Крейна (3.3) и связать ФСС с собственными фазовыми сдвигами, для которых получаются совсем простые выражения:

$$\delta^{(\kappa)}(E) \approx -\pi \frac{\epsilon_j^{*(\kappa)} - \mathcal{E}_j^*}{D_j}, \quad \kappa = 1, \dots, d. \quad (3.52)$$

Следует отметить, что такое обобщение возможно благодаря очень важному свойству вырожденного дискретизованного спектра [127]: при добавлении взаимодействия и

расщеплении вырожденных уровней получившиеся уровни образуют перемежающиеся последовательности, т.е. серии расщепившихся уровней не смешиваются друг с другом (они разнесены по энергии), причем порядок следования уровней внутри каждой серии сохраняется. Это свойство верно, вообще говоря, для операторов взаимодействия (возмущений) конечного ранга [127]. В более общем случае нужно исследовать условия, которым должно удовлетворять возмущение v . Заметим, однако, что в методе, рассматриваемом здесь, оператор v заменяется его аппроксимацией в конечном базисе, т.е. мы всегда фактически имеем дело с конечномерным взаимодействием.

3.6.2. Многоканальный базис стационарных волновых пакетов

Если теперь задаться вопросом, как на практике построить такой базис для невозмущенного многоканального гамильтониана, чтобы он воспроизводил вырожденный дискретизованный спектр, то здесь очень удобным оказывается базис стационарных волновых пакетов, определенный в главе 2, поскольку параметры разбиения спектра для него выбираются произвольным образом. В разделе 2.8.1 уже дано краткое описание процедуры построения такого многоканального базиса с вырожденным спектром. Опишем здесь такую процедуру подробнее, немного изменив обозначения и нумерацию интервалов.

Представим полный многоканальный континуум как объединение K областей между порогами $Q_d = [\Omega_d, \Omega_{d+1}]$ ($d = 1, \dots, K$). Как уже упоминалось выше, в каждой такой области степень вырождения спектра будет постоянна и равна d .

Разделим далее каждую область Q_d на конечное число непересекающихся интервалов $\mathfrak{D}_i^d = [\mathcal{E}_{i-1}^d, \mathcal{E}_i^d]_{i=1}^{N_d}$ с ширинами $D_i^d \equiv \mathcal{E}_i^d - \mathcal{E}_{i-1}^d$, где N_d — размерность базиса в рассматриваемой области, а граничные точки совпадают с границами $\mathcal{E}_0^d \equiv \Omega_d$ и $\mathcal{E}_{N_d}^d \equiv \Omega_{d+1}$ (для последней области мы ограничиваем весь непрерывный спектр некоторым достаточно большим значением $E_{\max}$ и предполагаем, что $\Omega_{K+1} = E_{\max}$).

Для того, чтобы определить стационарные волновые пакеты для каждого канала ν , следует использовать следующее разбиение спектра канального гамильтониана $h_{0\nu}$:

$$\bigcup_{d=\nu}^K \{\mathfrak{D}_i^d\}_{i=1}^{N_d},$$

т.е. объединение локальных разбиений областей Q_d с $d \geq \nu$ (т.е. расположенных выше порога Ω_ν). Определим теперь свободные волновые пакеты обычным образом

как интегралы от точных функций непрерывного спектра $|\psi_0^{(\nu)}(E)\rangle$:

$$|x_{i,d}^{(\nu)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{D_i^d}} \int_{\mathfrak{D}_i^d} dE |\psi_0^{(\nu)}(E)\rangle \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, N_d, \\ d = \nu, \dots, K \end{array} \quad (3.53)$$

где двойные индексы i, d нумеруют соответствующие бины дискретизации и области, к которым они относятся, а E — значения полной энергии в канале ν .

Построенный таким образом дискретизованный спектр невозмущенного K -канального гамильтониана будет d -кратно вырожден в каждой области Q_d аналогично точному непрерывному спектру многоканального гамильтониана. Размерность пакетного базиса $\mathcal{N}_\nu$ в каждом канале ν определяется суммой размерностей разбиений N_d из каждой области $\mathcal{N}_\nu = \sum_{d=\nu}^K N_d$. Полная размерность многоканального пакетного базиса будет такой:

$$\mathcal{N} = \sum_{\nu=1}^K \mathcal{N}_\nu = \sum_{d=1}^K d \cdot N_d. \quad (3.54)$$

3.6.3. Многоканальные псевдосостояния и восстановление многоканальной S -матрицы

Знания собственных фазовых сдвигов достаточно для определения полного сечения рассеяния, поскольку S -матрица в представлении собственных каналов диагональна и ее элементы связаны с собственными фазами:

$$S_\varkappa = \exp(2i\delta^{(\varkappa)}). \quad (3.55)$$

Однако для большинства приложений необходимы элементы S -матрицы в представлении исходных каналов $S_{\nu\nu'}$. При каждой энергии эти матричные элементы связаны с диагональными элементами $S_\varkappa$ с помощью матрицы поворота $\mathbf{U}(E)$:

$$S_{\nu\nu'}(E) = \sum_{\varkappa=1}^d U_{\varkappa\nu}(E) S_\varkappa(E) U_{\varkappa\nu'}^*(E), \quad E \in Q_d. \quad (3.56)$$

Эта матрица связывает два типа функций рассеяния полного гамильтониана при фиксированной энергии:

$$|\psi^{(\nu)}(E)\rangle = \sum_{\varkappa=1}^d U_{\nu\varkappa}(E) |\tilde{\psi}^{(\varkappa)}(E)\rangle. \quad (3.57)$$

Эти два типа функций следующие:

- волновые функции $\{|\psi^{(\nu)}(E)\rangle\}_{\nu=1}^d$, отвечающие начальным (“экспериментальным”) каналам ν и
- волновые функции $\{|\tilde{\psi}^{(\kappa)}(E)\rangle\}_{\kappa=1}^d$, определенные в представлении собственных каналов.

Матрица поворота $\mathbf{U}(E)$ является унитарной:

$$\sum_{\kappa=1}^d U_{\nu\kappa}(E) U_{\kappa\nu'}^\dagger(E) = \delta_{\nu\nu'} \quad (3.58)$$

и ее размерность равна числу открытых каналов d .

После дискретизации континуума вместо точных волновых функций в нашем распоряжении имеется набор свободных волновых пакетов $\{|x_j^{(\nu)}\rangle_{j=1}^{N_\nu}\}_{\nu=1}^K$. В результате диагонализации матрицы полного гамильтониана в таком базисе получается набор собственных функций полного гамильтониана $\{|\tilde{z}_i^{(\kappa)}\rangle_{i=1}^{N_\kappa}\}_{\kappa=1}^K$, представляющих собой аналоги волновых функций в представлении собственных каналов. Точнее говоря, эти состояния должны соответствовать многоканальным стационарным волновым пакетам полного гамильтониана (2.68), определенным через интегралы от его функций непрерывного спектра $|\tilde{\psi}^{(\kappa)}(E)\rangle$ в представлении собственных каналов:

$$|\tilde{z}_j^{(\kappa)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{D_j^{(\kappa)}}} \int_{\varepsilon_{j-1}^{(\kappa)}}^{\varepsilon_j^{(\kappa)}} dE |\tilde{\psi}^{(\kappa)}(E)\rangle, \quad j = 1, \dots, N_\kappa, \quad \kappa = 1, \dots, K \quad (3.59)$$

где $\varepsilon_j^{(\kappa)}$ — границы интервалов разбиения спектра $[\Omega_\kappa, E_{\max}]$ в канале κ (пороги Ω_κ совпадают с порогами “экспериментальных” каналов Ω_ν).

При такой дискретизации получаются дискретизованные по энергии аналоги матрицы поворота, т.е. набор матриц $\mathbf{U}^i \approx \mathbf{U}(\mathcal{E}_i^*)$. Для того, чтобы определить элементы этих матриц, можно воспользоваться разложением псевдосостояний полного гамильтониана по многоканальным СВП:

$$|\tilde{z}_i^{(\kappa)}\rangle = \sum_{\nu=1}^K \sum_{j=1}^{N_\nu} C_{ij}^{(\kappa\nu)} |x_j^{(\nu)}\rangle, \quad (3.60)$$

где N_ν — размерность базиса в канале ν . При этом коэффициенты $C_{ij}^{(\kappa\nu)}$ получаются непосредственно из диагонализации.

Предположим, что эти коэффициенты содержат уже информацию о матрице поворота. Рассмотрим сперва случай, когда все пороги совпадают и число базисных

функций N_ν одинаково для каждого канала (обозначим $N_\nu = N$). Тогда выше порога Ω_1 спектр полного гамильтониана K -кратно вырожден. При каждой энергии можно составить набор собственных функций свободного гамильтониана в представлении собственных каналов, в дискретизованном представлении такой набор $|\tilde{x}_i^{(\kappa)}\rangle$ будет выражаться через исходные СВП состояния $\{|x_i^{(\nu)}\rangle\}$ с помощью дискретного набора матриц $\mathbf{U}^i$:

$$|\tilde{x}_i^{(\kappa)}\rangle = \sum_{\nu=1}^K U_{\kappa\nu}^i |x_i^{(\nu)}\rangle. \quad (3.61)$$

Далее предположим, что возмущенные псевдосостояния могут быть разложены только по своему набору СВП в канале κ :

$$|\tilde{z}_i^{(\kappa)}\rangle = \sum_{j=1}^N B_{ij}^\kappa |\tilde{x}_j^{(\kappa)}\rangle, \quad \kappa = 1, \dots, K. \quad (3.62)$$

Такое предположение можно обосновать тем, что рассеяние в собственных каналах проходит независимо друг от друга (S -матрица диагональна).

Сравнивая разложение (3.62) с разложением (3.60), легко получить следующее свойство коэффициентов разложения:

$$C_{ij}^{(\kappa\nu)} = B_{ij}^\kappa U_{\kappa\nu}^j. \quad (3.63)$$

Тогда прямая матричная алгебра позволяет получить следующую связь между матрицей поворота и коэффициентами разложения:

$$U_{\kappa\nu}^j U_{\kappa\nu'}^{*j} = \sum_{i=1}^N C_{ij}^{(\kappa\nu)} C_{ij}^{*(\kappa\nu')}. \quad (3.64)$$

Здесь использовано то, что псевдосостояния нормированы, т.е. $\sum_{j=1}^N |B_{ji}^\kappa|^2 = 1$.

Таким образом, согласно уравнению (3.64), из диагонализации возможно найти все матричные элементы матрицы рассеяния $S_{\nu\nu'}^i = S_{\nu\nu'}(\mathcal{E}_i^*)$ из следующих выражений:

$$S_{\nu\nu'}^i \approx \sum_{\kappa=1}^K \exp\left(2i\delta_i^{(\kappa)}\right) \sum_{j=1}^N C_{ji}^{(\kappa\nu)} C_{ji}^{*(\kappa\nu')}, \quad (3.65)$$

где $\delta_i^{(\kappa)} \equiv \delta^{(\kappa)}(\mathcal{E}_i^*)$ находятся из спектральных сдвигов (3.52). В частности, диагональный элемент S -матрицы $S_{\nu\nu}$, который определяет сечение упругого рассеяния в канале ν , выражается через собственную фазу $\delta^{(\kappa)}$ и вес $W_i^{\kappa\nu}$ компоненты ν в псевдосостоянии $|\tilde{z}_i^{(\kappa)}\rangle$:

$$S_{\nu\nu}^i \approx \sum_{\kappa=1}^K e^{2i\delta_i^{(\kappa)}} W_i^{\kappa\nu}, \quad (3.66)$$

где

$$W_i^{\kappa\nu} = \sum_{j=1}^N |C_{ji}^{(\kappa\nu)}|^2 \quad (3.67)$$

В общем случае, когда все пороги сдвинуты, соотношение (3.65) должно содержать суммирование только по открытым каналам, т.е. оно обобщается следующим образом:

$$S_{\nu\nu'}^i \approx A_i^\nu \sum_{\kappa=1}^d e^{2i\delta_i^{(\kappa)}} \sum_{j=1}^{N_\kappa} C_{ji}^{(\kappa\nu)} C_{ji}^{*(\kappa\nu')}, \quad \mathcal{E}_i^* \in \Omega_d \quad (3.65a)$$

где N_κ — число псевдосостояний в собственном канале κ , и A_i^ν — дополнительный перенормирующий фактор, вызванный наличием закрытых каналов:

$$[A_i^\nu]^{-1} = 1 - \sum_{\kappa=d+1}^K \sum_{j=1}^{N_\kappa} |C_{ji}^{(\kappa\nu)}|^2. \quad (3.68)$$

Таким образом, общая схема вычисления многоканальной S -матрицы состоит из трех шагов:

- (i) Приготовление многоканального базиса для полного свободного гамильтониана $\mathbf{h}_0$ с вырожденным спектром из базисов для свободных гамильтонианов каналов $h_{0\nu}$.
- (ii) Диагонализация матрицы полного гамильтониана в построенном на первом шаге базисе. В результате получается набор многоканальных псевдосостояний.
- (iii) Прямое вычисление многоканальной S -матрицы по формулам (3.52) и (3.65a).

3.7. Иллюстрации к многоканальной задаче

3.7.1. Парциальные фазовые сдвиги для Московского NN потенциала

В качестве иллюстрации вычислим парциальные фазовые сдвиги и угол смешивания для связанных каналов 3S_1 - 3D_1 для Московского NN потенциала [143], учитывающего тензорное смешивание.

Вместо решения связанных интегральных уравнений при многих энергиях, требующегося в стандартных подходах, метод ДСС позволяет найти все три фазы из однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана в пакетном базисе, построенном на сетке Чебышева (А.2). Результаты такого расчета показаны на Рис. 3.12. Здесь приводятся парциальные фазовые сдвиги $\delta({}^3S_1)$, $\delta({}^3D_1)$ и угол смешивания ϵ_1 (в параметризации Стаппа), вычисленные в пакетном базисе на основе

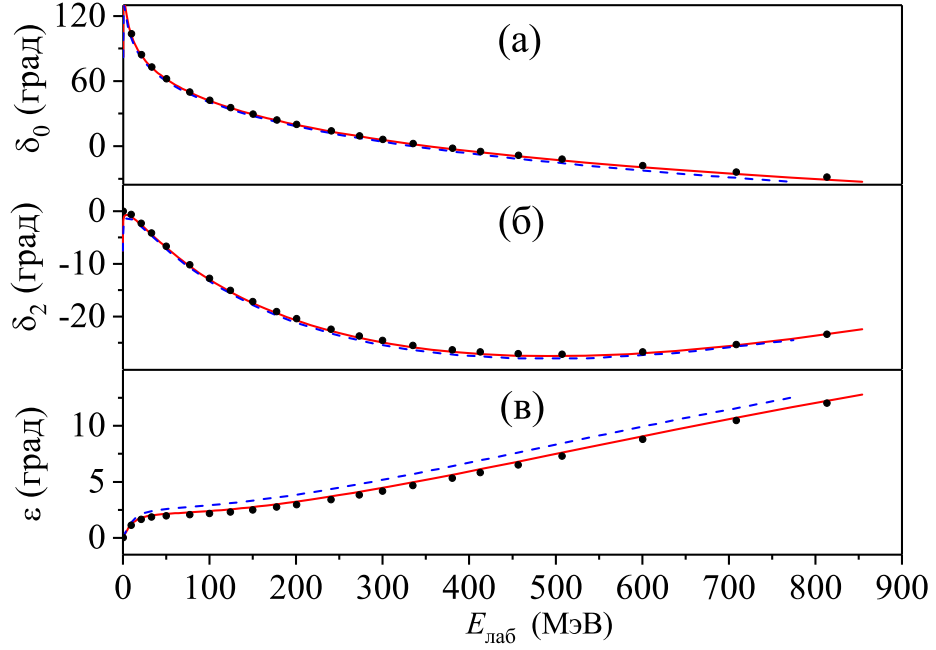


Рисунок 3.12. Парциальные фазовые сдвиги $\delta_0 = \delta(^3S_1)$ (а), $\delta_2 = \delta(^3D_1)$ (б) и угол смешивания ϵ_1 (в) (в параметризации Стаппа) для Московского NN потенциала [143], найденные на основе формализма ДСС в пакетном базисе размерности (в каждом канале): $N = 50$ (штриховая кривая) и $N = 100$ (сплошная кривая). Круги соответствуют фазам, полученным на основе решения двухканального уравнения Липпмана–Швингера при каждой энергии.

формул (3.52) и (3.65) в очень широком диапазоне лабораторных энергий $0 < E < 900$ МэВ. Для сравнения на рисунок добавлены результаты решения двухканального уравнения Липпмана–Швингера, найденные на основе пакетной техники для каждой энергии отдельно. Как видно из рисунка, диагонализационный подход позволяет достаточно точно воспроизвести фазы.

3.7.2. Модельная задача рассеяния дейтрона на ядре

В качестве второй иллюстрации рассмотрим модельную задачу рассеяния составной частицы (например, дейтрона) на некотором бесструктурном ядре A (для простоты будем считать, что его масса бесконечна, также не будем учитывать кулоновское взаимодействие). Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$H = h_{np} + h_{0A} + V_{nA} + V_{pA}, \quad (3.69)$$

где h_{np} — гамильтониан, описывающий взаимодействие между фрагментами частицы (здесь есть одно связанное состояние $|z_1\rangle$ с энергией ϵ_1), h_{0A} — оператор кинетической

энергии составной частицы как целого, а $V_{n(p)A}$ — операторы взаимодействия ее фрагментов с ядром.

Эту задачу можно свести к многоканальной вида (2.68), если разложить полную волновую функцию системы по конечному набору двухчастичных состояний для рассеивающейся составной частицы, включающему связанное состояние $|z_1\rangle$, а также псевдосостояния $|z_\nu\rangle$ гамильтониана h_{np} [79]:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\nu=1}^K |z_\nu, \chi_\nu\rangle, \quad (3.70)$$

где функции $|\chi_\nu\rangle$ определяют вероятности упругого (при $\nu = 1$) и неупругого процессов. Трехчастичная задача рассеяния тогда сводится к многоканальной с гамильтонианом вида (2.68), где потенциалы связи задаются соотношениями:

$$v_{\nu\mu} = \langle z_\nu | V_{nA} + V_{pA} | z_\mu \rangle \quad (3.71)$$

Здесь интегрирование при вычислении матричных элементов проводится только по переменной относительного движения фрагментов падающей частицы. Пороги каналов совпадают с энергиями псевдосостояний $\Omega_\nu \equiv \langle z_\nu | h_{np} | z_\nu \rangle$.

Потенциалы взаимодействия в рассматриваемой задаче берутся для простоты в виде гауссоид. При этом потенциал взаимодействия фрагментов падающей частицы

$$V_{np}(r) = V_0 \exp(-\eta r_{np}^2), \quad V_0 = -66.99 \text{ МэВ}, \eta = 0.415 \text{ Фм}^{-1}, \quad (3.72)$$

довольно неплохо воспроизводит S -волновую функцию дейтрона. Потенциалы взаимодействия фрагментов с ядром имеют чисто модельный вид:

$$V_{n(p)A} = U_0 \exp(-\gamma r_{n(p)A}^2), \quad U_0 = -15.0 \text{ МэВ}, \gamma = 0.44 \text{ Фм}^{-1}. \quad (3.73)$$

Для таких потенциалов нет связанных состояний в подсистемах $\{nA\}$ и $\{pA\}$, поэтому каналов перестройки в исходной трехчастичной задаче нет.

Воспользуемся для решения рассматриваемой многоканальной задачи формализмом дискретных спектральных сдвигов. В качестве базиса для псевдосостояний будем использовать базис гауссоид (Б.1), масштабные параметры которого удовлетворяют распределению Чебышева (Б.2) (см. Приложение Б). В построенном базисе диагонализуем матрицу двухчастичного гамильтониана h_{np} и получим набор псевдосостояний $|z_\nu\rangle$. В расчетах будем использовать первые

$K = 11$ собственных состояний матрицы гамильтониана h_{np} . Для рассматриваемых потенциалов взаимодействия потенциалы связи (3.71) вычисляются аналитически.

Для решения получившейся 11-ти канальной задачи используется базис стационарных волновых пакетов для каждого канала. Далее матрица гамильтониана многоканальной задачи диагонализуеться в многоканальном пакетном базисе и находятся собственные фазовые сдвиги различных собственных каналов, а также элементы матриц поворота. Фактически это отвечает решению исходной задачи в трехчастичном базисе, состоящем из функций $|z_\nu\rangle \otimes |x_{i,d}^{(\nu)}\rangle$.

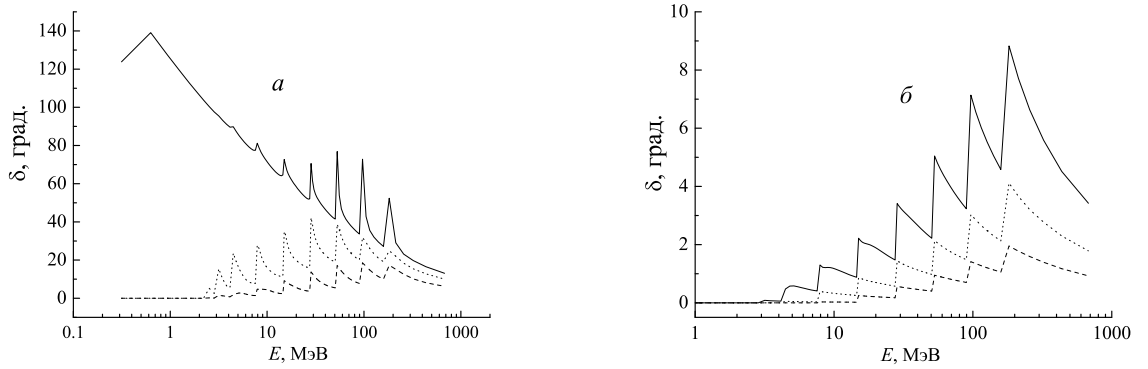


Рисунок 3.13. Собственные фазовые сдвиги для модельной задачи рассеяния составной частицы на ядре, полученные на основе многоканального формализма ДСС: а — $\delta^{(1)}$ (сплошная кривая), $\delta^{(2)}$ (точечная кривая), $\delta^{(3)}$ (штриховая кривая); б — $\delta^{(4)}$ (сплошная кривая), $\delta^{(5)}$ (точечная кривая), $\delta^{(6)}$ (штриховая кривая).

На Рис. 3.13 приводятся собственные фазовые сдвиги рассматриваемой задачи. Как видно из рисунка, они имеют особенности вблизи порогов многоканального спектра. При этом “верхние” (с $\kappa = 4, 5, 6$) собственные фазы (см. Рис. 3.13 б) как бы дополняют друг друга до непрерывных кривых, таким образом можно рассчитывать, что их “всплески” вблизи порогов не будут давать вклада в наблюдаемые величины.

На Рис. 3.14 приводятся энергетические зависимости вероятности неупругих процессов (вероятность промежуточного развала) при упругом рассеянии составной частицы $1 - |S_{11}|^2$ (где S_{11} — матричный элемент упругой S -матрицы в представлении исходных каналов), полученные из однократной диагонализации матрицы гамильтониана в многоканальном базисе. Для проверки точности этих расчетов аналогичная задача была решена традиционным путем — на основе многоканальных уравнений Липпмана–Швингера. Как следует из Рис. 3.14, результаты

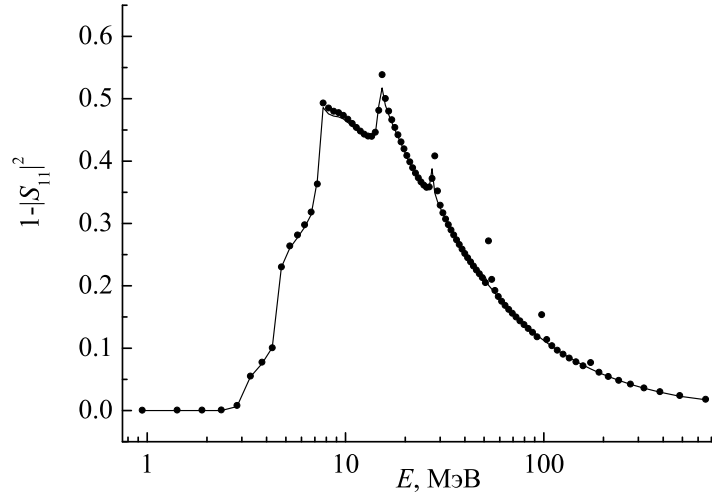


Рисунок 3.14. Вероятность развала при упругом рассеянии составной частицы на ядре, найденная на основе многоканального формализма ДСС (точки) и из решения уравнения Липпмана–Швингера для соответствующей многоканальной задачи (сплошная кривая).

двух подходов полностью совпадают, за исключением единичных точек, лежащих вблизи порогов каналов. Следует отметить здесь, что негладкое поведение вероятности вблизи порогов псевдо-каналов связано не с точностью расчета, а является следствием многоканальной редукции рассматриваемой трехчастичной задачи [79] (см. также главу 6). В дальнейшем эти пороговые особенности можно сгладить.

Таким образом, метод дискретных спектральных сдвигов может эффективно использоваться для решения многоканальных задач на основе однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана системы в многоканальном базисе стационарных волновых пакетов без явного учета граничных условий и решения уравнений теории рассеяния.

3.8. Заключение

В этой главе было показано, как на основе дискретной версии функции спектрального сдвига можно находить многоканальную S -матрицу непосредственно из спектров и собственных функций полного и свободного гамильтонианов в дискретизованном представлении, без какого-либо учета граничных условий и без решения уравнений теории рассеяния. Этот метод позволяет наиболее просто находить

наблюдаемые в многоканальной задаче, причем для широкого диапазона энергий одновременно.

Важными результатами здесь являются определение нескольких функций спектрального сдвига для разных ветвей многоканального спектра и прямая связь таких спектральных сдвигов с собственными фазами рассеяния. Это открывает новые возможности не только для решения конкретных задач, но и для развития теории рассеяния в целом.

Также весьма полезной для различных приложений является новая трактовка многоканальных псевдосостояний, которые можно рассматривать как аппроксимации для функций непрерывного спектра полного гамильтониана в представлении собственных каналов. Одно из таких приложений — построение спектрального разложения многоканальной резольвенты по функциям псевдосостояний, — будет рассмотрено в следующей главе. Также полученная информация о структуре многоканального дискретизованного спектра будет полезной многим исследователям, использующим в той или иной степени L_2 дискретизацию.

В целом, развитие метода дискретных спектральных сдвигов позволит не только пролить свет на некоторые проблемы многоканального и многочастичного рассеяния, но и существенно упростить практическое решение многих задач рассеяния, особенно в тех случаях, когда требуется знать решение не при одной выбранной энергии, а в некотором энергетическом интервале, как, например, в статистической физике при нахождении высших вириальных коэффициентов и при вычислении различных спектральных сумм.

Результаты этой главы опубликованы в работах [76, 78, 84], в которых приводятся и другие иллюстрации для развитого подхода.

Глава 4. Пакетный базис в трехчастичной задаче

Рассмотрим общую задачу рассеяния трех тел 1, 2 и 3 с массами m_1 , m_2 и m_3 . Будем считать, что взаимодействия между частицами v_a ($a = 1, 2, 3$) парные и короткодействующие. Полный гамильтониан трехчастичной системы имеет вид:

$$H = H_0 + \sum_{a=1}^3 v_a. \quad (4.1)$$

Здесь H_0 — оператор кинетической энергии всей системы (в системе центра масс), а v_a — операторы взаимодействия bc пары ($a = 1, 2, 3$).

Удобно ввести три набора координат Якоби [113], отвечающие трем гамильтонианам каналов $H_a = H_0 + v_a$ ($a = 1, 2, 3$), определяющим асимптотические состояния в системе. При этом для каждого набора a вводятся импульс относительного движения частиц b и c , $\mathbf{p}_a$, а также импульс частицы a в общей системе центра масс, $\mathbf{q}_a$:

$$\mathbf{p}_a = \frac{m_c \mathbf{k}_b - m_b \mathbf{k}_c}{m_b + m_c}, \quad \mathbf{q}_a = \frac{(m_b + m_c) \mathbf{k}_a - m_a (\mathbf{k}_b + \mathbf{k}_c)}{m_a + m_b + m_c}, \quad (4.2)$$

где $\mathbf{k}_a$ ($a = 1, 2, 3$) — импульсы каждой из частиц.

Соответствующие приведенные массы, как обычно, равны [113]:

$$\mu_a = \frac{m_b m_c}{m_b + m_c}, \quad M_a = \frac{m_a (m_b + m_c)}{m_a + m_b + m_c}. \quad (4.3)$$

4.1. Трехчастичный пакетный базис свободного гамильтониана

Рассмотрим трехчастичный свободный гамильтониан. В наборе Якоби a , отвечающем разбиению $\{bc\}a$ трехчастичной системы, он записывается в виде следующей прямой суммы свободных гамильтонианов

$$H_0 = h_{0a} \oplus h_0^a, \quad (4.4)$$

где двухчастичный гамильтониан h_{0a} определяет свободное движение в подсистеме $\{bc\}$, а гамильтониан h_0^a определяет свободное движение третьей частицы a относительно центра масс этой пары. Таким образом, собственные функции гамильтониана H_0 можно представить в виде произведений собственных функций этих парных гамильтонианов.

Построим теперь собственные пакетные подпространства для субгамильтонианов h_{0a} и h_0^a . Для этого, как в главе 2, ограничим их непрерывные спектры максимальными

значениями $\mathcal{E}_{\max}$ и $\bar{\mathcal{E}}_{\max}$ соответственно, а также разделим области $[0, \mathcal{E}_{\max}]$ и $[0, \bar{\mathcal{E}}_{\max}]$ на неперекрывающиеся отрезки $\{[\mathcal{E}_{i-1}, \mathcal{E}_i]_{i=1}^N\}$ и $\{[\bar{\mathcal{E}}_{j-1}, \bar{\mathcal{E}}_j]_{j=1}^N\}$. Такие энергетические бины соответствуют импульсным $[p_{i-1}, p_i]$ и $[q_{j-1}, q_j]$, связанным с ними соотношениями $p_i = \sqrt{2\mu_a \mathcal{E}_i}$ and $q_j = \sqrt{2M_a \bar{\mathcal{E}}_j}$, где μ_a и M_a — приведенные массы (4.3). Будем далее обозначать интервалы по переменной p (импульсные и энергетические) как $\mathfrak{D}_i$, а по переменной q как $\bar{\mathfrak{D}}_j$. Также будем использовать схожие обозначения для ширин соответствующих импульсных интервалов и энергетических интервалов (т.е. интервалы по переменной q обозначаются чертой сверху):

$$\begin{aligned} d_i &\equiv p_i - p_{i-1}, & \bar{d}_j &\equiv q_j - q_{j-1}, \\ D_i &\equiv \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_{i-1}, & \bar{D}_j &\equiv \bar{\mathcal{E}}_j - \bar{\mathcal{E}}_{j-1}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Сами пакетные состояния имеют вид:

$$|x_i^\alpha\rangle_a \equiv \frac{1}{\sqrt{B_i}} \int_{\mathfrak{D}_i^a} dp f(p) |\psi_{0p}^\alpha\rangle_a, \quad |\bar{x}_j^\beta\rangle_a \equiv \frac{1}{\sqrt{B_j}} \int_{\bar{\mathfrak{D}}_j^a} dq \bar{f}(p) |\psi_{0q}^\beta\rangle_a, \quad (4.6)$$

где α и β — двухчастичные квантовые числа, связанные с возможными спин-угловыми частями функций.

Трехчастичные волновые пакеты (ТВП) строятся как прямые произведения двухчастичных (4.6). При этом следует учесть спиновые и угловые части волновых функций. Таким образом, полную трехчастичную функцию пакетного базиса можно записать следующим образом:

$$|X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle_a = |x_i^\alpha, \bar{x}_j^\beta; \alpha, \beta, \Gamma\rangle_a \quad (4.7)$$

где $|\alpha\rangle$ — спин-угловая часть волновой функции в подсистеме $\{bc\}$, $|\beta\rangle$ — спин-угловая часть волновой функции третьей частицы, а $|\Gamma\rangle$ — возможный набор трехчастичных квантовых чисел. Индекс a у состояний обозначает принадлежность к Якобиевскому набору (в данном случае — набор a). Состояние (4.7) — это пакетный аналог состояния трехчастичного континуума свободного гамильтониана H_0 . Для простоты обозначений будем иногда использовать для нумерации пакетных состояний мульти-индекс $S = (i, j, \alpha, \beta, \Gamma)$.

Свойства ТВП по построению сходны со свойствами двухчастичных волновых пакетов. Во-первых, они образуют ортонормированную систему:

$${}_a\langle X_S | X_{S'} \rangle_a = \delta_{S, S'}, \quad (4.8)$$

что следует из свойств ортонормированности двухчастичных волновых пакетов. Таким образом, проектор на подпространство волновых пакетов (с определенными квантовыми числами $\{\alpha, \beta, \Gamma\}$) в канале a определяется как:

$$\mathfrak{P}_a^{\Gamma\alpha\beta} = \sum_{ij} |X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle_{aa} \langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}|. \quad (4.9)$$

Можно показать, что этот проектор является сверткой по спин-орбитальным квантовым числам соответствующих двухчастичных проекторов.

Построенное таким образом пакетное подпространство является собственным для гамильтониана H_0 в том же смысле, как и в двухчастичном случае, т.е. каждое базисное состояние является собственным для проектированного гамильтониана H_0 :

$$\mathfrak{P}_a^{\Gamma\alpha\beta} H_0 \mathfrak{P}_a^{\Gamma\alpha\beta M} |X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle_a = (\mathcal{E}_i^* + \bar{\mathcal{E}}_j^*) |X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle_a, \quad (4.10)$$

а соответствующие собственные значения представляют суммы двухчастичных. Аналогично двухчастичному случаю (2.8), будет выполняться проективное правило для собственной функции гамильтониана H_0 .

Поскольку базисные функции являются произведением ступенчатых функций по переменным p_a и q_a в импульсном представлении, решение трехчастичной задачи рассеяния в таком базисе отвечает формулировке задачи рассеяния на двумерной импульсной решетке. Поэтому трехчастичный свободный базис называется *решеточным*. Обозначим двумерные бины (ячейки решетки) как $\mathfrak{D}_{ij} = \mathfrak{D}_i \otimes \bar{\mathfrak{D}}_j$.

Исходя из перечисленных спектральных свойств ТВП, несложно получить удобное конечномерное представление для трехчастичной свободной резольвенты.

4.2. Матрица свободной резольвенты в решеточном базисе

канала a

Определим далее резольвенту свободного о гамильтониана системы $G_0^{(+)}(E) = [E + i0 - H_0]^{-1}$. Этот оператор, согласно [112], является сверткой двухчастичных резольвент:

$$G_0^{(+)}(E) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon g_{0a}^{(+)}(E - \epsilon) g_0^{a(+)}(\epsilon). \quad (4.11)$$

Здесь $g_{0a}^{(+)}(E) = [E + i0 - h_{0a}]^{-1}$ — резольвента гамильтониана подсистемы $\{bc\}$ и $g_0^{a(+)}(E) = [E + i0 - h_0^a]^{-1}$ — резольвента гамильтониана свободного движения оставшейся частицы a относительно пары $\{bc\}$.

Подставим в формулу (4.11) спектральные разложения для $g_{0a}^{(+)}$ и $g_0^{a(+)}$ по собственным функциям гамильтонианов h_{0a} и h_a^0 , нормированным на дельта-функции по энергии:

$$G_0^{(+)}(E) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \left[\sum_{\alpha} \left(\int_0^{\infty} d\mathcal{E} \frac{|\psi_0^{\alpha}(\mathcal{E}), \alpha\rangle_{aa} \langle \psi_0^{\alpha}(\mathcal{E}), \alpha|}{\epsilon + i0 - \mathcal{E}} \right) \right] \times \left[\sum_{\beta} \int_0^{\infty} d\bar{\mathcal{E}} \frac{|\psi_0^{\beta}(\bar{\mathcal{E}}), \beta\rangle_{aa} \langle \psi_0^{\beta}(\bar{\mathcal{E}}), \beta|}{E - \epsilon + i0 - \bar{\mathcal{E}}} \right]. \quad (4.12)$$

Выполняя интегрирование по ϵ и переходя к трехчастичным функциям с определенными значениями трехчастичных квантовых чисел Γ , получаем выражение для свободной резольвенты (в представлении волновых функций канала a) в следующем виде:

$$G_0^{(+)}(E) = \sum_{\Gamma} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \int_0^{\infty} d\bar{\mathcal{E}} \frac{|\psi_0^{\alpha}(\mathcal{E}), \psi_0^{\beta}(\bar{\mathcal{E}}); \alpha, \beta, \Gamma\rangle \langle \psi_0^{\alpha}(\mathcal{E}), \psi_0^{\beta}(\bar{\mathcal{E}}); \alpha, \beta, \Gamma|}{E + i0 - \mathcal{E} - \bar{\mathcal{E}}}. \quad (4.13)$$

Это спектральное разложение можно также записать через собственные функции двухчастичных гамильтонианов, нормированные на дельта-функции по импульсам:

$$G_0^{(+)}(E) = \sum_{\Gamma} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^{\infty} dp \int_0^{\infty} dq \frac{|\psi_{0p}^{\alpha}, \psi_{0q}^{\beta}; \alpha, \beta, \Gamma\rangle \langle \psi_{0p}^{\alpha}, \psi_{0q}^{\beta}; \alpha, \beta, \Gamma|}{E + i0 - \frac{p^2}{2m_a} - \frac{q^2}{2M_a}}. \quad (4.13a)$$

Применим к полученному спектральному разложению проектирование на собственное пакетное подпространство гамильтониана H_0 (в канале a). Тогда после простых действий получится следующее конечномерное диагональное представление для свободной резольвенты:

$$\mathfrak{G}_{0a} = \sum_{\Gamma} \sum_{\alpha, \beta} |X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle_a [G_0(E)]_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} \langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}|, \quad (4.14)$$

где собственные значения определяются формулой:

$$[G_0(E)]_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{B_i B_j}} \int_{\mathfrak{D}_{ij}} dp dq \frac{|f(p)|^2 |\bar{f}(q)|^2}{E + i0 - \frac{p^2}{2m_a} - \frac{q^2}{2M_a}}. \quad (4.15)$$

Следует отметить, что формально интегрирование в (4.15) не затрагивает угловые части волновых функций и зависит только от разбиений по модулям импульсов. Однако сами интервалы разбиений $\mathfrak{D}_j$ и $\bar{\mathfrak{D}}_j$ могут быть разными для разных парциально-волновых конфигураций α и β , поэтому соответствующие индексы присутствуют в матричных элементах свободной резольвенты.

Выполняя явно интегрирование в формуле (4.15), получаем следующие аналитические выражения для реальных частей собственных значений проекции свободной резольвенты в случае энергетических пакетов:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[G_0(E)]_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} = & \frac{1}{D_i\bar{D}_j} \left\{ (\Delta + \Delta_-) \ln |\Delta + \Delta_-| + (\Delta - \Delta_-) \ln |\Delta - \Delta_-| \right\} - \\ & - \frac{1}{D_i\bar{D}_j} \left\{ (\Delta + \Delta_+) \ln |\Delta + \Delta_+| + (\Delta - \Delta_+) \ln |\Delta - \Delta_+| \right\}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

где введены обозначения:

$$\Delta \equiv \mathcal{E}_i^* + \bar{\mathcal{E}}_j^* - E, \quad \Delta_- \equiv \frac{D_i - \bar{D}_j}{2}, \quad \Delta_+ \equiv \frac{D_i + \bar{D}_j}{2}.$$

Здесь D_i и $\bar{D}_j$ — энергетические ширины бинов гамильтонианов h_{0a} and h_0^a соответственно.

Мнимые части этих собственных значений имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}[G_0(E)]_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} = & -\frac{\pi}{D_i\bar{D}_j} \left\{ (\Delta + \Delta_+) \theta(\Delta + \Delta_+) + (\Delta - \Delta_+) \theta(\Delta - \Delta_+) - \right. \\ & \left. (\Delta + \Delta_-) \theta(\Delta + \Delta_-) - (\Delta - \Delta_-) \theta(\Delta - \Delta_-) \right\}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Итак, благодаря спектральным свойствам трехчастичных волновых пакетов и их прямой связи с точными функциями непрерывного спектра, как и в двухчастичном случае, получается явное конечномерное представление для проекции свободной резольвенты в собственное пакетное подпространство канала a .

4.3. Матрица перестановок в пакетном базисе

Для решения общей трехчастичной задачи рассеяния следует ввести аналогичные пакетные базисы для каждого якобиевского набора. Каждое из таких представлений будет собственным для свободного гамильтониана H_0 . Используя различные базисные представления, можно определить элементы матриц операторов перестановки частиц, присутствующих в фаддеевской схеме решения задачи рассеяния трех тел.

Нетрудно показать, что матрица оператора перестановки в ТВП базисе — это просто матрица перекрывания базисных функций, определенных в различных наборах координат Якоби:

$${}_a \langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} | P_{ab} | X_{i'j'}^{\Gamma\alpha'\beta'} \rangle_a = {}_a \langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} | X_{i'j'}^{\Gamma\alpha'\beta'} \rangle_b, \quad (4.18)$$

где внешние индексы a и b указывают на принадлежность базисной функции определенному набору координат Якоби.

Матричный элемент вида (4.18) сводится к следующему четырехкратному интегралу:

$$[P_{ab}^{\Gamma}]_{ij,i'j'}^{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \equiv {}_a\langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} | P_{ab} | X_{i'j'}^{\Gamma\alpha'\beta'} \rangle_b = \int_{\mathfrak{D}_{ij}^a} dp dq \int_{\mathfrak{D}_{i'j'}^b} dp' dq' \frac{P_{ab}^{\Gamma}(\alpha\beta, \alpha'\beta'; p, q, p', q')}{\sqrt{d_i d_{i'} d_j d_{j'}}}, \quad (4.19)$$

где $P_{ab}^{\Gamma}(\alpha\beta, \alpha'\beta'; p, q, p', q')$ — ядро оператора перестановки в импульсном представлении, которое можно записать в явном виде для каждой конкретной системы. Здесь двумерные импульсные ячейки помечены верхними индексами a и b для того, чтобы отметить их принадлежность определенному набору Якоби.

Подынтегральная функция в (4.19) обычно содержит особенности по импульсам, которые сглаживаются в результате интегрирования по ячейкам импульсной решетки. Явные формулы для вычисления матричных элементов (4.19) для случая трех тождественных частиц приводятся в Приложении В.

Заметим, что построенный пакетный базис можно использовать непосредственно для решения уравнений Фаддеева, например в форме Альта–Гроссбергера–Сандхаса (АГС) для операторов перехода U_{ab} [113]. Однако, используя базис возмущенных волновых пакетов и их связь с псевдосостояниями, можно построить собственные пакетные базисы для канальных гамильтонианов и конечномерные представления для резольвент каналов. Это позволит использовать альтернативную (но эквивалентную) форму уравнений Фаддеева и избежать вычисления двухчастичной t -матрицы при многих двухчастичных энергиях и импульсах, необходимых в традиционной фаддеевской схеме.

4.4. Собственные пакетные подпространства канальных гамильтонианов

Канальный гамильтониан H_a также представляется в виде прямой суммы двухчастичных гамильтонианов:

$$H_a = h_a \oplus h_0^a, \quad (4.20)$$

где $h_a = h_{0a} + v_a$ включает взаимодействие v_a в подсистеме $\{bc\}$. Введем пакетный базис для этого двухчастичного гамильтониана. Предположим, что в подсистеме $\{bc\}$

есть N_b связанных состояний с соответствующими функциями $\{|z_n^\alpha\rangle\}_{n=1}^{N_b}$ и энергиями $\{\epsilon_n^{\alpha*}\}_{n=1}^{N_b}$. Определим далее разбиение $\{\Delta_k\}_{k=N_b+1}^N$ непрерывного спектра гамильтониана h_a и построим набор возмущенных волновых пакетов из $|z_k^\alpha\rangle$ точных функций рассеяния $|\psi_p^\alpha\rangle$ согласно уравнению (2.56).

Полный пакетный базис $\{|z_k^\alpha\rangle\}_{k=1}^{N^\alpha}$ для гамильтониана h_a включает связанные состояния и возмущенные волновые пакеты.

Теперь можно построить функции собственного пакетного базиса для канального гамильтониана H_a как прямые произведения двухчастичных базисных функций для гамильтонианов h_a and h_0^a , учитывая свертку спин-угловых частей, приводящую к состояниям с определенными трехчастичными квантовыми числами Γ (полностью аналогично трехчастичному базису для свободного гамильтониана (4.7)):

$$|Z_{kj}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle \equiv |z_k^\alpha, \bar{x}_j^\beta; \alpha, \beta, \Gamma\rangle, \quad k = 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, \bar{N}. \quad (4.21)$$

Свойства такого пакетного базиса по отношению к гамильтониану H_a такие же, как свойства базиса свободных волновых пакетов по отношению к гамильтониану H_0 .

Построенный таким образом базис определяет собственное пакетное подпространство (СПП) канального гамильтониана H_a . Единственное отличие “канального” базиса от свободного решеточного состоит в наличии в базисном наборе связанных состояний в подсистеме $\{bc\}$.

4.5. Канальная резольвента в собственном пакетном подпространстве

Наиболее важное для приложений свойство пакетного базиса состоит в том, что в построенном СПП канала a можно теперь найти конечномерное представление для канальной резольвенты $G_a^{(+)}(E) \equiv [E + i0 - H_a]^{-1}$. Аналогично случаю со свободным гамильтонианом, резольвента канального гамильтониана является сверткой двухчастичных резольвент $g_a^{(+)}(\epsilon) = [\epsilon + i0 - h_a]^{-1}$ и $g_0^{a(+)}(E)$:

$$G_a(E) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon g_a(\epsilon) g_0^a(E - \epsilon). \quad (4.22)$$

Используя далее спектральные разложения для этих операторов (с учетом наличия связанных состояний в подсистеме $\{bc\}$) и интегрируя, получим явные выражения для спектрального разложения канальной резольвенты.

В отличие от случая свободного гамильтониана, спектральное разложение для канальной резольвенты, аналогичное (4.13a), состоит из двух слагаемых:

$$G_a(E) = G_a^{\text{BC}}(E) + G_a^{\text{CC}}(E), \quad (4.23)$$

где bound-continuum (BC) часть имеет вид однократного интеграла:

$$G_a^{\text{BC}}(E) = \sum_{\Gamma\alpha\beta} \sum_{n=1}^{N_b} \int_0^\infty dq \frac{|z_n^\alpha, \psi_{0q}^\beta; \alpha, \beta, \Gamma\rangle \langle z_n^\alpha, \psi_{0q}^\beta; \alpha, \beta, \Gamma|}{E + i0 - \epsilon_n^{\alpha*} - \frac{q^2}{2M_a}}. \quad (4.24)$$

Вторая, continuum-continuum (CC), часть G_a имеет вид, аналогичный спектральному разложению для свободной резольвенты:

$$G_a^{\text{CC}}(E) = \sum_{\alpha\beta} \int_0^\infty dp \int_0^\infty dq \frac{|\psi_p^\alpha, \psi_{0q}^\beta; \alpha, \beta, \Gamma\rangle \langle \psi_p^\alpha, \psi_{0q}^\beta; \alpha, \beta, \Gamma|}{E + i0 - \frac{p^2}{2\mu_a} - \frac{q^2}{2M_a}}, \quad (4.25)$$

где $|\psi_p^\alpha\rangle$ — функции непрерывного спектра гамильтониана h_a .

Выполним теперь проектирование в СПП гамильтониана канала a . Тогда получим следующие явные выражения для частей проектированной резольвенты гамильтониана канала:

$$\mathfrak{G}_a = \sum_{\Gamma, \alpha, \beta} \sum_{k, j} |Z_{kj}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle G_{kj}^{\Gamma\alpha\beta}(E) \langle Z_{kj}^{\Gamma\alpha\beta}|. \quad (4.26)$$

Матричные элементы $G_{kj}^{\Gamma\alpha\beta}$ определяются как одномерные интегралы для BC-части :

$$G_{kj}^{\Gamma\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{B_j}} \int_{\mathfrak{D}_j} \frac{|\bar{f}(q)|^2 dq}{E + i0 - \epsilon_k^{\alpha*} - \frac{q^2}{2M_a}}, \quad k = 1, \dots, N_b, \quad j = 1, \dots, \bar{N} \quad (4.26a)$$

и двукратные для CC-части:

$$G_{kj}^{\Gamma\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{A_k^\alpha B_j}} \int_{\Delta_k^\alpha} \int_{\mathfrak{D}_j} \frac{|w(p)|^2 |\bar{f}(q)|^2 dp dq}{E + i0 - \frac{p^2}{2\mu_a} - \frac{q^2}{2M_a}}, \quad k = N_b + 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, \bar{N}. \quad (4.26b)$$

Для CC-части они имеют тот же вид, что и формулы (4.16) и (4.17) для свободной резольвенты, в которых нужно заменить собственные значения и ширины спектра свободного гамильтониана на те же величины для возмущенного.

Для BC-части получаются выражения, аналогичные тем, которые получались в двухчастичной задаче с учетом сдвига энергий на энергию двухчастичного связанного состояния ϵ_k^* :

$$\left. \begin{aligned} \text{Re} G_{kj}^{\Gamma\tilde{\alpha}\beta}(E) &= \frac{1}{D_j} \ln \left| \frac{\bar{\mathcal{E}}_{j-1} + \epsilon_k^* - E}{\bar{\mathcal{E}}_j + \epsilon_k^* - E} \right|, \\ \text{Im} G_{kj}^{\Gamma\tilde{\alpha}\beta}(E) &= -\frac{\pi}{D_j} \left\{ \theta(\bar{\mathcal{E}}_j + \epsilon_k^* - E) - \theta(\bar{\mathcal{E}}_{j-1} + \epsilon_k^* - E) \right\} \end{aligned} \right\}. \quad (4.27)$$

Все эти матричные элементы зависят только от параметров разбиения спектров (т.е. от граничных точек $\mathcal{E}_i$ и $\bar{\mathcal{E}}_j$) и полной энергии и не зависят явно от потенциала взаимодействия v_a . По мере увеличения размерности используемого базиса, при сходимости наблюдаемых, вычисляемых с помощью этого представления для резольвенты, их зависимость от параметров разбиения должна пропадать.

Следует отметить, что одним из приближений в трехчастичной задаче является замена непрерывного спектра гамильтониана h_a на дискретизованный. Это соответствует многоканальной редукции исходной трехчастичной задачи. Применимость такого приближения при описании прямых ядерных реакций будет рассмотрена в главе 6. Такая редукция соответствует замене трехчастичного разреза в канальной резольвенте на конечный набор двухчастичных разрезов с порогами, начинающимися от энергии каждого псевдосостояния ϵ_k^* . При этом вместо СС-части канальной резольвенты получится ВС-часть для всех индексов $k = 1, \dots, N$.

4.6. Построение базиса канального гамильтониана из решеточного

4.6.1. Взаимодействующие волновые пакеты и псевдосостояния

Как уже упоминалось в главе 2, взаимодействующие волновые пакеты для гамильтониана h_a можно построить из диагонализации его матрицы в базисе свободных волновых пакетов, соответствующих гамильтониану h_{0a} .

В этом случае функции трехчастичных пакетных базисов, решеточного и канального, связаны простым преобразованием поворота:

$$|Z_{kj}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle_a = \sum_{i=1}^N O_{ki}^{\alpha} |X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle_a, \quad (4.28)$$

причем это преобразование затрагивает только индексы, относящиеся к подсистеме $\{bc\}$. Таким образом, в полном трехчастичном пространстве матрица O является блочной матрицей.

Кроме того, в качестве базиса для гамильтониана h_a можно использовать его псевдосостояния в любом подходящем L_2 базисе. В частности, в главе 6 в качестве такого базиса используются гауссианы.

Рассмотрим ниже более детально случай, когда гамильтониан подсистемы $\{bc\}$

является многоканальным. Частным примером является NN система, в которой учитываются тензорные компоненты взаимодействия между нуклонами.

4.6.2. Случай, когда двухчастичный гамильтониан является многоканальным

Воспользуемся формализмом, предложенным в разделах 3.6.2 и 3.6.3 для многоканального гамильтониана (2.68) и соответствующих волновых пакетов, определенных в представлении собственных каналов (3.59).

Резольвента многоканального гамильтониана

В представлении собственных каналов спектральное разложение для резольвенты многоканального гамильтониана (2.68) по состояниям дискретного и непрерывного спектра имеет вид простой суммы по индексу собственного канала $\varkappa$:

$$g(E) \equiv g_b(E) + g_c(E) = \sum_{n_b=1}^{N_b} \frac{|z_{n_b}\rangle\langle z_{n_b}|}{E - \epsilon_{n_b}^*} + \sum_{\varkappa=1}^K \int_{\Omega_{\varkappa}}^{\infty} dE' \frac{|\tilde{\psi}^{(\varkappa)}(E')\rangle\langle\tilde{\psi}^{(\varkappa)}(E')|}{E + i0 - E'}, \quad (4.29)$$

где E' определяет полную энергию состояния, а части g_b и g_c полной резольвенты определяются вкладами связанных состояний $|z_{n_b}\rangle$ (с энергиями $\epsilon_{n_b}^*$) и континуума соответственно. При этом интеграл по непрерывному спектру для каждого собственного канала начинается от его порога $\Omega_{\varkappa}$.

Применим далее к спектральному разложению (4.29) процедуру дискретизации, т.е. спроектируем g_c в многоканальный пакетный базис (3.59). Тогда получим следующее конечномерное представление для многоканальной резольвенты:

$$\mathfrak{g}(E) = \sum_{n_b=1}^{N_b} \frac{|z_{n_b}\rangle\langle z_{n_b}|}{E - \epsilon_{n_b}^*} + \sum_{\varkappa=1}^K \sum_{j=1}^{N_{\varkappa}} |z_j^{(\varkappa)}\rangle g_j^{(\varkappa)}(E) \langle z_j^{(\varkappa)}|, \quad (4.30)$$

где комплексные собственные значения $g_j^{(\varkappa)}(E)$ определяются как интегралы

$$g_j^{(\varkappa)}(E) = \frac{1}{D_j^{(\varkappa)}} \int_{\varepsilon_{j-1}^{(\varkappa)}}^{\varepsilon_j^{(\varkappa)}} dE' \frac{1}{E + i0 - E'}. \quad (4.31)$$

Как уже упоминалось выше, многоканальные псевдосостояния, которые получаются из диагонализации матрицы полного гамильтониана в представлении многоканальных свободных волновых пакетов (3.60), можно рассматривать как

аппроксимации пакетных состояний (3.59). При этом, благодаря возможности разделения ветвей многоканального дискретизованного спектра, можно определить и параметры дискретизации полного спектра $\varepsilon_j^{(\varkappa)}$, а также величины $g_j^{(\varkappa)}(E)$ из (4.31).

Таким образом, благодаря новой трактовке дискретизованного многоканального спектра, предложенной в методе дискретных спектральных сдвигов, можно построить из найденных многоканальных псевдосостояний резольвенту полного многоканального гамильтониана.

Такой многоканальный базис удобно использовать далее при построении трехчастичного пакетного базиса для канального гамильтониана. В трехчастичном канальном базисе снова получаются явные аналитические выражения для проекции канальной резольвенты. Здесь сначала выводится формула для точной канальной резольвенты из свертки (4.22) двухчастичной многоканальной резольвенты (4.29) с двухчастичной резольвентой $g_0^{a(+)}(E)$. В результате интегрирования получаются те же формулы (4.24) и (4.25), в которых двухчастичные квантовые числа α включают индекс собственного канала $\varkappa$. После проектирования в трехчастичный пакетный базис формулы для собственных значений матрицы канальной резольвенты имеют тот же вид (4.26a) и (4.26b).

Вычисление t -матрицы

Если известна резольвента двухчастичного полного гамильтониана, двухчастичная t -матрица может быть найдена из явного выражения $t(E) = v + vg(E)v$, где v — двухчастичный потенциал. В случае многоканального гамильтониана это выражение становится матричным.

Если подставить в него явное выражение для многоканальной резольвенты (4.30), получается следующее приближенное выражение для немассовой t -матрицы [85]:

$$t_{\nu\nu'}(E_1, E_2; E) \approx \frac{\langle x_i^\nu | v | x_j^{\nu'} \rangle}{\sqrt{D_i D_j}} + \sum_{n=1}^{N_b} \frac{\langle x_i^\nu | v | z_n \rangle \langle z_n | v | x_j^{\nu'} \rangle}{\sqrt{D_i D_j} (E - \epsilon_n^*)} + \sum_{\varkappa=1}^K \sum_{k=1}^{N_\varkappa} \frac{\langle x_i^\nu | v | z_k^\varkappa \rangle}{\sqrt{D_i}} g_k^{(\varkappa)}(E) \frac{\langle z_k^\varkappa | v | x_j^{\nu'} \rangle}{\sqrt{D_j}}, \quad (4.32)$$

где $|x_i^\nu\rangle$ — многоканальные свободные волновые пакеты, D_i — ширины соответствующих интервалов, $E_1 \in \mathfrak{D}_i^\nu$, $E_2 \in \mathfrak{D}_j^{\nu'}$, а матричные элементы потенциала между различными состояниями могут быть легко вычислены.

Таким образом, полную немассовую t -матрицу в двухчастичном случае можно найти из диагонализации полного двухчастичного гамильтониана (одноканального

или многоканального). В принципе, полученную таким способом t -матрицу можно использовать далее для решения уравнений Фаддеева в форме АГС. Однако в приложениях, рассматриваемых в этой работе, будут использованы трехчастичные уравнения для операторов перехода, в которые входит канальная резольвента (см. главы 5 и 6).

Вместе с тем, описанный здесь метод построения спектрального разложения для полной резольвенты и явного вычисления полной немассовой t -матрицы будет использован в главе 7, посвященной приложениям в ядерной материи.

4.7. Пакетные базисы для систем, состоящих из нескольких тел

В случаях, рассмотренных выше, удавалось получить явные конечномерные представления для трехчастичных резольвент, поскольку соответствующие гамильтонианы, канальный и свободный, представляются в виде прямых сумм двухчастичных. Точно так же, если гамильтониан системы нескольких тел может быть записан в виде прямой суммы M двухчастичных субгамильтонианов:

$$H_M = h_1 \oplus h_2 \oplus \dots \oplus h_M, \quad (4.33)$$

для него можно построить собственный пакетный базис по схеме, аналогичной использовавшейся выше.

Каждая функция такого многомерного базиса будет представлять собой прямое произведение двухчастичных волновых пакетов для гамильтонианов h_i , ($i = 1, \dots, M$):

$$|Z_{i_1 i_2 \dots i_M}\rangle = |z_{i_1}\rangle \otimes |\bar{z}_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\bar{\bar{z}}_{i_M}\rangle, \quad (4.34)$$

где знак верхнего подчеркивания использован, чтобы отличить пакетные z -функции, отвечающие разным подсистемам. В базисе (4.34) матрица гамильтониана H_M и его резольвенты $G_M(E) = [E + i0 - H_M]^{-1}$ будут иметь явный диагональный вид.

Согласно [112], такая резольвента записывается в виде свертки:

$$G_M(E) = \frac{1}{M} \frac{1}{(-i\pi)^{M-1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \dots d\epsilon_{M-1} g_1(\epsilon_1) g_2(\epsilon_2) \dots g_M(E - \sum_{i=1}^{M-1} \epsilon_i), \quad (4.35)$$

что позволяет вычислить проекцию этого оператора в многочастичный пакетный базис (4.34).

Результаты этой главы опубликованы в работах [71, 72, 80, 84–86].

Глава 5. Упругое рассеяние и развал в трехнуклонной системе

5.1. Введение

Как уже упоминалось во Введении к диссертации, за последние два десятилетия достигнут значительный успех в точных *ab-initio* вычислениях задач рассеяния нескольких тел [4, 5, 56, 58, 144–149]. Эти вычисления позволили описать результаты многочисленных экспериментов по упругому nd рассеянию при энергиях до 350 МэВ и трехчастичному развалу $n + d \rightarrow n + n + p$. Относительно недавно появились четырехчастичные расчеты [7, 8], а затем и расчеты для пятинуклонной системы [9]. Однако некоторые проблемы остаются нерешенными даже при низких энергиях. В упругом $3N$ рассеянии это так называемая загадка A_y (а также другие загадки для различных векторных и тензорных аналитических способностей), когда теоретические расчеты векторной анализирующей способности нуклона со всеми реалистическими потенциалами дают недооценку примерно в 10% при низких энергиях до 10 МэВ. Также остается нерешенной проблема описания pd рассеяния под задними углами (Sagara puzzle) при различных энергиях столкновения. В задаче Nd развала есть целый ряд нерешенных проблем: проблема длины нейтрон-нейтронного рассеяния и корректного описания вклада NN канала 1S_0 в описание развала при низких энергиях [150], а также проблемы описания сечения развала в конкретных конфигурациях, например, случай квази-свободного рассеяния при 25 МэВ [151]. Одна из самых известных проблем — это аномалия звездного распада в $3N$ системе при 13 МэВ [152], когда теоретические сечения развала в реакции pd оказываются завышены, а для реакции nd — занижены. Наиболее вероятная причина всех этих расхождений с экспериментальными данными связана не с точностью вычислений, а с отсутствием необходимых вкладов в NN - и $3N$ -взаимодействиях.

В то же время прогресс в точных малочастичных расчетах, в частности, в тестировании новых моделей NN и $3N$ -взаимодействия сильно ограничен сложностью таких расчетов, особенно выше трехчастичного порога развала. Из-за проблем с прямым решением уравнений Фаддеева-Якубовского в последнее время наблюдается рост интереса к альтернативным подходам [25, 59, 153], позволяющим упростить такие

расчеты.

Согласно теме диссертации, здесь уместно выделить L_2 -подходы к решению задач рассеяния нескольких тел [31, 37, 44, 46, 48, 50, 154, 155]. Такие L_2 -подходы очень хорошо зарекомендовали себя для решения частного вида задач. Один из наиболее удачных подходов — это метод связанных каналов дискретизованного континуума (CDCC), который наиболее широко применяется для описания прямых ядерных реакций [44, 46, 48, 49]. Более подробно он будет рассмотрен в следующей главе. Однако этот подход является реализацией многоканальной редукции, в которой вместо трехчастичных граничных условий учитываются многоканальные, что не позволяет, например, явно учитывать процессы перестройки, которыми нельзя пренебречь в трехнуклонной задаче.

Как будет показано ниже, в основе пакетной техники лежит идея дискретизации полного трехчастичного континуума, которая позволяет использовать интегральные уравнения теории рассеяния и учитывать все типы граничных условий. Следует отметить, что аналогичная идея с полной дискретизацией в импульсном пространстве была впервые предложена З. Куроуглу [50] в рамках расширения метода связи каналов. Автор решал простую модельную проблему рассеяния $2 \rightarrow 2$ и развала $2 \rightarrow 3$, используя базис полиномов Лагерра. К сожалению, насколько это известно автору диссертации, метод не получил дальнейшего развития. Также схема решения полной трехчастичной задачи с учетом кулоновского взаимодействия в биортогональном Лагерровском базисе приводится в работе [38], однако без конкретных расчетов.

5.2. Описание трехнуклонной системы

Рассмотрим рассеяние трех тождественных частиц 1, 2 и 3 (нуклонов) с массой m с парными потенциалами взаимодействия v_a ($a = 1, 2, 3$). Поскольку мы имеем дело с системой тождественных частиц, будем рассматривать набор $a = 1$. Подробно формализм волновых пакетов описан в предыдущей главе. Как и в ней, будем использовать наборы импульсов Якоби и введем пакетный базис для свободного гамильтониана H_0 и гамильтониана канала H_1

$$H_0 = h_{01} \oplus h_0^1, \quad H_1 = h_1 \oplus h_0^1, \quad (5.1)$$

где гамильтониан $h_1 = h_{01} + v_1$ описывает NN подсистему с взаимодействием v_1 и гамильтониан h_0^1 описывает свободное движение третьего нуклона относительно центра масс подсистемы NN .

Амплитуды упругого рассеяния можно найти из уравнения Фаддеева для оператора перехода $\bar{U}$ в форме Альта–Грассбергера–Сандхаса (АГС) [5]:

$$\bar{U}(E) = PG_0^{-1}(E) + Pt(E)G_0(E)\bar{U}(E), \quad (5.2)$$

где $t(E)$ — двухчастичная t -матрица в трехчастичном пространстве, $G_0(E) = [E + i0 - H_0]^{-1}$ — трехчастичная свободная резольвента, и P — оператор перестановок, который для тождественных частиц выглядит следующим образом:

$$P = P_{12}P_{23} + P_{13}P_{23}. \quad (5.3)$$

После парциально-волнового разложения уравнение (5.2) для каждого значения полного углового момента и четности сводится к системе двумерных интегральных уравнений в импульсном представлении (или к интегро-дифференциальным уравнениям в конфигурационном пространстве).

Поскольку пакетная техника позволяет найти явное выражение для резольвенты гамильтониана канала, вместо уравнения (5.2) здесь удобнее использовать эквивалентную форму уравнения для оператора перехода $U(E)$ [81, 85]:

$$U(E) = Pv_1 + Pv_1G_1(E)U. \quad (5.4)$$

В уравнении (5.4) $G_1(E)$ — это резольвента гамильтониана канала H_1 . Благодаря тождеству $t(E)G_0(E) \equiv v_1G_1(E)$, ядра уравнений (5.2) и (5.4) одинаковы, а их решения $\bar{U}$ и U совпадают on-shell и half-shell.

Такой вид уравнения очень удобен именно для пакетной техники, поскольку она позволяет сразу использовать в качестве основного представления собственный пакетный базис канального гамильтониана H_1 . В этом представлении резольвента G_1 имеет явный диагональный вид, и для решения трехчастичной задачи не требуется находить предварительно двухчастичную t -матрицу при многих энергиях. Основные энергетические особенности фаддевского ядра уравнения (5.4) теперь сосредоточены в канальной резольвенте G_1 . Таким образом, матричный аналог уравнения (5.4) может быть решен при вещественных энергиях.

После проектирования в пакетный базис оператор перекрывания задается матрицей в пакетном базисе. Это позволяет избежать многомерных переинтерполяций решения, связанных с поворотом импульсных переменных при переходе от одного набора Якоби к другому. При этом особенности ядра этого оператора в импульсном пространстве сглаживаются путем интегрирования по ячейкам решетки. Наконец, эта матрица не зависит от энергии, поэтому ее можно вычислить один раз и затем использовать при разных расчетах при нескольких энергиях, что заметно ускоряет время расчета. Все эти усовершенствования приводят к значительному упрощению практического решения уравнения для оператора перехода.

5.2.1. Трехчастичный пакетный базис для $3N$ системы

Ниже будет рассмотрена задача Nd рассеяния с реалистическими NN потенциалами, включающими тензорные компоненты.

В этом случае для трехнуклонной системы используются следующие квантовые числа (согласно так называемой схеме (jj) -связи):

$$\alpha = \{l, s, j_{23}\}; \quad \beta = \{\lambda, I\}; \quad \Gamma = \{J, \pi, T\}, \quad (5.5)$$

где l, s и j_{23} — квантовые числа NN - подсистемы: l — орбитальный момент, s — спин и $\mathbf{j}_{23} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ — полный угловой момент (потенциал взаимодействия в общем случае зависит от всех этих квантовых чисел). Остальные квантовые числа следующие: λ — орбитальный момент и $\mathbf{I} = \boldsymbol{\lambda} + \boldsymbol{\sigma}$ — полный момент третьего нуклона, где $\sigma = \frac{1}{2}$ — его спин. Трехчастичные квантовые числа, которые сохраняются в системе — это полный угловой момент $\mathbf{J} = \mathbf{j}_{23} + \mathbf{I}$, полный изоспин T , а также четность π . Следует напомнить, что изоспин пары нуклонов t определяется однозначно по значениям l и s , поскольку сумма $l + s + t$ должна быть нечетной в силу принципа Паули.

Двухчастичные пакетные состояния (4.6) определяются для каждой парциальной волны l и λ и умножаются на необходимые спин-угловые части согласно (5.5). Таким образом, функции трехчастичного пакетного базиса (4.7) для трехнуклонной системы имеют следующий вид:

$$|X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta}\rangle = |x_i^l, \bar{x}_j^\lambda; \alpha, \beta, \Gamma\rangle, \quad (5.6)$$

При определении трехчастичных пакетных состояний для канального гамильтониана H_1 следует учесть возможную спин-угловую связь каналов в подсистеме

$\{23\}$, вызванную тензорной связью во взаимодействии v_1 , поэтому взаимодействующие волновые пакеты для гамильтониана h_1 определяются в представлении собственных каналов, как в уравнении (3.59). Поэтому функции трехчастичного канального базиса имеют следующий вид:

$$|Z_{kj}^{\Gamma\tilde{\alpha}\beta}\rangle \equiv |z_k^\varkappa, \bar{x}_j^\lambda; \tilde{\alpha}, \beta : \Gamma\rangle, \quad (5.7)$$

где спин-угловые квантовые числа $\tilde{\alpha}$ в подсистеме $\{23\}$ соответствуют собственным каналам и отличаются от квантовых чисел α для решеточного базиса (5.6). В частности, вместо углового момента l набор $\tilde{\alpha}$ содержит квантовое число $\varkappa$, т.е. $\tilde{\alpha} = \{\varkappa, s, j_{23}\}$, в то время как, $\alpha = \{lsj_{23}\}$. При этом полное число спин-угловых конфигураций для обоих наборов состояний остается одинаковым.

Состояния $|z_k^\varkappa, \tilde{\alpha}\rangle$ представляют собой пакетный аналог функций рассеяния $|\psi_p^\varkappa, \tilde{\alpha}\rangle$ для гамильтониана h_1 , определенных в представлении собственных каналов.

Как было показано выше, взаимодействующие волновые пакеты можно построить как псевдосостояния, полученные на основе диагонализации матрицы гамильтониана h_1 в базисе свободных волновых пакетов. В этом случае взаимодействующие волновые пакеты отличаются от свободных с помощью матрицы поворота:

$$|z_k^\varkappa, \tilde{\alpha}\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_l O_{ki}^{\varkappa l} |x_i^l, \alpha\rangle, \quad (5.8)$$

где учитываются спин-угловые части волновых функций и используется мульти-индекс $\tilde{\alpha} = \{\varkappa, s, j_{23}\}$.

Теперь в нашем распоряжении есть пакетный базис канального гамильтониана, в котором можно получить аппроксимацию для канальной резольвенты G_1 на основе явных формул (4.26).

5.2.2. Матричный аналог уравнения АГС в пакетном базисе

Спроектируем все операторы в уравнении (5.4) в пакетный базис канального гамильтониана H_1 . При этом каждый оператор, например U , заменяется на его конечномерное представление:

$$\mathfrak{U}^\Gamma = \sum_{\tilde{\alpha}, \beta, \tilde{\alpha}', \beta'} \sum_{k, j, k', j'} |Z_{kj}^{\Gamma\tilde{\alpha}\beta}\rangle \langle Z_{kj}^{\Gamma\tilde{\alpha}\beta}| U |Z_{k'j'}^{\Gamma\tilde{\alpha}'\beta'}\rangle \langle Z_{k'j'}^{\Gamma\tilde{\alpha}'\beta'}|. \quad (5.9)$$

В результате получается матричный аналог уравнения (5.4) (для каждого значения Γ)

$$\mathbf{U} = \mathbf{P}\mathbf{V}_1 + \mathbf{P}\mathbf{V}_1\mathbf{G}_1\mathbf{U}. \quad (5.10)$$

Здесь $\mathbf{V}_1$ и $\mathbf{G}_1$ — матрицы оператора взаимодействия и канальной резольвенты соответственно, их матричные элементы известны в явном виде.

Таким образом, для нахождения амплитуды упругого рассеяния необходимо: 1) вычислить элементы матриц $\mathbf{P}$, $\mathbf{V}_1$, $\mathbf{G}_1$ и 2) решить систему алгебраических уравнений (5.10).

Матрица $\mathbb{V}_1$ потенциала v_1 диагональна по индексам третьего нуклона j, j' и имеет поэтому блочную форму:

$$[\mathbf{V}_1]_{kj, k'j'}^{\tilde{\alpha}\beta, \tilde{\alpha}'\beta'} = \delta_{\beta\beta'} \delta_{jj'} \delta_{ss'} \delta_{j_{23}j'_{23}} \langle z_k^{\varkappa} | v_1 | z_{k'}^{\varkappa'} \rangle_{j_{23}} \quad (5.11)$$

для $\tilde{\alpha} = \{\varkappa, s, j_{23}\}$. Здесь нижний индекс j_{23} у матричного элемента потенциала v_1 означает, что нуклон-нуклонный потенциал зависит от значения полного момента пары. Двухчастичный матричный элемент в правой части (5.11) не зависит от индекса j , относящегося к третьему нуклону. Этот матричный элемент вычисляется с помощью матрицы поворота $\mathbf{O}$, определенной в уравнении (5.8):

$$\langle z_k^{\varkappa} | v_1 | z_{k'}^{\varkappa'} \rangle_{j_{23}} = \sum_{i, i'} O_{ki}^{\varkappa l} O_{k'i'}^{\varkappa' l'} \langle x_i^l | v_1 | x_{i'}^{l'} \rangle_{j_{23}},$$

где $\langle x_i^l | v_1 | x_{i'}^{l'} \rangle_{j_{23}}$ — матричные элементы потенциала в базисе свободных волновых пакетов.

Матрица оператора перестановки в решеточном базисе соответствует перекрыванию базисных функций, определенных для различных наборов Якоби:

$$[\mathbf{P}^0]_{ij, i'j'}^{\alpha\beta, \alpha'\beta'} \equiv \langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} | P | X_{i'j'}^{\Gamma\alpha'\beta'} \rangle = {}_1\langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} | X_{i'j'}^{\Gamma\alpha'\beta'} \rangle_2 + {}_1\langle X_{ij}^{\Gamma\alpha\beta} | X_{i'j'}^{\Gamma\alpha'\beta'} \rangle_3, \quad (5.12)$$

где внешний индекс 1 (или 2 и 3) у базисных функций обозначает набор координат Якоби, к которому они относятся. Такие матричные элементы вычисляются с помощью интегрирования по интервалам дискретизации:

$$[\mathbf{P}^0]_{ij, i'j'}^{\alpha\beta, \alpha'\beta'} = \int_{\mathfrak{D}_{ij}} dp dq \int_{\mathfrak{D}'_{i'j'}} dp' dq' \frac{P_{\alpha\beta, \alpha'\beta'}^{\Gamma}(p, q, p', q')}{\sqrt{d_i d_{i'} d_j d_{j'}}}, \quad (5.13)$$

где штрихи у интервала дискретизации $\mathfrak{D}'_{i'j'}$ показывают, что он относится к другому набору координат Якоби, а функция $P_{\alpha\beta, \alpha'\beta'}^{\Gamma}(p, q, p', q')$ представляет оператор перестановки в импульсном представлении. Это ядро содержит произведение дельта-функции Дирака и две тета-функции Хэвисайда. Однако, благодаря интегрированию по импульсным бинам, эти особенности усредняются и матричные

элементы оператора перекрывания становятся конечными и несингулярными. Описание вычисления элементов матрицы перекрывания дается в работе [92]. Для удобства оно также приводится в Приложении В этой диссертации.

Наконец, матрица перекрывания в канальном пакетном базисе $\mathbf{P}$ получается из матрицы $\mathbf{P}^0$ в решеточном базисе (5.13) с помощью умножения на матрицу поворота $\mathbf{O}$, если использовано приближение (5.8) для взаимодействующих пакетов:

$$\langle Z_{kj}^{\Gamma\tilde{\alpha}\beta} | P | Z_{k'j'}^{\Gamma\tilde{\alpha}'\beta'} \rangle \approx \sum_{ii'} \sum_{l,l'} O_{ki}^{il} O_{k'i'}^{i'l'} [\mathbb{P}^0]_{ij,i'j'}^{\alpha\beta,\alpha'\beta'}. \quad (5.14)$$

Как уже отмечалось выше, это преобразование затрагивает только индексы, относящиеся к NN -подсистеме.

5.3. Амплитуда и сечение упругого рассеяния

Амплитуда упругого рассеяния может быть найдена из диагонального (on-shell) элемента оператора $\mathfrak{U}$ (5.9):

$$A_{\text{el}}^{\Gamma\tilde{\alpha}_0\beta}(q_0) \approx \frac{2m}{3q_0} \frac{\langle Z_{0j_0}^{\Gamma\tilde{\alpha}_0\beta} | \mathfrak{U} | Z_{0j_0}^{\Gamma\tilde{\alpha}_0\beta} \rangle}{\bar{d}_{j_0}}, \quad (5.15)$$

где m — масса нуклона, q_0 — начальный импульс нуклона и $|Z_{1j_0}^{\Gamma\tilde{\alpha}_0\beta}\rangle = |z_1^{\tilde{\alpha}_0}, \bar{x}_{j_0}^\lambda; \tilde{\alpha}_0, \beta, \Gamma\rangle$ — состояние трехчастичного канального базиса, соответствующее начальному состоянию в системе. Здесь $|z_1^{\tilde{\alpha}_0}\rangle$ — связанное состояние NN пары (дейтрон), индекс j_0 определяет on-shell интервал $\bar{\mathfrak{D}}_{j_0}$, к которому относится on-shell импульс q_0 , и $\bar{d}_{j_0}$ — ширина соответствующего импульсного бина дискретизации.

Парциальная S -матрица упругого Nd рассеяния обычно параметризуется с помощью собственных фазовых сдвигов и углов смешивания в представлении полного спина $\Sigma = \mathbf{s} + \boldsymbol{\sigma}$ (здесь σ — спин третьего нуклона). Унитарное преобразование между амплитудами, определенными в представлении полного углового момента I , и амплитудами в Σ -представлении дается матрицей [5]:

$$U_{\lambda'\Sigma',\lambda\Sigma}^J = \sum_{I,I'} \sqrt{\hat{I}'\hat{\Sigma}'} (-1)^{J-I'} \begin{Bmatrix} \lambda' & 1/2 & I' \\ j & J & \Sigma' \end{Bmatrix} \sqrt{\hat{I}\hat{\Sigma}} (-1)^{J-I} \begin{Bmatrix} \lambda & 1/2 & I \\ j & J & \Sigma \end{Bmatrix} U_{\lambda'I',\lambda I}^J. \quad (5.16)$$

Результаты, которые приводятся ниже, получены для трехчастичных конфигураций с полным изоспином $T = 1/2$, при этом учитываются все парные

NN каналы с полным угловым моментом подсистемы $\{23\}$ $j_{23} \leq 3$ (это дает 54 связанных спин-угловых канала в трехчастичном представлении).

На Рис. 5.1 представлено дифференциальное сечение упругого nd рассеяния при энергии падающего нейтрона $E_n = 13$ МэВ для потенциала Nijmegen I [111], полученное в пакетной технике, которое сравнивается с результатами стандартных фаддеевских расчетов. Сечение для этого сравнения восстановлено по парциальным фазовым сдвигам и углам смешивания, приведенным в работе [5] для полного углового момента $J \leq 7/2$. Кривые, полученные в двух подходах, практически не отличимы.

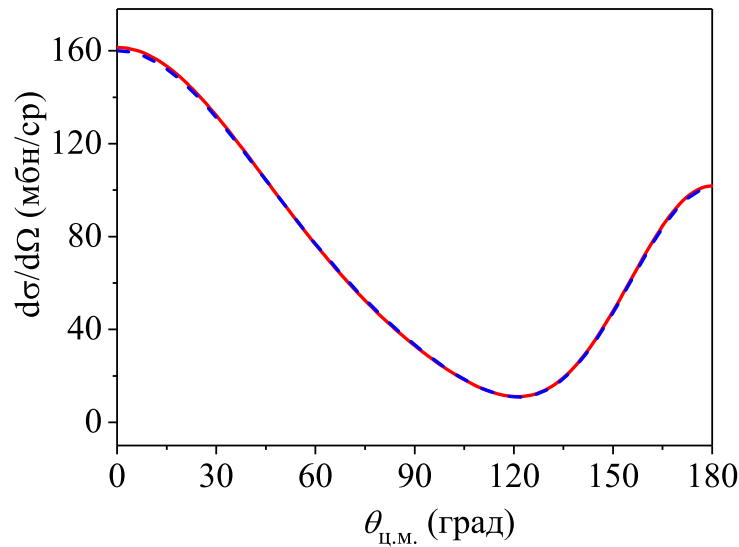


Рисунок 5.1. Дифференциальное сечение упругого nd рассеяния при энергии 13 МэВ, полученные в пакетном подходе (сплошная кривая) и на основе стандартных фаддеевских расчетов [5] (штриховая кривая) для потенциала Nijmegen I.

На Рис. 5.2 приводятся дифференциальные сечения упругого nd рассеяния для того же NN потенциала Nijmegen I [111], найденные в пакетной технике для двух различных энергий падающих нейтронов в сравнении с экспериментальными данными из работы [158]. Видно очень хорошее согласие расчетов с экспериментальными данными.

На Рис. 5.3 приводится сравнение с экспериментальными данными дифференциального сечения упругого nd рассеяния и векторной анализирующей способности нейтронов A_y при энергии падающих нейтронов 35 МэВ, полученных в пакетной технике. Здесь использовались пакетные базисы, построенные на сетках Чебышева (А.2) по импульсам p и q размерности $N \times \bar{N} = 100 \times 100$. Максимальное

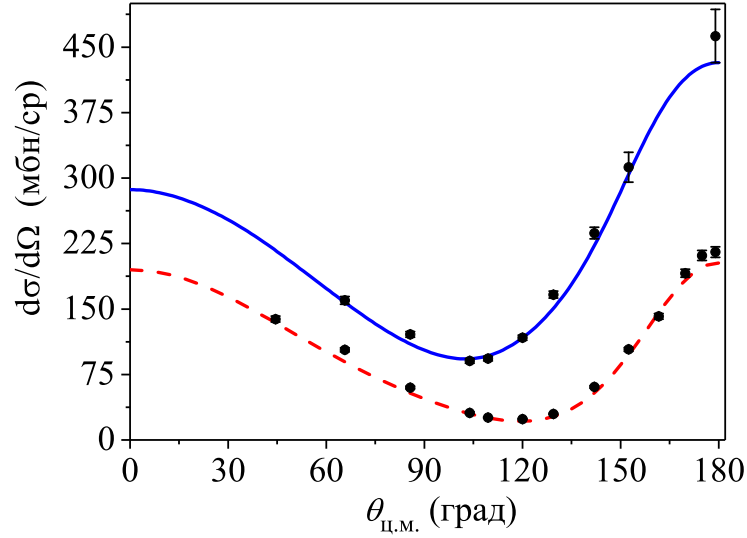


Рисунок 5.2. Дифференциальное сечение упругого nd рассеяния для NN потенциала Nijmegen I при энергии падающего нейтрона $E_n = 3$ МэВ (сплошная кривая) и $E_n = 9$ МэВ (штриховая кривая) в сравнении с экспериментальными данными (точки) из работы [158].

значение полного углового момента, использовавшееся в расчетах, составило $J \leq 17/2$.

Таким образом, благодаря развитому подходу, удалось получить полное решение фадеевской задачи в трехчастичном нормированном базисе выше порога трехчастичного развала. При этом схема решения близка к той, что используется для нахождения связанных состояний.

Схема расчета оказалось достаточно экономичной. Полный расчет парциальных амплитуд для одного полного углового момента J и определенной четности представляет решение системы 54 связанных уравнений на базисе размерности 10^4 и занимает порядка 7 минут на обычном ПК с процессором частотой 3.50GHz и 32 Гб оперативной памяти.

Отличительной особенностью этой схемы является возможность распараллеливания высокого уровня с использованием графических карт, которое было сделано В.Н. Померанцевым в работах [92, 93].

Далее будет показано, что предложенный подход позволяет также находить и амплитуду развала.

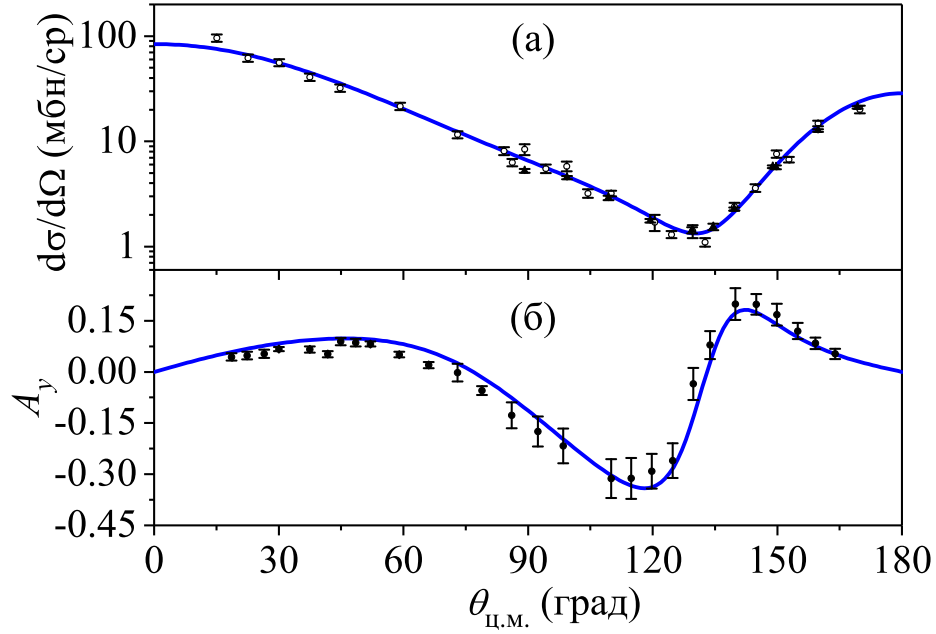


Рисунок 5.3. Дифференциальное сечение упругого nd рассеяния (а) и нейтронная векторная анализирующая способность A_y (б) при энергии падающих нейтронов 35 МэВ, полученные на основе пакетной техники (сплошная кривая). Экспериментальные данные взяты из следующих работ: pd данные при 35 МэВ [159] (темные круги), nd данные при 36 МэВ [160] (пустые круги), а также nd данные при 35 МэВ [161] (треугольники).

5.4. nd развал в пакетной технике

Для простоты в этом разделе будет рассмотрен случай, когда NN взаимодействие включает только S -волны. В этом случае индексы α , β и Γ из уравнения (4.7) включают только спиновые квантовые числа. Поэтому в качестве индекса α здесь удобно использовать спин NN пары s , принимающий значения 0 или 1, а индекс β можно и вовсе опустить, так как спин третьего нуклона равен $\frac{1}{2}$. Набор квантовых чисел трехчастичной системы Γ сводится к полному спину, который принимает значения $\Sigma = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$, также полный спин совпадает с полным угловым моментом и сохраняется.

5.4.1. Однокомпонентная амплитуда развала

В традиционном подходе амплитуда развала для одной фаддеевской компоненты полной трехчастичной функции (так называемая однокомпонентная амплитуда) находится из матричного элемента оператора U после действия на него слева

оператором tG_0 :

$$T^{\Sigma s}(p, q) = \frac{\langle p, q, \Sigma s | tG_0 U | z_1, q_0, \Sigma \rangle}{pq q_0}. \quad (5.17)$$

Здесь в правой обкладке стоит функция начального состояния, а в левой — функции свободного движения, отвечающие состояниям развала. Однако такое представление не совсем удобно, поскольку в качестве базисного пространства в пакетной технике используются собственные состояния канального гамильтониана H_1 , а не свободного H_0 . Поэтому желательно представить амплитуду (5.17) как матричный элемент некоторого оператора по состояниям канального базиса.

В этом случае развал дейтрона трактуется как его возбуждение в состояние континуума гамильтониана h_1 . Следует отметить, что такая трактовка используется в методе CDCC для описания процессов развала [49]. Также такой подход близок к рассмотрению процесса развала при решении уравнений Фаддеева в конфигурационном пространстве.

Действительно, при решении трехчастичных уравнений Фаддеева в конфигурационном пространстве [145, 156, 157] предметом поиска является амплитуда $\mathcal{A}(\theta)$, которая определяет асимптотическое поведение трехчастичной волновой функции в гиперсферических координатах $\rho = \sqrt{x^2 + \frac{4}{3}y^2}$ и $\vartheta = \arctan(\frac{2y}{\sqrt{3}x})$ следующим образом [163]:

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{A}(\theta)}{(K\rho)^{5/2}}, \quad K = \sqrt{p^2 + \frac{3}{4}q^2}, \quad (5.18)$$

где x и y — координаты Якоби, и K — гиперимпульс.

Эта амплитуда развала определяется для каждой спин-угловой конфигурации и связана с парциальной однокомпонентной амплитудой развала (5.17) следующим образом:

$$\mathcal{A}^{\Sigma s}(\theta) = \frac{4\pi m}{3\sqrt{3}} q_0 K^4 e^{i\pi/4} T^{\Sigma s}(p, q), \quad \theta = \arctan\left(\frac{\sqrt{3}q}{2p}\right) \quad (5.19)$$

где θ — гиперугол в импульсном представлении.

Если теперь преобразовать формулы для амплитуды развала $\mathcal{A}$ из [156] в интегральный вид, получится следующее определение амплитуд развала в импульсном гиперсферическом представлении:

$$\mathcal{A}^{\Sigma s}(\theta) = \frac{4\pi m}{3\sqrt{3}} \frac{K^4}{pq} e^{i\pi/4} \langle z_1, q_0, \Sigma | U | \psi_p^{s(+)} , q, \Sigma \rangle, \quad (5.20)$$

где $|\psi_p^{s(+)}\rangle$ — функция рассеяния для гамильтониана h_1 , отвечающая граничному условию в виде расходящейся сферической волны. Эти функции отличаются от

вещественных функций (стоячих волн) $|\psi_p^\alpha\rangle$, которые используются в пакетной технике, фазовым множителем:

$$|\psi_p^{s(+)}\rangle = e^{i\delta_s(p)}|\psi_p^s\rangle, \quad (5.21)$$

где $\delta_s(p)$ — S -волновой парциальный фазовый сдвиг NN рассеяния в канале со спином s .

Таким образом, используя уравнения (5.20) и (5.19), можно получить альтернативную формулу к (5.17) для *однокомпонентной* амплитуды развала в виде матричного элемента оператора перехода в представлении собственных функций канального гамильтониана H_1 :

$$T^{\Sigma s}(p, q) = e^{i\delta_s(p)} \frac{\langle z_1, q_0, \Sigma | U | \psi_p^s, q, \Sigma \rangle}{pq q_0}. \quad (5.22)$$

В результате, амплитуды развала могут быть найдены из матричных элементов той же самой матрицы оператора перехода U , что и амплитуда упругого рассеяния.

Подставим теперь конечномерный оператор $\mathfrak{U}^\Sigma$ в выражение для амплитуды развала и получим выражение для однокомпонентной амплитуды в пакетном базисе:

$$T^{\Sigma s}(p, q) \approx e^{i\delta(p_k^*)} \frac{\mathbf{T}_{1j_0, kj}^{\Sigma s}}{p_k^* q_j^* q_0},$$

$$\mathbf{T}_{1j_0, kj}^{\Sigma s} \equiv \frac{\langle Z_{1j_0}^{\Sigma 1} | \mathfrak{U}^\Sigma | Z_{kj}^{\Sigma s} \rangle}{\sqrt{\bar{d}_{j_0} d_k^s \bar{d}_j}}, \quad \begin{aligned} q_0 &\in \bar{\mathfrak{D}}_{j_0}, \\ q &\in \bar{\mathfrak{D}}_j, \\ p &\in \Delta_k^s, \end{aligned} \quad (5.23)$$

где $p_k^* = \sqrt{2m\epsilon_k^{*s}}$ и $q_j^* = \frac{1}{2}[q_{j-1} + q_j]$ — средние импульсы для интервалов Δ_k^s и $\bar{\mathfrak{D}}_j$ соответственно и d_k^s — импульсная ширина бина Δ_k^s .

Здесь, однако, возникает проблема определения состояний канального базиса $Z_{kj}^{\Sigma s}$, отвечающих состояниям развала на массовой поверхности. Из-за дискретизации спектра каждое состояние базиса сопоставляется с дискретной энергией $E_{kj}^s = \epsilon_k^{*s} + \mathcal{E}_j^*$. Все эти энергии немного отличаются друг от друга и не совпадают строго с on-shell энергией E . Другими словами, закон сохранения энергии выполняется для трехчастичных пакетных состояний только приблизительно с точностью до ширин соответствующих бинов. Для того, чтобы обойти эту трудность, далее используется процедура усреднения по энергии для элементов оператора перехода, которая вполне естественна для дискретизованного по энергии представления.

5.4.2. Процедура усреднения для амплитуд развала.

Если записать выражение (5.22) для амплитуды развала через волновые функции парной подсистемы, нормированные на δ -функцию по энергии, то для его вычисления понадобятся матричные элементы следующего вида:

$$u(E, \varepsilon) = \langle z_1, \psi_0(E - \varepsilon_0^*) | U | \psi(\varepsilon) \psi_0(E - \varepsilon) \rangle, \quad (5.24)$$

где $|\psi(\varepsilon)\rangle$ — состояние двухчастичного гамильтониана h_1 с энергией ε , $|\psi_0(E - \varepsilon)\rangle$ — волновая функция гамильтониана h_0^1 , описывающая свободное движение третьего нуклона относительно NN подсистемы и E — полная энергия в с.ц.м. Для техники дискретизации вполне естественно применить усреднение по энергии для матричных элементов $u(E, \varepsilon)$ по энергиям возбуждения ε , что приводит к следующим интегралам:

$$u_n(E) \equiv \frac{1}{\Delta_n} \int_{\varepsilon_{n-1}}^{\varepsilon_n} d\varepsilon \langle z_1, \psi_0(E - \varepsilon_0^*) | U | \psi(\varepsilon) \psi_0(E - \varepsilon) \rangle, \quad (5.25)$$

где $\{[\varepsilon_{n-1}, \varepsilon_n]\}$ — некоторый набор интервалов, в общем случае не зависящий от начального разбиения энергий возбуждения ε , а $\Delta_n = \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}$ — соответствующие ширины.

Заменяя далее точный оператор U его пакетным конечномерным аналогом (5.9) и используя правила проектирования для возмущенных и свободных ВП, получаем следующую формулу:

$$\mathbb{T}_n^{\Sigma s}(E) = \sum_{kj} \mathbb{T}_{1j_0, kj}^{\Sigma s} \frac{1}{\Delta_n} [\min(\varepsilon_n, \varepsilon_k, E - \bar{\varepsilon}_{j-1}) - \max(\varepsilon_{n-1}, \varepsilon_{k-1}, E - \bar{\varepsilon}_j)]. \quad (5.26)$$

Здесь сумма ведется по всем индексам k и j , для которых разность в квадратных скобках положительна.

Далее для однокомпонентной амплитуды получается следующее выражение по элементам $\mathbb{T}_n$:

$$T^{\Sigma s}(p_n^*, q_n^*) \approx e^{i\delta(p_n^*)} \frac{\mathbb{T}_n^{\Sigma s}}{p_n^* q_n^* q_0}, \quad \begin{aligned} p_n^* &= \sqrt{m\varepsilon_n^*}, \\ q_n^* &= \sqrt{\frac{4}{3}m(E - \varepsilon_n^*)}, \\ \varepsilon_n^* &= \frac{1}{2}[\varepsilon_{n-1} + \varepsilon_n]. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Используя теперь усредненные по энергии амплитуды, легко выразить амплитуду развала в гиперсферическом представлении через “пакетную” амплитуду:

$$\mathcal{A}_n^{\Sigma s}(\theta) = \frac{4\pi m}{3\sqrt{3}} \frac{K^4}{p_n^* q_n^*} e^{i\delta(p_n^*)} \mathbb{T}_n^{\Sigma s}, \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{\varepsilon_n^*}{E}}. \quad (5.28)$$

5.4.3. Вычисление амплитуд развала

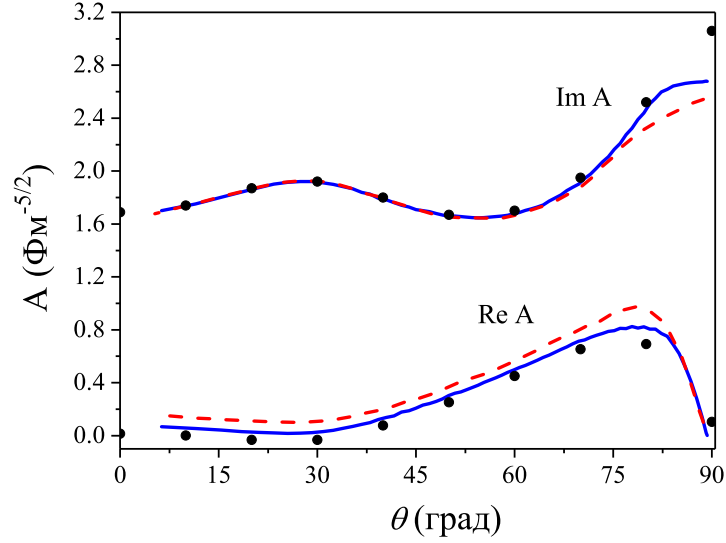


Рисунок 5.4. Амплитуды развала $\mathcal{A}^{\frac{3}{2}1}$ для спин-квартетного канала, вычисленные на основе пакетной техники для NN взаимодействия MT I-III при размерности базиса $M = N = 100$ (штриховые кривые) и $M = N = 200$ (сплошные кривые) в сравнении с результатами тестовых расчетов из работы [163] (кружки).

Рассмотрим амплитуды развала для полуреалистического потенциала Малфлие–Тьона MT I-III NN , который часто используется для тестирования расчетов в трехчастичной задаче [163]. Для пакетного базиса используется двумерная сетка Чебышева типа (A.2) по импульсам.

Результаты расчета однокомпонентных гиперсферических амплитуд $\mathcal{A}^{\Sigma s}$ представлены на Рисс. 5.4 и 5.5 в сравнении с реперными результатами работы [163]. Из этих рисунков получается вполне хорошее согласие с результатами сравнительных расчетов [163] за исключением области $\theta = \arctan \frac{\sqrt{3}q}{2p} \sim 90^\circ$, отвечающей малым относительным импульсам вылетающих нейтронов. Следует отметить, что амплитуда $\mathcal{A}$ из уравнения (5.28) имеет дополнительный множитель, обратно пропорциональный относительному импульсу p по сравнению с амплитудой $\mathbb{T}$.

Похожие проблемы при $\theta \sim 90^\circ$ наблюдались в работах других групп [145, 156, 157], в которых расчеты амплитуд развала проводились в конфигурационном пространстве. В работе [157] было показано, что для аккуратного вычисления амплитуд развала при малых относительных импульсах p необходимо использовать

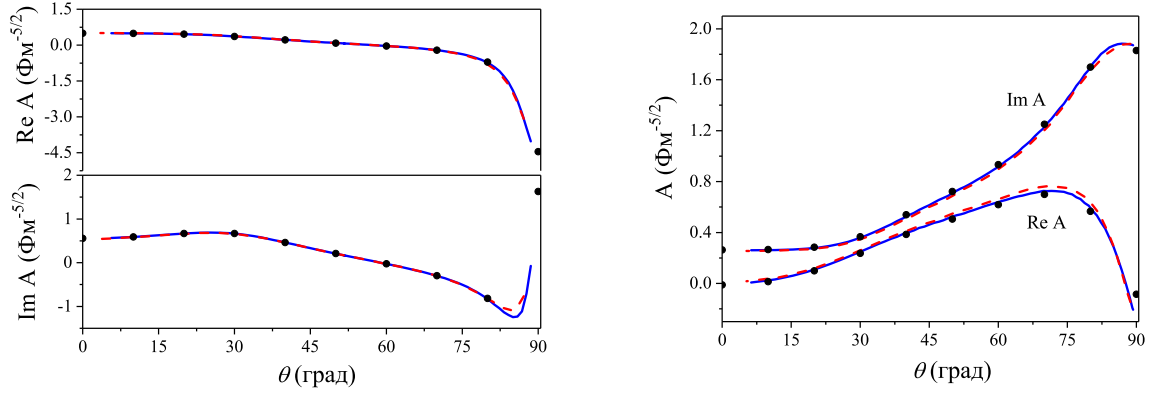


Рисунок 5.5. Амплитуды развала $\mathcal{A}_{\frac{1}{2}^0}$ (слева) и $\mathcal{A}_{\frac{1}{2}^1}$ (справа) для спин-дублетного канала. Обозначения такие же, как на Рис. 5.4.

явные интегральные формулы для амплитуды $T(p, q)$. Следует упомянуть здесь результаты работы [164], в которой представлен аккуратный метод расчета для этой области.

В пакетном подходе расхождение амплитуд развала и точных расчетов при очень низких относительных импульсах (особенно для квартетных амплитуд) может быть связано с неточностями в определении ширин и средних значений импульсов для пакетных состояний в парном континууме очень близко к порогу (первые бины). Поэтому случай очень малых относительных импульсов требует отдельного исследования.

5.4.4. Сечение развала

Полная амплитуда развала состоит из вкладов всех трех фаддеевских компонент. Она записывается с помощью оператора перестановки P :

$$A_{\text{br}}^{\text{tot}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \mathbf{q}_0) = \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} | (1 + P) t G_0 U | z_1, \mathbf{q}_0 \rangle. \quad (5.29)$$

Дифференциальное сечение развала связано с этой амплитудой следующим образом [5]:

$$\frac{d^5 \sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_1 d\hat{\mathbf{k}}_2 dS} = (2\pi)^4 \frac{2m}{3q_0} \bar{k}_S |A_{\text{br}}^{\text{tot}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \mathbf{q}_0)|^2. \quad (5.30)$$

Здесь $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ — импульсы регистрируемых частиц, S — длина дуги кинематической кривой и $\bar{k}_S$ — объем фазового пространства, определяемый как:

$$\bar{k}_S = \frac{m^2 k_1 k_2}{\sqrt{\left(\frac{2k_2 - \hat{\mathbf{k}}_2(\mathbf{k}_{\text{lab}} - \mathbf{k}_1)}{k_2}\right)^2 + \left(\frac{2k_1 - \hat{\mathbf{k}}_1(\mathbf{k}_{\text{lab}} - \mathbf{k}_2)}{k_1}\right)^2}}, \quad (5.31)$$

где $\mathbf{k}_{\text{lab}} = \frac{3}{2}\mathbf{q}_0$ — начальный импульс нуклона в лабораторной системе.

В случае S -волнового NN взаимодействия полная амплитуда развала определяется из суммы квартетных ($\Sigma = \frac{3}{2}$) и дублетных ($\Sigma = \frac{1}{2}$) однокомпонентных вкладов для всех трех наборов импульсов Якоби. Например, S -волновая амплитуда вылета двух нейтронов представляется в виде суммы трех слагаемых [81]:

$$|A_{\text{br}}^{\text{tot}}|^2 = (2|M^{\frac{3}{2}1}|^2 + |M^{\frac{1}{2}0}|^2 + |M^{\frac{1}{2}1}|^2)/3, \quad (5.32)$$

где $M^{\Sigma s}$ — полные амплитуды для каналов с определенными значениями полного и двухчастичного спинов Σ и s соответственно. Согласно [162], эти полные амплитуды выражаются через одночастичные амплитуды для разных наборов Якоби (p_a, q_a) следующим образом (здесь предполагается, что вылетающие нейтроны — это частицы 1 и 2, а протон — это частица 3):

$$\begin{aligned} M^{\frac{3}{2}1} &= T^{\frac{3}{2}1}(p_1, q_1) - T^{\frac{3}{2}1}(p_2, q_2), \\ M^{\frac{1}{2}0} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{1}{4} [T^{\frac{1}{2}0}(p_1, q_1) + T^{\frac{1}{2}0}(p_2, q_2)] - \right. \\ &\quad \left. \frac{3}{4} [T^{\frac{1}{2}1}(p_1, q_1) + T^{\frac{1}{2}1}(p_2, q_2)] + T^{\frac{1}{2}0}(p_3, q_3) \right\}, \\ M^{\frac{1}{2}1} &= \frac{1}{2} \left\{ T^{\frac{1}{2}0}(p_1, q_1) - T^{\frac{1}{2}0}(p_2, q_2) + T^{\frac{1}{2}1}(p_1, q_1) - T^{\frac{1}{2}1}(p_2, q_2) \right\}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Окончательно, дифференциальное сечение nd развала выражается через полную парциальную амплитуду (5.32) как:

$$\frac{d^5\sigma}{d\hat{k}_1 d\hat{k}_2 dS} = \frac{\pi}{4} \frac{2m}{3q_0} \bar{k}_S |A_{\text{br}}^{\text{tot}}|^2. \quad (5.34)$$

Таким образом, для того, чтобы получить дифференциальное сечение вылета двух нейтронов, необходимо вычислить элементы $\mathbb{T}_n$ (5.26) для каждой компоненты (Σs) полной амплитуды развала и затем подставить их в явные формулы (5.33) и (5.32).

Дифференциальные сечения вылета двух нейтронов для двух кинематических конфигураций при энергии падающего нейтрона $E_n = 42$ МэВ представлены на Рисс. 5.6 и 5.7. Снова результаты сравниваются с результатами работы [163]. Одна из конфигураций включает пик, отвечающий взаимодействию в конечном состоянии (ВКС), в то время как второе сечение соответствует звездному распаду. Для вычисления сечений из работы [163] использовались данные для однокомпонентных амплитуд, приведенные в этой работе.

Следует отметить, что, несмотря на отличия в пакетных и точных амплитудах при малых относительных импульсах, которые дают в основном вклад в пик ВКС,

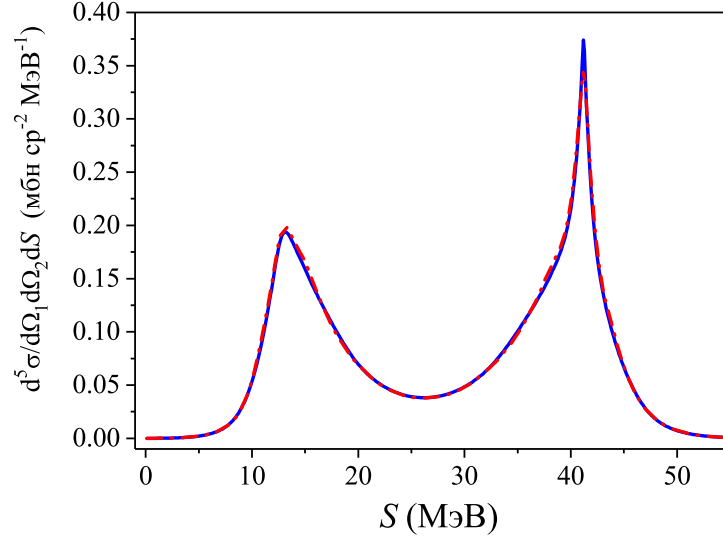


Рисунок 5.6. Дифференциальное сечение вылета двух нейтронов в кинематической конфигурации: $\theta_1 = 45^\circ$, $\theta_2 = 60.54^\circ$, $\phi_{12} = 180^\circ$ при энергии падающего нейтрона $E_{\text{lab}} = 42$ МэВ, найденное на основе пакетной техники (штрих-пунктирная кривая) и стандартных фадеевских расчетов (сплошная кривая).

согласие между дифференциальными сечениями, представленными на Рис. 5.6, вполне хорошее. Это получилось еще и потому, что основной вклад в полное сечение дает дублетная амплитуда, в то время как наиболее “проблемная” квартетная амплитуда не дает здесь существенного вклада. Также на Рис. 5.7 можно увидеть небольшие осцилляции в сечениях, найденных в пакетной технике, которые, по-видимому, вызваны неточностями процедуры усреднения для пакетных амплитуд.

В целом, как уже было отмечено выше, согласие между стандартными расчетами и расчетами на основе формализма стационарных волновых пакетов очень хорошее — кривые на Рис. 5.6 и 5.7 с трудом отличимы.

5.5. Обсуждение результатов

В этой главе была продемонстрирована эффективность пакетного подхода для решения задачи $3N$ рассеяния. Впервые расчеты были выполнены на основе интегральных уравнений спроектированных в трехчастичный L_2 базис. Ключевым звеном подхода является конечномерное представление для канальной резольвенты. При этом численная схема решения близка к той, что используется для решения задач

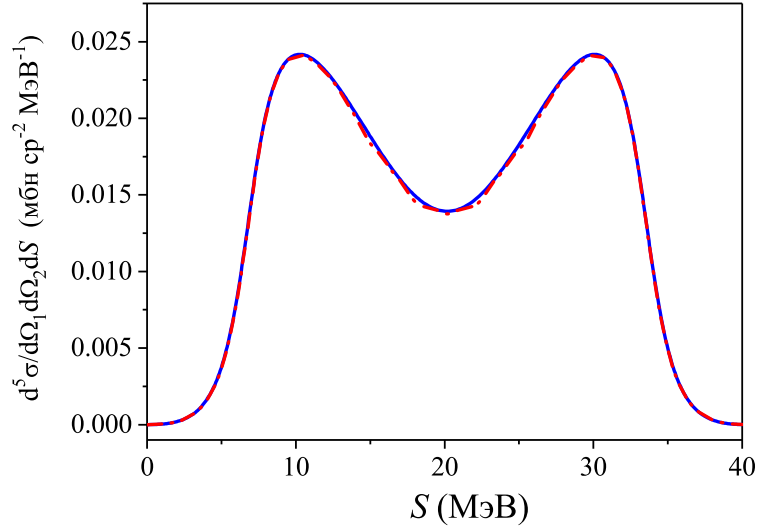


Рисунок 5.7. То же, что и на Рис. 5.6, для кинематической конфигурации $\theta_1 = 53.6^\circ$, $\theta_2 = 53.6^\circ$, $\phi_{12} = 120^\circ$.

на связанные состояния систем. Такая численная схема допускает распараллеливание, что было сделано В.Н. Померанцевым в работе [93].

Вместе с тем подход требует дальнейшего усовершенствования для описания амплитуд развала при малых относительных импульсах вылетающих частиц. Также следует включить в рассмотрение трехчастичные силы. Такие исследования планируются автором в ближайшее время. Следует отметить, что в пакетной технике также был развит эффективный формализм для расчетов с сепарабельным потенциалом NN взаимодействия, детали этого формализма приводятся в работах [75, 81].

Важным предметом дальнейших исследований является возможность использования других L_2 базисов для трехчастичных расчетов в континууме. Например, здесь был бы удобен трехчастичный гауссов базис, для которого перекрывания базисных функций, определенных в различных наборах Якоби, вычисляются аналитически.

Результаты, вошедшие в эту главу, опубликованы в работах [75, 81, 85].

Глава 6. Динамическое описание прямых ядерных реакций в пакетном представлении

6.1. Вводные замечания

Большая часть процессов, рассматриваемых в ядерной физике, относится к области прямых ядерных реакций. В настоящее время появилось много новых экспериментальных данных по рассеянию протонно- и нейтронно-избыточных ядер, гало-ядер и др., при описании которых необходимо учитывать конфигурации с несколькими частицами в непрерывном спектре. К области прямых ядерных реакций относятся и многие процессы, важные для астрофизики.

Вместе с тем, такие задачи имеют свою специфику и могут быть описаны на основе формализма теории рассеяния для малочастичных систем только приближенно. Источником проблем является сильное кулоновское взаимодействие между участвующими в реакции фрагментами, а также сложная внутренняя структура сталкивающихся частиц. В результате, подходом, обеспечивающим здесь наиболее точное решение, является метод связанных каналов дискретизованного континуума (CDCC) [39–49], основанный на редукции исходной задачи нескольких тел к системе связанных каналов (ССК). Для реакций передачи (d,p) также распространен адиабатический подход (ADWA) [167]. Методы такого типа используют, как правило, координатное представление, поэтому здесь возникают дополнительные трудности при учете нелокальных взаимодействий.

Формализм волновых пакетов и удобное представление для канальной резольвенты позволяют находить амплитуды рассеяния в этой области на основе решения интегральных уравнений. Ниже будут рассмотрены два приложения пакетной техники. Во первых будет исследована применимость многоканальной редукции. Следует отметить, что редукция к ССК является наиболее распространенным методом решения квантовых задач рассеяния составных частиц не только в ядерной физике, но и в атомной, и молекулярной. Если абстрагироваться от некоторых особенностей методов, использующих ССК, все они во многом схожи, поскольку используют некоторый конечный L_2 -базис для представления возбуждений частицы снаряда или мишени в промежуточный континуум. В этом смысле непрерывный спектр частицы

снаряда и/или мишени дискретизуется. Энергетическое поведение упругих амплитуд рассеяния было детально исследовано в приложениях атомной физики [52, 53], где было показано, что такая дискретизация ведет к наличию нефизических резонансов в трехчастичном спектре вблизи энергий псевдопорогов. Ниже будет исследована применимость многоканальной редукции в описании прямых ядерных реакций на примере метода CDCC.

Во второй части этой главы приводятся результаты сравнительных расчетов амплитуд рассеяния дейтронов на ядре ^{58}Ni для пакетного подхода и метода CDCC. Также в этой части развивается формализм для построения эффективных потенциалов взаимодействия составных частиц.

6.2. Рассеяние составной частицы на бесструктурной мишени

Рассмотрим систему, состоящую из двухфрагментной частицы $\{bc\}$ и бесструктурного ядра A . Будем считать, что массы фрагментов b и c одинаковы (имея в виду дейтрон), однако, весь формализм подходит и для случая фрагментов разной массы.

Гамильтониан, описывающий рассеяние составной частицы на ядре можно записать в следующем виде:

$$H = h_{bc}(\mathbf{r}) + h_C(\mathbf{R}) + V_{b-A}(E_{\text{lab}}/2) + V_{c-A}(E_{\text{lab}}/2) + \Delta V_C, \quad (6.1)$$

где h_{bc} — двухчастичный гамильтониан, учитывающий взаимодействие фрагментов b и c друг с другом и действующий по координате их относительного движения $\mathbf{r}$, h_C — двухчастичный гамильтониан, учитывающий кулоновское взаимодействие (точечное) частицы $\{bc\}$ как целого с мишенью A и действующий по переменной центра масс составной частицы $\mathbf{R}$, V_{c-A} и V_{b-A} — оптические потенциалы взаимодействия фрагментов с мишенью. Эти взаимодействия задаются оптическими потенциалами и, вообще говоря, зависят от энергии. Ниже будет использовано общепринятое приближение, когда такие потенциалы берутся при энергии равной половине энергии падающей частицы E_{lab} (для случая фрагментов с равными массами). Наконец, ΔV_C — добавочное короткодействующее кулоновское взаимодействие (действующее по координате центра масс), связанное с конечным радиусом ядра мишени (т.е с распределением заряда).

Полная волновая функция системы с гамильтонианом (6.1) удовлетворяет трехчастичному уравнению Шредингера:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (6.2)$$

где E — полная энергия. Благодаря наличию мнимых частей оптических потенциалов, в подсистемах $\{bA\}$ и $\{cA\}$ нет связанных состояний, поэтому каналами перестройки здесь обычно пренебрегают [168, 171].

6.2.1. Метод редукции к системе связанных каналов

При редукции к системе связанных каналов полная трехчастичная волновая функция гамильтониана (6.1) разлагается по некоторому L_2 -базису $\{|z_i\rangle\}_{i=0}^{N_{\text{eff}}-1}$, отвечающему внутреннему гамильтониану взаимодействия фрагментов падающей частицы h_{bc} и включающему связанное состояние $|z_0\rangle$ и набор псевдосостояний континуума, таким образом, что

$$\langle z_i|h_{bc}|z_j\rangle = \delta_{ij}\epsilon_i^*, \quad (6.3)$$

где ϵ_i^* — соответствующие собственные энергии (полная размерность базиса равна N_{eff}). Такой базис может быть построен, например, из диагонализации матрицы субгамильтониана h_{bc} в некотором L_2 -базисе. Также в качестве такого базиса могут быть выбраны стационарные волновые пакеты для гамильтониана h_{bc} , дополненные его функцией связанного состояния.

Обычно при редукции к ССК волновая функция системы раскладывается по базису $\{z_i(\mathbf{r})\}$ в координатном представлении:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{i=0}^{N_{\text{eff}}-1} z_i(\mathbf{r})\chi_i(\mathbf{R}), \quad (6.4)$$

где $\mathbf{r}$ — координата внутреннего движения частицы-снаряда, а $\mathbf{R}$ — координата движения ее центра масс относительно мишени. В уравнении (6.4) коэффициенты разложения $\chi_i(\mathbf{R})$ имеют смысл функций относительного движения в многоканальной задаче.

После подстановки разложения (6.4) в уравнение Шредингера, получается система связанных уравнений для функций χ_i (с учетом разложения по парциальным волнам):

$$\left[\frac{1}{2M} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{L_i(L_i + 1)}{R^2} \right) + (E - \epsilon_i^*) \right] \chi_i(R) = \sum_k W_{ik}(R)\chi_k(R), \quad i = 0, \dots, N_{\text{eff}} - 1 \quad (6.5)$$

где M — приведенная масса системы снаряда и мишени, L_i — орбитальный угловой момент относительного движения снаряда относительно мишени в канале i и $W_{ik}(R)$ — потенциалы связи:

$$W_{ik}(R) = \langle z_i | V_{bA} \left(\left| \mathbf{R} + \frac{1}{2} \mathbf{r} \right| \right) + V_{bA} \left(\left| \mathbf{R} - \frac{1}{2} \mathbf{r} \right| \right) + \Delta V_C | z_k \rangle. \quad (6.6)$$

Граничные условия при $R \rightarrow \infty$ для функций $\chi_i(R)$ — это обычные падающие и расходящиеся волны для открытых каналов ($E - \epsilon_i^* > 0$):

$$\chi_i(R) \rightarrow h_L^{(-)}(P_0 R) \delta_{i0} - \sqrt{\frac{P_i}{P_0}} h_L^{(+)}(P_i R) S_{i0}, \quad (6.7)$$

где $P_i = \sqrt{2m(E - \epsilon_i^*)}$, $h_L^{(\pm)}(x)$ — сферические функции Риккати–Ганкеля и $\{S_{i0}\}$ — соответствующие элементы S -матрицы. Здесь предполагается, что падающая волна есть только в упругом канале 0. Размерность S -матрицы при данной энергии E равна числу открытых каналов (остальные элементы матрицы S в выражении (6.7) не имеют прямого физического значения). Также для полного решения нужно учесть закрытые каналы ($E - \epsilon_i^* < 0$), в которых асимптотические функции экспоненциально убывают.

Таким образом, полная многоканальная S -матрица получается из “сшивки” решения уравнения (6.5) с регулярным граничным условием в нуле $\chi_i(0) = 0$ с асимптотическими функциями (6.7) при $R = R_0$ (R_0 — граница области взаимодействия).

Трактовка закрытых каналов представляет в общем достаточно сложную численную проблему, поскольку здесь возникают экспоненциально растущие решения наряду с убывающими (физическими), что приводит к неустойчивости и неточности численного решения уравнений ССК (6.5). Поэтому для корректного учета закрытых каналов нужно использовать дополнительные техники, такие, например, как метод матричного продолжения [170].

6.2.2. Интегральный формализм

В случае, когда каналы перестройки отсутствуют, трехчастичная волновая функция системы может быть найдена из решения трехчастичного интегрального уравнения Липпмана–Швингера (УЛШ):

$$|\Psi(E)\rangle = |\Psi_0(E)\rangle + G_{\text{ch}}(E) \bar{V}_{bc} |\Psi(E)\rangle, \quad (6.8)$$

где $\bar{V} \equiv V_{b-A} + V_{c-A} + \Delta V_C$ — так называемое внешнее взаимодействие. Здесь функция начального состояния $|\Psi_0(E)\rangle \equiv |z_0, \psi^C(E - \epsilon_0^*)\rangle$ описывает движение частицы $\{bc\}$ как целого в кулоновском поле ядра, а дальнедействующая часть точечного кулоновского взаимодействия включена в резольвенту $G_{\text{ch}} = [E + i0 - h_C - h_{bc}]^{-1}$ канального гамильтониана, определяющего асимптотические состояния в системе. Оператор $G_{\text{ch}}(E)$ является сверткой соответствующих двухчастичных резольвент $g_{bc}(\epsilon) = [\epsilon + i0 - h_{bc}]^{-1}$ и $g_C(\epsilon) = [\epsilon + i0 - h_C]^{-1}$ и может быть найден в пакетной технике на основе формализма, предложенного в главе 4.

Для нахождения наблюдаемых вместо уравнения для волновой функции (6.8) здесь можно решить интегральное УЛШ напрямую для оператора перехода T , описывающего упругое рассеяние частицы на ядре, а также ее развал на фрагменты [74]:

$$T(E) = \bar{V} + \bar{V} G_{\text{ch}}(E) T(E). \quad (6.9)$$

Если далее использовать полюсное приближение для резольвенты g_{bc} (т.е. считать, что спектр гамильтониана h_{bc} чисто дискретный):

$$g_{bc}(\epsilon) \approx \sum_{i=0}^{N_{\text{eff}}-1} \frac{|z_i\rangle \langle z_i|}{\epsilon - \epsilon_i^*}, \quad (6.10)$$

где $|z_i\rangle$ и ϵ_i^* — собственные состояния и собственные энергии матрицы гамильтониана h_{bc} в двухчастичном базисе (6.3) (включая связанное состояние), то трехчастичное УЛШ (6.9) сводится к связанным двухчастичным уравнениям. В результате полюсного приближения (6.10) получается следующее представление для трехчастичной канальной резольвенты G_{ch} (вместо точных выражений (4.24) и (4.25)):

$$G_{\text{ch}}^{PC}(E) \approx \sum_{i=0}^{N_{\text{eff}}-1} \int_0^\infty \frac{|z_i, \psi^C(\mathcal{E})\rangle \langle z_i, \psi^C(\mathcal{E})|}{E + i0 - \epsilon_i^* - \mathcal{E}} d\mathcal{E}, \quad (6.11)$$

где каждое слагаемое суммы имеет тот же вид, что и ВС часть резольвенты. Будем далее называть такое приближение Pseudostate–Continuum (PC) связью.

Легко видеть, что после подстановки представления (6.11) в УЛШ для волновой функции (6.8) это уравнение сводится к набору двухчастичных связанных интегральных уравнений

$$|\chi_i(E)\rangle = |\psi^C(E - \epsilon_0^*)\rangle \delta_{i0} + \sum_k g_C(E - \epsilon_i^*) W_{ik} |\chi_k(E)\rangle, \quad i = 0, \dots, N_{\text{eff}} - 1, \quad (6.12)$$

где потенциалы связи W_{ik} те же, что в формуле (6.6). Нетрудно показать, что система (6.12) эквивалентна системе дифференциальных уравнений (6.5) с граничными условиями (6.7).

6.2.3. Уравнение для оператора перехода в пакетном представлении

Трехчастичное уравнение (6.9) для оператора перехода может быть решено в пакетной технике на основе дискретизации спектров двух субгамильтонианов h_{bc} и h_C . При этом, спектры делятся на непересекающиеся энергетические бины $[\epsilon_{i-1}, \epsilon_i]_{i=1}^{N_{\text{eff}}-1}$ и $[\mathcal{E}_{j-1}, \mathcal{E}_j]_{j=1}^M$ с ширинами $D_i = \epsilon_i - \epsilon_{i-1}$ и $\bar{D}_j = \mathcal{E}_j - \mathcal{E}_{j-1}$ соответственно. На этих бинах строятся стационарные волновые пакеты стандартным образом.

То есть здесь используются пакетные состояния (2.56) вместе с функцией связанного состояния $|z_0\rangle$ как базисный набор (6.3) для подсистемы $\{bc\}$, а также кулоновские волновые пакеты — как базисные состояния для гамильтониана h_C .

Далее состояния трехчастичного канального базиса, отвечающие дискретизации трехчастичного континуума канального гамильтониана $H_{\text{ch}} = h_{bc} \oplus h_C$, строятся как произведения двухчастичных $|Z_{ij}\rangle = |z_i, x_j^C\rangle$. Также в трехчастичных базисных функциях должны быть учтены необходимые спин-угловые части, которые здесь опущены для простоты записей.

В построенном базисе резольвента G_{ch} имеет явный диагональный вид:

$$\mathfrak{G}_{\text{ch}}(E) = \sum_{j=1}^M |z_0, x_j^C\rangle g_j(E - \epsilon_0^*) \langle z_0, x_j^C| + \sum_{i=1}^{N_{\text{eff}}-1} \sum_{j=1}^M |z_i, x_j^C\rangle G_{ij}(E) \langle z_i, x_j^C|. \quad (6.13)$$

Собственные значения этого оператора зависят только от параметров разбиений двухчастичных спектров.

После проектирования в пакетный базис все части трехчастичного УЛШ (6.9) принимают матричный вид:

$$\mathbf{T} = \mathbf{V} + \mathbf{V} \mathbf{G}_{\text{ch}} \mathbf{T}, \quad (6.14)$$

где $\mathbf{V}$ — матрица внешнего взаимодействия. Для того чтобы найти on-shell и half-shell элементы T -матрицы, достаточно найти решение уравнения (6.14) только для одного столбца $t_p \equiv T_{p,p_0}$, $p = 1, \dots, \mathcal{N}$ (здесь используется мульти-индекс $p = (i, j)$, при этом $p_0 = (0, j_0)$ соответствует начальному состоянию). Соответствующее решение может быть найдено из уравнения

$$(\mathbf{I} - \mathbf{V} \mathbf{G}_{\text{ch}}) \mathbf{t} = \mathbf{v}. \quad (6.15)$$

Здесь $v_p \equiv V_{p,p_0}$, $p = 1, \dots, \mathcal{N}$ и $\mathbf{I}$ — это единичная матрица. Элементы кулоновско-ядерной S -матрицы связаны с вектором t соотношением:

$$S_{\text{el}}(E) = \left[1 - 2\pi i \frac{t_{p_0}}{\bar{D}_{j_0}} \right] e^{2i\sigma(E)}, \quad (E - \epsilon_0^*) \in \bar{\mathfrak{D}}_{j_0}, \quad (6.16)$$

где $\sigma(E)$ — кулоновская фаза.

Как уже упоминалось выше, ССК редукции соответствует РС-аппроксимация для канальной резольвенты. При этом вместо выражения (6.13) здесь используется следующие конечномерное представление:

$$\mathfrak{G}_{\text{ch}}^{PC}(E) = \sum_{i=0}^{N_{\text{eff}}-1} \sum_{j=1}^M |z_i, x_j\rangle g_j(E - \epsilon_i^*) \langle z_i, x_j|, \quad (6.17)$$

где все собственные значения задаются той же формулой, что и ВС-часть канальной резольвенты. Таким образом, используя различные варианты конечномерного представления для канальной резольвенты (6.13) и (6.17) в одном и том же уравнении (6.15), можно прямо сравнить амплитуды рассеяния, отвечающие полному трехчастичному расчету и редукции к ССК.

6.3. Сравнение результатов ССК и решения трехчастичного

УЛШ в пакетном базисе

6.3.1. Расчет для модельного потенциала

Для изучения приближения ССК в дифференциальном и интегральном подходах используем сначала модельную задачу, в которой все парные взаимодействия задаются в виде вещественных гауссиан. При этом в подсистемах $\{bA\}$ и $\{cA\}$ нет связанных состояний, поэтому и нет каналов перестройки. Кулоновское взаимодействие здесь не учитывается.

Для расчета в пакетной технике используется два варианта решения УЛШ — полный расчет, а также расчет в приближении РС, что соответствует решению системы интегральных уравнений (6.12) (интегральный ССК-метод). Результаты интегрального ССК-метода сравниваются с результатами, полученными В.Н. Померанцевым на основе метода продолжения для дифференциальных уравнений ССК [170], на которые будем ссылаться как на дифференциальные ССК-вычисления.

Далее будут вычислены зависимости упругих амплитуд рассеяния от кинетической энергии частицы снаряда $E_{\text{кин}} = E - \epsilon_0^*$, где ϵ_0^* — энергия связанного состояния частицы-снаряда (отрицательная).

Взаимодействие между фрагментами b и c берется в виде гауссианы:

$$V_{bc}(r) = V_0 \exp(-\gamma r^2), \quad (6.18)$$

с параметрами $V_0 = -72.15$ МэВ, $\gamma = 0.454$ Фм $^{-2}$. Эти частицы считаются одинаковыми с массами, равными 1 а.е.м.

Потенциалы взаимодействия фрагментов b и c с ядром-мишенью также задаются гауссоидами

$$V_{iA}(r_i) = U_0 \exp(-\alpha r_i^2), \quad i = b, c, \quad (6.19)$$

с параметрами $U_0 = -15.0$ МэВ, $\alpha = 0.444$ Фм $^{-2}$. Для этой модели рассматривается только S -волновой континуум в подсистеме $\{bc\}$.

При построении дискретизованного представления для подсистемы $\{bc\}$ и возмущенных волновых пакетов $|z_i\rangle$ используется диагонализация матрицы гамильтониана h_{bc} в конечном базисе гауссиан (Б.1) с параметрами, распределенными с помощью геометрической прогрессии (Б.2а).

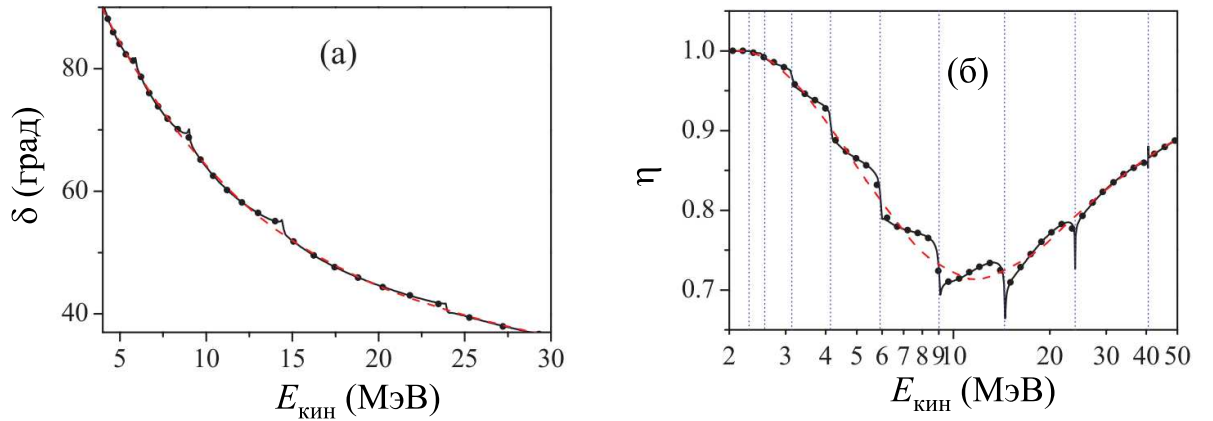


Рисунок 6.1. S -волновые частичные фазовые сдвиги δ (а) и параметры неупругости $\eta = |S_{el}|$ (б) для упругого рассеяния, полученные на основе дифференциального подхода (сплошная кривая), интегрального метода ССК (точки), а также на основе полного пакетного расчета (штриховые кривые) для модельного потенциала (6.19). Вертикальные линии на панели (б) отвечают положениям псевдосостояний в подсистеме $\{bc\}$.

Основная проблема при замене СВП псевдосостояниями состоит в корректном

определении соответствующих границ интервалов и ширин дискретизации. Эти ширины могут быть найдены по формуле (А.3) из Приложения А.

В расчетах использовался базис (Б.1) со следующими параметрами из (Б.2а): $\beta_1 = 0.001 \text{ Фм}^{-2}$, $\beta_N = 20 \text{ Фм}^{-2}$ для двух размерностей N : $N = 20$ и 40 . В обоих случаях, были использованы не все получившиеся N псевдосостояний, а только те, собственные энергии которых меньше 120 МэВ . Таким образом, размерности пакетных базисов N_{eff} , использовавшиеся для расчетов равны соответственно 12 и 20.

Для дискретизации спектра гамильтониана h_0 использовался базис точных свободных волновых пакетов $|x_j\rangle$ размерности M , границы бинов по энергии для которого распределены на сетке Чебышева (Б.2), где энергетический параметр E_{mid} и размерность базиса M выбирались для каждой рассматриваемой модели.

Трехчастичные S -волновые парциальные фазовые сдвиги и параметры неупругости $\eta = |S_{\text{el}}|$, найденные на основе рассматриваемых подходов, представлены на Рис. 6.1.

Из рисунка видно, что парциальные амплитуды, найденные на основе интегрального и дифференциального ССК подходов имеют одинаковые особенности вблизи порогов многоканальной задачи (энергий псевдосостояний). Таким образом, ясно, что эти особенности упругих амплитуд связаны именно с ССК аппроксимацией, а не с погрешностями численного решения. Следует отметить, что полный пакетный трехчастичный расчет приводит к гладкому энергетическому поведению амплитуд.

Также можно показать [79], что с увеличением размерности N базиса псевдосостояний эти особенности не исчезают, но становятся более узкими и резкими.

6.3.2. Упругое рассеяние $d + {}^{16}\text{O}$

Для более полного теста ССК схемы рассмотрим более реалистичную трехчастичную модель для описания рассеяния дейтронов на ядре ${}^{16}\text{O}$, используя независимые от энергии потенциалы взаимодействия нуклонов с ядром ${}^{16}\text{O}$ и сохраняя только S -волновые части NN взаимодействия. Такие приближения не повлияют на основные выводы, поскольку основная цель данного исследования — это изучение точности ССК схемы и ее влияние на энергетическое поведение упругих амплитуд. В качестве потенциалов взаимодействия в подсистемах нуклон- ${}^{16}\text{O}$ будем использовать соответствующие нуклон-ядерные потенциалы, параметры которых взяты из работы

[168] при энергии $E_N = 5.25$ МэВ. Далее будет исследовано энергетическое поведение трехчастичных амплитуд в области энергий $E_{\text{ц.м.}} = 5 \div 40$ МэВ. Для этого примера учитывается кулоновское взаимодействие между центром масс дейрона и ядром-мишенью, однако рассматриваются только кулоновско-ядерные амплитуды.

Взаимодействие в np подсистеме берется таким же, как и в предыдущем параграфе (6.18).

Для построения псевдосостояний в подсистеме $\{np\}$ используется тот же гауссов базис (Б.1) с параметрами β_n , задаваемыми на сетке Чебышева (Б.2). Вычисления проводились для $N_G = 15$ ($N_{\text{eff}} = 11$), $t = 1$ и $\beta_0 = 0.1$ Фм⁻².

Для дискретизации спектра гамильтониана h_C (включающего дальнотействующее кулоновское взаимодействие снаряда и мишени) использовался базис кулоновских волновых пакетов, которые строились численно из регулярных кулоновских функций с граничными точками интервалов, распределенными на сетке Чебышева (Б.2) с $t = 1$ размерности $M = 150$ и с $E_0 = 20$ МэВ. Такой базис строился в каждой парциальной волне для значений орбитального момента $L \leq 30$.

Проведенное исследование показало, что энергетическое поведение амплитуд упругого рассеяния зависит от величин мнимых частей оптических нуклон-ядерных потенциалов, используемых для расчета. Для детального исследования этого эффекта введен множитель u , на который домножаются мнимые части потенциалов $\text{Im}V_{n(p)A}$ в расчетах.

Сечение упругого рассеяния для трех вариантов мнимых частей потенциалов представлены на Рис. 6.2. Здесь использована обычная формула для сечения рассеяния, при этом чисто кулоновская часть амплитуды не учитывалась:

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{P^2} \sum_{L=0}^{L_{\text{max}}} (2L+1) |e^{2i\sigma_L(E)} - S_{\text{el}}^L|^2, \quad (6.20)$$

где P полный импульс частицы-снаряда, $\sigma_L(E)$ — кулоновская фаза и S_{el}^L — упругая S -матрица.

Как видно из Рис. 6.2, ССК ведет к некоторому искажению энергетической зависимости сечения только в случае, когда мнимые части оптических потенциалов уменьшены в четыре раза. В этом случае полный трехчастичный расчет приводит к гладким решениям. Также в работе автора [79] исследовано влияние редукции к ССК на парциальные амплитуды для различных L .

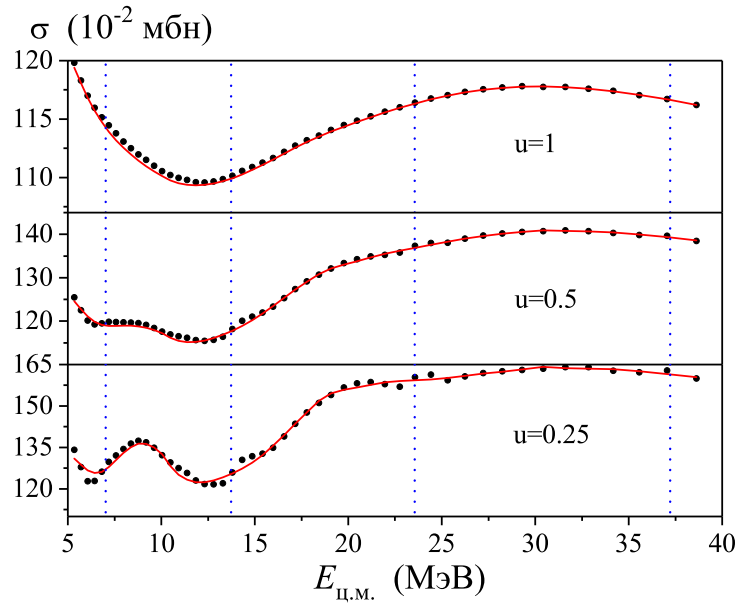


Рисунок 6.2. Сечение упругого рассеяния $d + {}^{16}\text{O}$, полученное в трехчастичной пакетной технике (сплошные кривые), в сравнении с результатами для ССК (точки) для оптических потенциалов нуклон-ядро с множителями u при мнимых частях.

6.3.3. Обоснование многоканальной редукции

Полученные результаты показывают, что многоканальная редукция приводит к нефизическим особенностям амплитуды упругого рассеяния вблизи псевдопорогов, определяемых энергиями дискретизации парной подсистемы для нижайших парциальных волн. Эти особенности тем заметнее, чем меньше мнимые части оптических потенциалов взаимодействия. При этом при использовании трехчастичной пакетной техники такие особенности сглаживаются.

Однако, если мнимые части оптических потенциалов взаимодействия фрагментов составной частицы с ядром достаточно велики, а нижайшие парциальные амплитуды сильно подавлены эффектами поглощения, многоканальная редукция, например, в форме метода CDCC [48] прекрасно работает и воспроизводит точные результаты для рассматриваемой ограниченной трехчастичной задачи (без явного учета каналов перестройки). Таким образом, проведенное исследование дает положительный ответ на проблему обоснования многоканальной редукции в трехчастичных расчетах (см. например [171]) для прямых ядерных реакций в том случае, когда каналами перестройки можно пренебречь.

В следующем разделе приводятся детальные сравнительные расчеты на основе

трехчастичной пакетной техники и метода CDCC.

6.4. Сравнение результатов двух методов дискретизации: пакетной техники и метода CDCC

В качестве общего теста численной точности метода пакетной дискретизации был также сделан сравнительный расчет с методом CDCC сечений упругого рассеяния дейтронов на ядре ^{58}Ni при трех различных энергиях падающих дейтронов: $E_d = 80$, 21.6 и 12 МэВ. Такие расчеты позволили не только детально сравнить два подхода, но и определить роль закрытых каналов при различных энергиях.

Как в предыдущем примере, взаимодействие в подсистеме $n - p$ бралось в гауссовом виде [74]:

$$V_{np}(r) = -V_0 e^{-\alpha r^2}, \quad V_0 = 66.99 \text{ МэВ}, \quad \alpha = 0.415 \text{ ФМ}^{-2}. \quad (6.21)$$

Также в расчетах использовались только S -волновые состояния для $n - p$ континуума.

Взаимодействия нуклонов с ядром представляются локальными оптическими потенциалами Вудса–Саксона. В частности, были использованы потенциалы Конинга–Делароша [172], взятые при половинной энергии E_d . Значения масс нуклонов и ядра следующие: $m_n = 1.0087$ а.е.м. (для нейтрона), $m_p = 1.0078$ а.е.м. (для протона) и $m_{\text{Ni}} = 57.9353$ а.е.м.

6.4.1. Параметры, использовавшиеся для расчетов на основе метода CDCC

Приводимые здесь расчеты на основе метода CDCC были выполнены А.М. Моро с помощью программы FRESKO (см. нашу совместную работу [74]).

Следуя стандартной процедуре CDCC подхода, непрерывный спектр np подсистемы ограничивается некоторым максимальным значением энергии возбуждения E_{max} и делится N энергетических бинов, равномерно распределенных по соответствующим импульсам. Для каждого бина строится импульсный волновой пакет. Число бинов N определяется таким образом, чтобы достичь сходимости упругого сечения рассеяния дейтронов. Для двух низких энергий $E_d = 12$ МэВ и $E_d = 21.6$ МэВ расчеты включают вместе открытые и закрытые каналы. Таким образом, непрерывный спектр представляется набором N_{open} открытых каналов вплоть

до максимальной возможной энергии в системе центра масс и N_{closed} закрытых каналов от этой энергии до E_{max} , т.е. $N = N_{\text{open}} + N_{\text{closed}}$.

6.4.2. Параметры, использовавшиеся в методе пакетной дискретизации континуума

Для построения пакетных состояний для гамильтониана h_{bc} использовался базис гауссоид, построенных на сетке Чебышева (Б.2) размерности N_G . При этом в практических расчетах учитывались только первые N базисных функций с максимальной энергией ϵ_N меньшей или равной некоторому максимальному значению E_{max} .

В качестве пакетного базиса по переменной $\mathbf{R}$ центра масс nr подсистемы относительно ядра использовался набор точных кулоновских пакетов (для всех необходимых парциальных волн L) размерности M . КВП строились из регулярных кулоновских функций в координатном представлении путем численного интегрирования.

Ниже приводятся результаты для дифференциальных сечений упругого рассеяния, вычисленных при различных энергиях падающих дейтронов.

6.4.3. Сечение упругого рассеяния при $E_d = 80$ МэВ

При этой относительно большой энергии вклад закрытых каналов очень мал. При этом вклады в сечение от открытых каналов дискретизованного континуума также не велики и играют роль в сечении рассеяния под средними и задними углами. Также ранее было показано, что только половина открытых каналов с энергией $E_{\text{max}} \approx 40$ МэВ дает заметный вклад в упругое сечение при такой относительно большой энергии. На рис. 6.3 приводится сравнение дифференциальных сечений рассеяния, вычисленных на основе метода CDCC и пакетного подхода. Для этих расчетов использовался пакетный базис размерности $N = 13$ (для гамильтониана nr подсистемы). Эти состояния были получены в гауссовом базисе (Б.1) размерности $N_G = 20$, построенном на распределении (Б.2) с параметрами $t = 2$, $\beta_0 = 0.1$ Фм⁻². По координате движения центра масс дейтрона использовался базис из $M = 500$ кулоновских волновых пакетов на эквидистантной сетке. Число парциальных волн необходимое для сходимости сечения $L_{\text{max}} = 45$. Для расчетов по методу CDCC непрерывный спектр ограничивался

максимальным значением $E_{\max} = 70$ МэВ и делился на $N = 20$ бинов, равномерно распределенных по импульсу p .

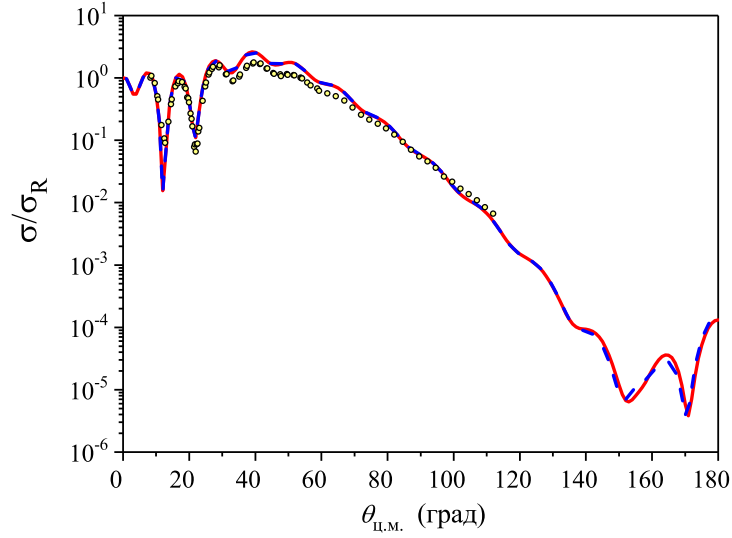


Рисунок 6.3. Сравнение дифференциальных сечений упругого рассеяния дейтронов на ядре ^{58}Ni , построенных в отношении к сечению Резерфорда σ_R , при энергии падающих дейтронов $E_d = 80$ МэВ, вычисленных на основе метода CDCC (сплошная кривая) и метода пакетной дискретизации (штриховая кривая). Точки отвечают экспериментальным данным [174].

Как следует из рисунка 6.3 результаты обоих подходов находятся в отличном согласии друг с другом для всех углов. Следует отметить, что несмотря на сильно неравномерную сетку, использовавшуюся в расчетах, в пакетной технике получаются хорошо сходящиеся результаты. Таким образом, нет никакой необходимости в использовании эквидистантных разбиений распределений импульса, которая используется в большинстве подходов [43, 44, 48]. Это позволяет использовать более гибкие сетки разбиений и получать более быструю сходимость результатов.

Таким образом, несмотря на существенно разные распределения дискретных энергий, использующиеся в обоих подходах, и отличающиеся формализмы результаты обоих методов находятся в очень хорошем согласии при энергии $E_d = 80$ МэВ.

6.4.4. $E_d = 21.6$ МэВ. Эффект закрытых каналов

При этой промежуточной энергии влияние закрытых каналов (ЗК) дискретизованного континуума np подсистемы на амплитуду упругого рассеяния

становится более заметным. Совместные вычисления [74] показали, что основной эффект от этого вклада виден под задними углами. Поскольку эффект ЗК часто не учитывается в традиционных расчетах на основе CDCC подхода и других методов многоканальной редукции, ниже будет подробно изучена сходимость сечения упругого рассеяния с ростом числа учитываемых ЗК и соответствующей энергии $E_{\max}$.

Для этих расчетов в пакетной технике для np подсистемы использовался базис псевдосостояний размерности $N = 15$, построенный из гауссова базиса (Б.1) с параметрами (Б.2) $N_G = 30$, $t = 3$, $\beta_0 = 0.1$ Фм⁻², а по второй координате использовался базис кулоновских волновых пакетов размерности $M = 150$. Для сходимости разложения сечения по парциальным волнам здесь требуется учесть $L_{\max} = 25$.

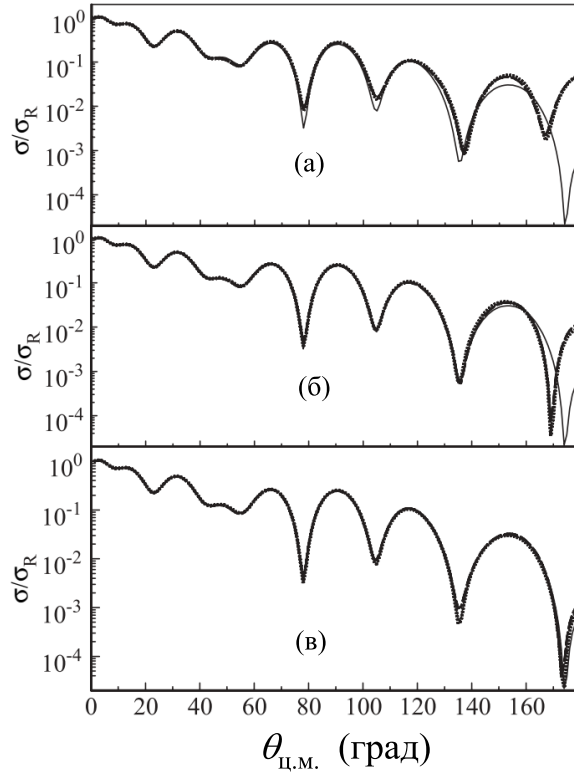


Рисунок 6.4. Дифференциальные сечения упругого $d+^{58}\text{Ni}$ рассеяния при энергии падающих дейтронов $E_d = 21.6$ МэВ, вычисленные на основе метода CDCC (точечная кривая) и метода пакетной дискретизации (штриховая кривая) для различных значений $E_{\max}$ учитываемых возбуждений np континуума: а) $E_{\max} = 20$ МэВ, б) $E_{\max} = 38$ МэВ, в) $E_{\max} = 80$ МэВ. Сплошные кривые не всех рисунках соответствуют сошедшимся результатам обоих подходов при $E_{\max} = 139$ МэВ.

В методе CDCC для учета эффекта ЗК пришлось сочетать традиционную схему связи каналов с R -матричным подходом [49]. В отличие метода Нумерова, в котором радиальные части волновых функций $\chi_i(\mathbf{R})$ получаются из прямого интегрирования связанных дифференциальных уравнений, в R -матричном подходе сначала получают базисный набор собственных состояний по энергии для диагональных частей связанных уравнений, причем все базисные функции имеют фиксированные логарифмические производные на определенном радиусе R_m . Затем неизвестные функции $\chi_i(\mathbf{R})$ раскладываются по полученному базису. Хотя эта процедура численно более сложная, чем прямой метод Нумерова, она приводит к устойчивым результатам в случае учета закрытых каналов. Для расчетов использовались $N_{\text{open}} \simeq 20$ бинов в области открытых каналов и $N_{\text{closed}} \simeq 15$ в области закрытых. Максимальная энергия возбуждения считалась $E_{\text{max}} \sim 140$ МэВ.

На рисунке 6.4 сравниваются упругие сечения рассеяния, полученные как на основе R -матричного CDCC подхода, так и на основе пакетной техники для практически совпадающих значений E_{max} . В случае $E_{\text{max}} = 20$ МэВ рассматриваются только открытые каналы и в методе CDCC используется схема Нумерова для расчета (см Рис. 6.4а). Для других значений E_{max} (Рис. 6.4б и в), использовался метод R -матрицы, в то время как схема пакетного подхода для всех энергий оставалась прежней.

Из рисунков хорошо видно, что дифференциальные сечения рассеяния, полученные на основе двух рассматриваемых методов дискретизации, практически совпадают в случае одинаковых значений E_{max} . Таким образом, можно заключить, что детали дискретизации практически не влияют на сходимость результатов, а существенным фактором здесь является именно величина максимальной энергии.

Сошедшиеся сечения упругого рассеяния при максимальном значении $E_{\text{max}} = 139$ МэВ представлены на рисунке 6.5. Кривые, соответствующие обоим методам дискретизации, практически неразличимы на рисунке, для сравнения здесь показаны также результаты, полученные в модели свертки (когда вместо всего спектра гамильтониана h_{bc} берется только одно связанное состояние). Как ясно видно, влияние промежуточного развала дейтрона на его на упругое сечение достаточно велико при рассматриваемой энергии.

Таким образом, эффект ЗК играет важную роль при рассеянии под задними

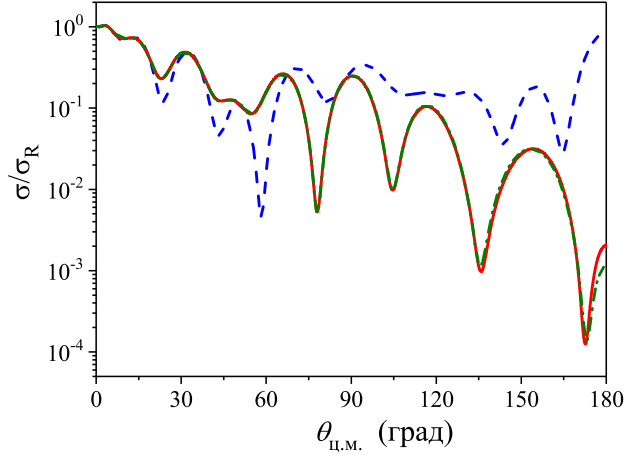


Рисунок 6.5. Дифференциальное сечение упругого рассеяния дейтронов на ядре ^{58}Ni при энергии $E_d = 21.6$ МэВ (в отношении к сечению Резерфорда), вычисленное на основе метода CDCC (штрих-пунктирная кривая) и пакетной техники (сплошная кривая). Штриховая кривая соответствует расчетам на основе модели свертки, в которой каналы возбуждения дейтрона в континуум не учитываются.

углами при рассмотренной энергии столкновения. При этом необходимая максимальная энергия возбуждения достаточно высока: $E_{\text{max}} \sim 100$ МэВ.

$E_d = 12$ МэВ

Приведем здесь результаты расчетов при достаточно низкой энергии в 12 МэВ. В этом случае число необходимых парциальных волн по координате центра масс дейтрона ограничено максимальным орбитальным моментом $L_{\text{max}} = 15$.

Для CDCC расчетов использовался базис, состоящий из $N_{\text{open}} = 15$ и $N_{\text{closed}} = 10$ бинов (при $E_{\text{max}} \sim 80$ МэВ). Снова здесь использовался R -матричный подход для решения связанных уравнений.

Упругие сечения рассеяния, вычисленные на основе двух методов дискретизации при различных значениях E_{max} представлены на рисунках 6.6а, б и в. Сравнение сошедшихся по величине E_{max} сечений с результатами, полученными в модели свертки представлены на рисунке 6.7. Видно, что влияние закрытых каналов при более низкой энергии становится сильнее. Этот эффект замечен уже не только под задними углами но и в области средних углов ($\theta_{\text{ц.м.}} \sim 90^\circ - 100^\circ$). Небольшие отличия между результатами двух подходов заметны в основном под задними углами и могут быть

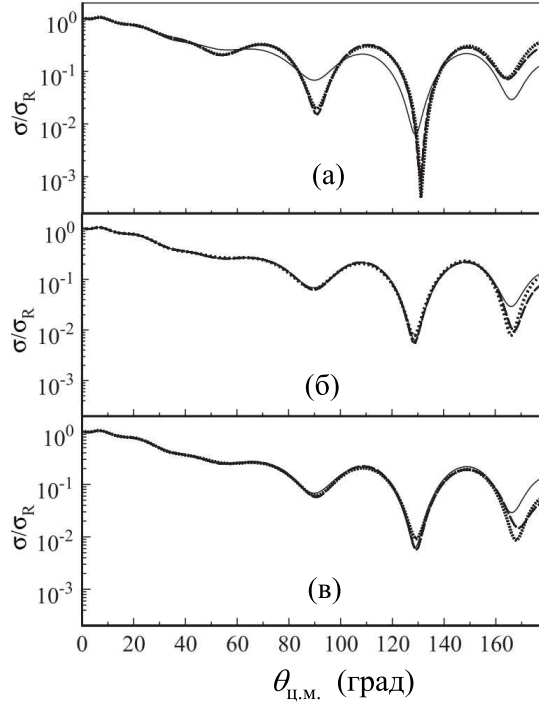


Рисунок 6.6. Дифференциальные сечения упругого рассеяния $d+^{58}\text{Ni}$ при $E_d = 12$ МэВ, вычисленные на основе метода CDCC (точечная кривая) и метода пакетной дискретизации (штриховая кривая) для различных значений максимальной энергии возбуждения E_{max} : а) $E_{\text{max}} = 10.2$ МэВ, б) $E_{\text{max}} = 24.5$ МэВ, в) $E_{\text{max}} = 36$ МэВ. Сплошные кривые отвечают сошедшимся результатам метода CDCC.

вызваны различием параметров дискретизации и точностью одного из подходов.

6.4.5. Обсуждение результатов

Сравнительные расчеты показали прекрасное согласие результатов обоих рассмотренных подходов. Важным преимуществом пакетной техники является то, что пакетный базис для гамильтониана, описывающего взаимодействие фрагментов падающей частицы, строится вплоть до высоких энергий возбуждения, поэтому в МПДК учитываются не только вклады открытых каналов, но и закрытых. При этом явное конечномерное представление для трехчастичной резольвенты позволяет использовать интегральный формализм теории рассеяния и избежать явного учета граничных условий.

Развитый интегральный формализм для трехчастичной задачи рассеяния позволяет использовать также проекционную технику Фешбаха для построения

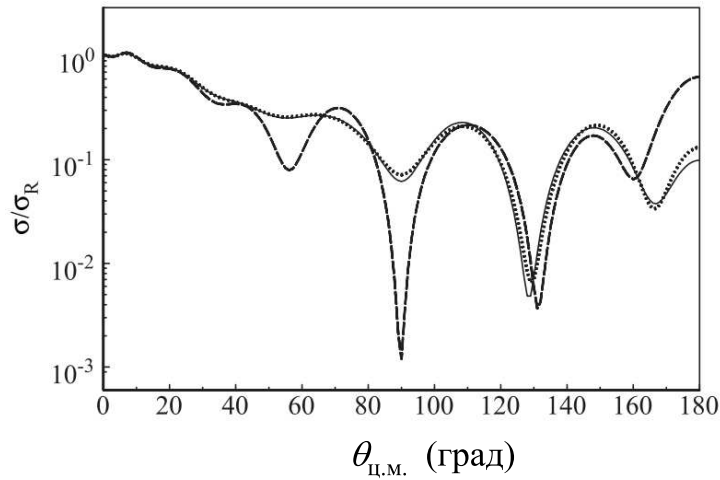


Рисунок 6.7. Дифференциальное сечение упругого рассеяния дейтронов на ядре ^{58}Ni при энергии $E_d = 12$ МэВ (в отношении к сечению Резерфорда), вычисленное на основе метода CDCC (точечная кривая) и пакетной техники (сплошная кривая). Штриховая кривая соответствует расчетам на основе модели свертки.

эффективных потенциалов взаимодействия составных частиц. Например, здесь можно свести решение задач упругого рассеяния составной частицы к эффективной двухчастичной задаче, где все неупругие процессы учитываются за счет нелокального и зависящего от энергии потенциала.

6.5. Эффективный оператор взаимодействия составной частицы с ядром

Решение задач упругого рассеяния составных частиц можно было бы упростить, построив эффективный оператор их взаимодействия, учитывающий виртуальные возбуждения налетающей частицы, т.е. ее динамическую поляризацию в процессе рассеяния. МПДК позволяет находить такие операторы в явном виде, используя конечномерные представления для резольвент. Здесь можно воспользоваться формализмом проекционных операторов Фешбаха [175].

Рассмотрим уравнение Шредингера для волновой функции системы, определяемой гамильтонианом (6.1). Введем ортогональные друг другу проекционные

операторы:

$$F = |z_0\rangle\langle z_0|, \quad Q = 1 - F, \quad QF = 0. \quad (6.22)$$

Здесь F — проектор на упругий канал, определяемый связанным состоянием $|z_0\rangle$ составной частицы, Q — ортогональный ему проектор на все остальные (неупругие) каналы.

Действуя такими операторами слева на уравнение Шредингера (6.2) для волновой функции $|\Psi\rangle$, получаем следующую систему связанных уравнений для проекций $F|\Psi\rangle$ и $Q|\Psi\rangle$:

$$\begin{aligned} (FHF - E)F|\Psi\rangle &= -FHQ|\Psi\rangle, \\ (QHQ - E)Q|\Psi\rangle &= -QHF|\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Если ввести далее резольвенту гамильтониана QHQ в Q -подпространстве: $G_Q^{(+)}(E) = [(E + i0) - QHQ]^{-1}$, и подставить второе уравнение из (6.23) в первое, получится уравнение для упругой компоненты волновой функции $F|\Psi\rangle$:

$$(FHF + FU_{\text{eff}}(E)F - E)F|\Psi\rangle = 0, \quad (6.24)$$

где

$$FU_{\text{eff}}(E)F \equiv FHQG_Q^{(+)}QHF \quad (6.25)$$

представляет собой эффективный нелокальный зависящий от энергии оператор взаимодействия между составной частицей и ядром-мишенью, который учитывает все промежуточные неупругие каналы.

Поскольку операторы F и $H_{\text{ch}} = h_{\text{bc}} \oplus h_C$ коммутируют, и $FQ = 0$, уравнение (6.24) принимает вид двухчастичного уравнения Шредингера для проекции трехчастичной волновой функции на упругий канал $|\chi_0\rangle = \langle z_0|\Psi\rangle$:

$$[h_C + V_{\text{fold}} + U_{\text{eff}} - (E - \epsilon_0^*)]|\chi_0\rangle = 0, \quad (6.26)$$

где введен потенциал свертки, который часто используется в моделях, в которых внутренней структурой частицы-снаряда пренебрегают:

$$V_{\text{fold}}(R) = \langle z_0|\bar{V}|z_0\rangle. \quad (6.27)$$

Здесь интегрирование ведется только по переменной относительного движения фрагментов. Все неупругие эффекты, включая вероятность развала при упругом

рассеянии, входят в нелокальный потенциал Фешбаха:

$$U_{\text{eff}}(E) = \langle z_0 | \bar{V} Q G_Q(E) Q \bar{V} | z_0 \rangle. \quad (6.28)$$

Несмотря на компактную запись, вычисление этого оператора в общем случае представляет более сложную задачу, чем решение исходной трехчастичной задачи рассеяния. Однако, используя пакетную технику, такой оператор можно найти в явном виде.

В пакетном пространстве канального гамильтониана проектор Q имеет следующий вид (здесь опущены возможные спин-угловые индексы):

$$\mathfrak{Q} = \sum'_{k,j} |z_k, x_j^C\rangle \langle z_k, x_j^C|, \quad (6.29)$$

где знак штриха у суммы означает, что из полного набора состояний гамильтониана h_{bc} исключено связанное состояние $|z_0\rangle$. Далее оператор G_Q может быть найден из решения интегрального уравнения для полной резольвенты, спроектированного в такое Q -подпространство:

$$\mathfrak{G}_Q(E) = \{[\mathfrak{G}_{\text{ch}}^Q(E)]^{-1} - \mathfrak{V}^Q\}^{-1}, \quad (6.30)$$

После нахождения оператора G_Q эффективный потенциал вычисляется по явной формуле:

$$U_{\text{eff}}(E, R, R') = \sum_{kj} \sum'_{k'j'} B_{kj}(R) [\mathbf{G}_Q(E)]_{kj, k'j'} B_{k'j'}^*(R'), \quad (6.31)$$

где формфакторы определяются через матричные элементы:

$$B_{kj}(R) = \langle z_0 | \bar{V} | z_k, x_j^C \rangle, \quad (6.32)$$

при вычислении которых интегрирование ведется только по переменной относительного движения $\mathbf{r}$. В практических расчетах необходимо учесть все спин-угловые части волновых функций.

Таким образом, пакетный подход позволяет вычислить эффективные оптические потенциалы, учитывающие динамическую поляризацию при рассеянии составных частиц на ядрах.

На Рис. 6.8 приводятся реальные и мнимые части такого потенциала, построенного для описания рассеяния дейтрона на ядре ^{58}Ni при энергии $E_d = 80$ МэВ, вычисленные в пакетной технике для полного орбитального момента $L = 0$.

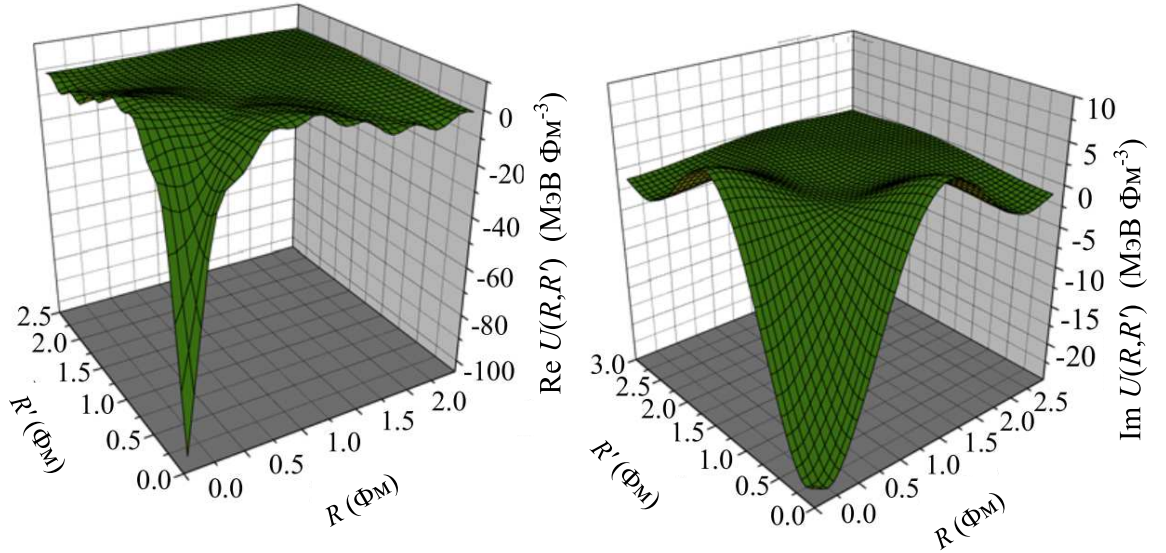


Рисунок 6.8. Реальная (слева) и мнимая (справа) части эффективного потенциала взаимодействия дейтрона с ядром ^{58}Ni при энергии $E_d = 80$ МэВ для полного орбитального момента $L = 0$.

Помимо прямого вычисления сложного нелокального оператора взаимодействия такая техника оказывается удобной в том случае, когда вклад неупругих каналов достаточно мал. Для корректной аппроксимации эффективного потенциала в этом случае требуется базис по переменной R гораздо меньшей размерности, чем для расчетов с основным потенциалом свертки. В этом случае можно использовать на разных этапах расчета два разных базиса: внутренний и внешний [71, 72].

Именно такая ситуация возникает при решении задачи упругого рассеяния дейтронов на ядре ^{58}Ni при $E_d = 80$ МэВ, рассмотренной в предыдущем разделе. Здесь использование эффективного потенциала позволяет точно воспроизвести сечение рассеяния, при этом размерность используемого трехчастичного базиса уменьшается в несколько раз по сравнению с полным расчетом.

6.6. Заключительные замечания

Отличное согласие между результатами пакетной техники и CDCC является хорошим индикатором того, что основные положения пакетной техники, в частности, использование нормированных стационарных волновых пакетов вместо точных функций рассеяния вполне корректно в рассматриваемой трехчастичной задаче.

С другой стороны совпадение результатов, полученных в трехчастичной пакетной технике, с результатами многоканальной редукции снимает многие вопросы ее обоснования известные в литературе.

Благодаря детальному сравнению двух подходов в работе [74] удалось показать важность вклада закрытых каналов при низких энергиях столкновения составной частицы с ядром. Относительно недавно важность вклада закрытых каналов при низких энергиях столкновения была подтверждена другими авторами для реакций типа $A(d, pn)A$ [166].

Важным преимуществом МПДК является использование интегрального формализма, который упрощает учет закрытых каналов, позволяет проводить расчеты с нелокальными потенциалами взаимодействия. Также развитый интегральный формализм, основанный на дискретизации полного континуума системы нескольких тел, открывает новые возможности, такие как явное построение оптических потенциалов взаимодействия, учитывающих внутреннюю структуру сталкивающихся частиц.

Следует отметить, что предложенный формализм можно использовать и для описания упругого рассеяния частицы-снаряда, состоящей из большего числа фрагментов, на основе РС-приближения. Также полученная трехчастичная волновая функция, описывающая движение двухфрагментной системы в поле ядра, может быть использована для вычисления амплитуд процессов срыва или подхвата, таких как (d, p) или (p, d) .

Результаты этой главы опубликованы в работах [66, 73, 74, 77, 85].

Глава 7. Описание процессов в ядерной материи

7.1. Вводные замечания

В этой главе будут рассмотрены процессы в бесконечной ядерной материи. Традиционным формализмом для нерелятивистских вычислений в этой области является интегральный формализм Бракнера–Бете–Голдстоуна [176–181], в основе которого лежит вычисление матрицы реакции (аналога T -матрицы в свободном пространстве). Через такую T -матрицу в ядерной среде находят различные величины, такие, например, как одночастичные потенциалы и уравнение состояния. При этом используется схема самосогласования, поскольку сами одночастичные потенциалы, определяющие взаимодействие частиц со средним полем, входят в уравнение для T -матрицы.

По сути, для нахождения двухчастичных или трехчастичных корреляций нуклонов в ядерной среде требуется решение задачи их рассеяния внутри среды [182–186]. Вместе с тем, хотя уравнение Бете–Голдстоуна (УБГ) похоже на уравнение Липпмана–Швингера по своей структуре, задача рассеяния в среде имеет существенные отличия. Прежде всего, из-за наличия среднего поля двухчастичная задача в среде является, на самом деле, частным случаем трехчастичной. В результате, движение центра масс пары нуклонов не отделяется для таких задач, что приводит к бесконечной системе связанных парциальных уравнений в общем случае. Кроме того, в ядре УБГ присутствует Паули-проектор, учитывающий заполнение состояний ниже поверхности Ферми. Наконец, самосогласованная схема требует итеративного решения с новым приближением для одночастичных потенциалов на каждом шаге [176, 177]. Эти итерации достаточно трудоемки, однако реализуемы на современных компьютерах в случае учета двух- и трехчастичных корреляций. Общее решение трехчастичной задачи в среде может быть построено на основе формализма уравнений Бете–Фаддеева [181] с учетом двух- и трехчастичных сил, такие расчеты для реалистических потенциалов очень сложны. Поэтому возникает вопрос о применимости в этой области L_2 подходов, аналогичных методам, используемым для решения обычных задач рассеяния (например, [18, 20, 25, 37]), а также пакетной техники [85].

В работах автора [86, 87, 90] удалось развить такой формализм в рамках МПДК. Его основу составляет диагонализационная техника, позволяющая вычислять

T -матрицу без решения уравнений, а на основе спектрального разложения для резольвенты полного гамильтониана. Применительно к многоканальным задачам рассеяния эта техника описана в главе 4 в разделе 4.6.2. Для реализации этого подхода в ядерной среде вводится эффективный двухчастичный гамильтониан, действующий в Паули-разрешенном подпространстве. Как будет показано в первой части этой главы, такой подход позволяет существенно упростить самосогласованную процедуру вычисления уравнения состояния бесконечной ядерной материи.

Во второй части главы такой диагонализационный формализм обобщается на случай учета двухдырочных корреляций. В этом случае двухчастичный пропагатор имеет так называемый двухчастичный-двухдырочный вид (prhh), также такой пропагатор называют пропагатором Галицкого–Фейнмана (ПГФ) [187–189]. Фактически он имеет вид общего пропагатора формализма самосогласованных функций Грина (СФГ) [179, 189, 190], взятого в приближении среднего поля. Как будет показано ниже, эффективный гамильтониан в этом случае становится неэрмитовым и может иметь пары комплексно сопряженных собственных значений, присутствие которых указывает на наличие сверхтекучей фазы и эффектов спаривания.

Напомним, что основным инструментом для изучения сверхтекучих корреляций в ядерной среде (см. например обзоры [191, 192]), как и в конденсированных средах, является формализм Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [193, 194]. Также на основе метода СФГ был выведен формализм, позволяющий выйти за рамки модели среднего поля и получить более общие уравнения для сверхтекучих щелей [195]. Следует отметить, что, как правило, состояния с комплексными энергиями в ядерной среде трактуются как нестабильные, и используются различные техники, позволяющие их исключить [196]. Вместе с тем, есть также методы, которые используют состояния с комплексными энергиями напрямую, например, стабилизационный анализ, предложенный в работе [197]. В основе развиваемого в данной работе подхода лежит предположение о том, что состояния с комплексной энергией можно рассматривать аналогично обычным связанным состояниям, поскольку они дают вклад в спектральное разложение эффективного гамильтониана. Ниже показано, что такой подход не только позволяет вычислять T -матрицу на основе диагонализации матрицы эффективного гамильтониана, но и приводит к новому способу вычисления импульсных зависимостей сверхтекучих щелей из собственных функций эффективного гамильтониана.

Предлагаемая в работе двухчастичная трактовка сверхтекучих корреляций позволяет выйти за рамки БКШ и получить новую информацию о различных эффектах, связанных со спариванием. Так, анализ поведения собственных значений и собственных функций эффективного гамильтониана при низкой плотности имеет отношение к проблеме кроссовера между Бозе конденсатом квазидейтронов и сверхтекучей фазой (BCS-BEC кроссовер [198–200]). Кроме того, развитый подход обобщается на случай ненулевого импульса центра масс пары, что позволит изучать необычные фазы в ядерной среде с нарушенной пространственной симметрией.

Результаты, которые приводятся в этой главе, опубликованы в работах [86–88, 90].

7.2. Уравнение Бете–Голдстоуна

Рассмотрим случай бесконечной симметричной ядерной материи при нулевой температуре. Матрица реакции удовлетворяет интегральному уравнению Бете–Голдстоуна [176, 177]:

$$T(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; K, E) = V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \int d^3k'' V(\mathbf{k}, \mathbf{k}'') \frac{Q(\mathbf{k}'', K) T(\mathbf{k}'', \mathbf{k}'; K, E)}{E + i0 - E_0(\mathbf{k}'', \mathbf{K})}, \quad (7.1)$$

где $\mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)$ и $\mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)$ — импульс центра масс¹⁶ и относительный импульс двух частиц соответственно, E — энергия системы. $E_0(\mathbf{k}'', \mathbf{K})$ представляет собой сумму одночастичных энергий частиц $e(k_1)$ и $e(k_2)$, записанную в переменных k и K . Наконец, $Q(\mathbf{k}'', \mathbf{K})$ проектор Паули вида:

$$Q(\mathbf{k}, \mathbf{K}) = \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{K}| - k_F) \theta(|\mathbf{k} - \mathbf{K}| - k_F), \quad (7.2)$$

наличие которого означает, что переходы в континуум возможны только для частиц с энергией выше энергии Ферми $e(k_F)$, где k_F — импульс Ферми. Из-за присутствия этого оператора в ядре уравнения (7.1) импульс центра масс $\mathbf{K}$ не отделяется (в отличие от случая УЛШ в свободном пространстве), что ведет к более сложному парциально-волновому разложению. Однако этот импульс сохраняется, поэтому угловые переменные относительного импульса определяются относительно направления $\mathbf{K}$, а решения для разных значений модуля импульса центра масс K отделяются.

¹⁶ Фактор $\frac{1}{2}$ здесь введен для удобства преобразований.

Для упрощения расчетов здесь также используется усреднение по углам оператора Паули Q , которое приводит к следующему простому виду соответствующих функций [176]:

$$Q(k, K) = \begin{cases} 0, & k \leq k_0, \\ \min \left\{ 1, \frac{k^2 + K^2 - k_F^2}{2kK} \right\}, & k > k_0, \end{cases} \quad (7.3)$$

где $k_0 = \sqrt{k_F^2 - K^2}$. Если от углов между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{K}$ также не зависит энергетический знаменатель $E_0(\mathbf{k}, \mathbf{K})$, тогда для решения УБГ можно использовать парциально-волновое разложение, такое же как в УЛШ для задачи NN рассеяния. В частности, будут сохраняться значения полного момента j и спина s двух нуклонов.

Важно отметить, что после усреднения по углам оператор Q перестает быть проектором, поскольку не выполняется условие $Q^2 = Q$, однако такой усредненный оператор можно рассматривать как положительно определенный оператор $Q(K)$, который зависит от величины импульса центра масс K .

Энергия в знаменателе УБГ (7.1) $E_0(\mathbf{k}, \mathbf{K})$ представляет собой сумму одночастичных энергий, каждая из которых задается формулой:

$$e(k_1) = \frac{k_1^2}{2m} + \text{Re} [U(k_1, \omega = e(k_1))], \quad (7.4)$$

в которой одночастичный импульс нужно выразить через $\mathbf{k}$ и $\mathbf{K}$. При этом собственные энергии $U(k_1, \omega)$, входящие в уравнение (7.4), определяются сами как следующие интегралы от матрицы реакции:

$$U(k_1, \omega) = \int_{k_2 \leq k_F} d^3 k_2 T(\mathbf{k}, \mathbf{k}; K, E = \omega + e(k_2)). \quad (7.5)$$

В последнем уравнении интегрирование по $\mathbf{k}_2$ ограничивается состояниями внутри поверхности Ферми [177].

Если определение энергии ω в уравнении (7.4) на массовой поверхности хорошо установлено для дырок [201], то соответствующий выбор энергий частиц с импульсом выше k_F , которые нужны для определения энергетического знаменателя E_0 в УБГ, был предметом долгой дискуссии в литературе. В основном здесь обсуждались два варианта выбора для одночастичных энергий:

- “Традиционный выбор” (conventional choice), при котором одночастичные энергии (выше поверхности Ферми) задаются только кинетической энергией

$$e(k_1) = \frac{k_1^2}{2m}.$$

В этом случае в области импульса Ферми при $k_1 = k_F$ наблюдается щель в одночастичном спектре, поскольку притягивающий одночастичный потенциал $U(k_1) = U(k_1, \omega = e(k_1))$ из уравнения (7.5) учитывается только для дырок (состояний с $k_1 < k_F$), но не используется для частиц. Поэтому такой выбор также иногда называют спектром со щелью.

- Случай “непрерывного” или бесщелевого спектра, при котором одночастичные энергии (7.5) продолжают непрерывным образом в область $k_1 > k_F$.

Фактически эта дискуссия была прекращена после исследования Балдо с соавторами [202], которые показали, что непрерывный спектр позволяет учесть эффект трехнуклонных корреляций. С тех пор в вычислениях на основе схемы Бракнера–Хартри–Фока в основном используется непрерывный спектр одночастичных состояний.

Из УБГ видно, что матричные элементы T становятся комплексными для энергий выше поверхности Ферми. Это приводит к тому, что одночастичный потенциал (7.5) остается вещественным для дырочных состояний с импульсами $k_1 < k_F$, а для энергий ω , превышающих энергию Ферми $\lambda = e(k_F)$, одночастичный потенциал $U(k_1)$ имеет мнимую часть. Такая комплексная собственная энергия $U(k_1, \omega)$ используется, в частности, для вычисления нуклон-ядерного оптического потенциала [203].

Решение УБГ (7.1) для матрицы реакции и последующее вычисление одночастичного потенциала по формуле (7.5) составляют основу самосогласованной схемы вычисления одночастичных энергий и уравнения состояния. При этом решение получают на основе итераций, пересчитывая на каждом их шаге одночастичный спектр до тех пор, пока он не перестает меняться.

В такой итерационной процедуре, как правило, одночастичный спектр параметризуется с помощью эффективной массы m^* :

$$e_{\text{app}}(k_1) = \frac{k_1^2}{2m^*} + U_0. \quad (7.6)$$

Такая параметризация существенно упрощает итеративную процедуру и, в частности, приводит к тому, что энергетический знаменатель в УБГ не зависит от углов между относительным импульсом и импульсом центра масс. Следует отметить, однако, что такая параметризация с эффективной массой не совсем точна [177].

После сходимости итераций, которые обсуждались выше, уравнение состояния (энергия связи на нуклон) находится прямо из одночастичного спектра:

$$\frac{E}{A} = \frac{3}{k_F^3} \int_0^{k_F} k^2 dk \frac{1}{2} \left[\frac{k^2}{2m} + e(k) \right]. \quad (7.7)$$

7.2.1. Полный пропагатор

Для вычислений в рамках схемы Бракнера–Хартри–Фока (БХФ) достаточно использовать стандартные техники решения интегрального УБГ, предложенные еще Хафтелем и Табакином [176]. Однако в случаях вычислений, выходящих за рамки стандартной БХФ схемы, таких как нахождение собственной энергии в приближении, учитывающем следующие порядки дырочного разложения, или решение трехчастичных уравнений Бете–Фаддеева, или вычисление собственной энергии вне массовой поверхности, требуется определения полной немассовой матрицы реакции при различных энергиях. Поэтому пакетная техника дискретизации была бы здесь очень полезна. Для того, чтобы ею воспользоваться, определим далее полный пропагатор для УБГ.

Введем свободный гамильтониан для двух невзаимодействующих нуклонов в ядерной среде при фиксированном значении импульса центра масс K :

$$H_0(K) = \int d^3k |\mathbf{k}\rangle E_0(\mathbf{k}, \mathbf{K}) \langle \mathbf{k}|, \quad (7.8)$$

где $|\mathbf{k}\rangle$ обозначает свободное состояние (плоскую волну) для относительного импульса $\mathbf{k}$ и энергетическая функция $E_0(\mathbf{k}, \mathbf{K}) = e(|\mathbf{k} - \mathbf{K}|) + e(|\mathbf{k} + \mathbf{K}|)$ определяется с помощью одночастичных потенциалов.

Перепишем уравнение (7.1) в операторном виде:

$$T(K, E) = V + VQ(K)G_0(K, E)T(K, E), \quad (7.9)$$

где пропагатор $G_0(K, E)$ можно записать в виде резольвенты $G_0(K, E) = [E + i0 - H_0(K)]^{-1}$ свободного гамильтониана (7.8). Ниже явная зависимость операторов от K будет опущена для упрощения записей.

Можно легко доказать, что если ввести оператор $G(E)$, который удовлетворяет уравнению:

$$G(E) = QG_0(E) + QG_0(E)V G(E), \quad (7.10)$$

то решение УБГ (7.9), т.е матрицу реакции, можно найти из формального соотношения:

$$T(E) = V + VG(E)V, \quad (7.11)$$

аналогично тому, как можно определить t -матрицу через резольвенту полного гамильтониана в свободном пространстве.

Введем два ортогональных подпространства $\mathcal{H}_\Gamma$ и $\mathcal{H}_Q$ полного импульсного пространства $\mathcal{H}$ с учетом действия оператора $Q(K)$. Здесь $\mathcal{H}_\Gamma$ — нуль-пространство $Q(K)$ (включает все состояния $|\mathbf{k}\rangle$, для которых $Q(K)|\mathbf{k}\rangle = 0$), в то время как $\mathcal{H}_Q$ — ортогональное к нему подпространство, включающее разрешенные принципом Паули состояния. Ниже будем обозначать проекции операторов в соответствующие подпространства с помощью дополнительных индексов Γ и Q .

Поскольку Q коммутирует с $G_0(E)$, из уравнения (7.10) следует, что $G(E)$ коммутирует с Q тоже. Таким образом, уравнение (7.10) можно рассматривать отдельно в каждом подпространстве. Для наших целей достаточно ограничиться подпространством $\mathcal{H}_Q$. Заметим, что, согласно определению, обратный оператор Q^{-1} и также операторы $Q^{\frac{1}{2}}$ и $Q^{-\frac{1}{2}}$ существуют в этом подпространстве.

Перепишем уравнение (7.10) в симметричной форме:

$$Q^{-\frac{1}{2}}GQ^{-\frac{1}{2}} = G_{0Q} + G_{0Q}Q^{\frac{1}{2}}VQ^{\frac{1}{2}}Q^{-\frac{1}{2}}GQ^{-\frac{1}{2}},$$

которая аналогична резольвентному тождеству. В результате получается явное представление для оператора $G(K, E)$:

$$G(K, E) = Q^{\frac{1}{2}} \left[E + i0 - H_{0Q}(K) - Q^{\frac{1}{2}}VQ^{\frac{1}{2}} \right]_Q^{-1} Q^{\frac{1}{2}}, \quad (7.12)$$

где обратный оператор определен в $\mathcal{H}_Q$. Далее можно ввести спектральное разложение для оператора $G(K, E)$ по собственным состояниям следующего эффективного гамильтониана $H_Q(K)$:

$$H_Q(K) = H_{0Q}(K) + Q^{\frac{1}{2}}(K)VQ^{\frac{1}{2}}(K), \quad (7.13)$$

который определяется в подпространстве $\mathcal{H}_Q$ (при этом H_{0Q} — это часть свободного гамильтониана (7.8) в этом подпространстве $\mathcal{H}_Q$).

Таким образом, оператор (7.12) представляет собой резольвенту полного эффективного гамильтониана, аналогичную используемой в обыкновенной задаче рассеяния. Основное отличие здесь состоит в том, что этот оператор помимо энергии

зависит еще и от импульса центра масс K . Явная формула для матрицы реакции принимает следующий вид:

$$T(K, E) = V + VQ^{\frac{1}{2}} [E + i0 - H_Q(K)]_Q^{-1} Q^{\frac{1}{2}} V. \quad (7.14)$$

Итак, задача решения УБГ может быть сведена к виду (7.14) по аналогии с уравнением для оператора перехода в свободном пространстве. С помощью техники, предложенной в разделе 4.6.2, матрица реакции может быть найдена из однократной диагонализации матрицы эффективного гамильтониана $H_Q(K)$ в подпространстве $\mathcal{H}_Q$.

7.2.2. Вычисление матрицы реакции в пакетном представлении

Поскольку подпространство $\mathcal{H}_Q$ включает состояния свободного гамильтониана с относительным импульсом $k > k_0$ (см. уравнение (7.3)), удобно ввести бины дискретизации таким образом, чтобы импульс k_0 совпадал с границей одного из бинов. Таким образом для каждого значения $K < k_F$, вводятся два набора $\{|x_i\rangle\}_{i=1}^{N_1}$ и $\{|x_i\rangle\}_{i=N_1+1}^N$, представляющих собой базисы для подпространств $\mathcal{H}_\Gamma$ и $\mathcal{H}_Q$ соответственно, при этом $k_{N_1} = \sqrt{k_F^2 - K^2}$.

В случае усреднения по углам для проектора Паули матричные элементы оператора $Q(K)$ имеют простой вид:

$$Q(K) = \sum_{\alpha} \sum_{i=N_1+1}^N |x_i, \alpha\rangle Q_i(K) \langle x_i, \alpha|, \quad Q_i = \frac{1}{d_i} \int_{k_{i-1}}^{k_i} dk Q(k, K), \quad d_i = k_i - k_{i-1}. \quad (7.15)$$

Также будем считать, что собственные значения свободного гамильтониана H_0 не зависят от углов между относительным импульсом и импульсом центра масс. В этом случае матрица эффективного гамильтониана разбивается на отдельные матрицы для обычных NN парциальных волн полностью аналогично гамильтониану двух взаимодействующих нуклонов в свободном пространстве (ниже l, s, j — это орбитальный момент, спин и полный момент двух нуклонов в среде):

$$[H]_{il, i'l'}^{js} = [H_0]_i \delta_{ii'} \delta_{ll'} + \sqrt{Q_i} V_{il, i'l'}^{js} \sqrt{Q_{i'}}, \quad (7.16)$$

где $i, i' = N_1 + 1, \dots, N$, $l, l' = |j - s|, j + s$ (или $l = l' = j$ для несвязанных каналов), и $[H_0]_i$ — диагональный матричный элемент (собственное значение) свободного гамильтониана H_0 .

Непрерывный спектр эффективного гамильтониана (7.13) начинается от порогового значения $E_0(k, K)$ для Паули-разрешенного пространства, которое равно удвоенной энергии Ферми 2λ . Диагонализация матрицы гамильтониана в базисе СВП приводит либо к набору одноканальных псевдосостояний $|z_k^l\rangle$ с энергиями E_k^l или к набору псевдосостояний задачи со связанными каналами $|z_k^\varkappa\rangle$ с собственными значениями $E_k^\varkappa$. Кроме того, эффективный гамильтониан может иметь связанные состояния $|z_n^b\rangle$ с энергиями E_n , расположенными ниже порога континуума.

На основе пакетной техники полная резольвента $G(K, E)$ из уравнения (7.12) для каждой NN конфигурации с определенными значениями j и s (и определенной четностью) может быть представлена в виде спектрального разложения по псевдосостояниям:

$$G^{js}(K, E) \approx \sum_{n=1}^{N_b} \frac{|z_n^b\rangle\langle z_n^b|}{E - E_n} + \sum_{\varkappa=1}^d \sum_{k=1}^{N_{\text{eff}}} |z_k^\varkappa\rangle g_k^\varkappa(E) \langle z_k^\varkappa|, \quad (7.17)$$

где степень вырожденности непрерывного спектра d равна 2 или 1, N_{eff} — число псевдосостояний эффективного гамильтониана в каждом канале.

После этого из уравнения (7.14) легко получить аналогичное разложение для матрицы реакции, которое удобно записать в виде суммы трех слагаемых:

$$T = V + T^b + T^c, \quad (7.18)$$

где T^b и T^c отвечают вкладам связанных состояний и вкладу от непрерывного спектра.

Явное выражение для этих слагаемых:

$$T_{il, i'l'}^{b, js}(K, E) = \sum_{n=1}^{N_b} \frac{\tilde{V}_{il, n}^{js} \tilde{V}_{i'l', n}^{js}}{E - E_n}, \quad (7.18a)$$

$$T_{il, i'l'}^{c, js}(K, E) = \sum_{\varkappa, k} \tilde{V}_{il, k, \varkappa}^{js} g_k^\varkappa(E) \tilde{V}_{i'l', k, \varkappa}^{js}, \quad (7.18b)$$

где матричные элементы взаимодействия имеют следующий вид:

$$\tilde{V}_{il, k, \varkappa}^{js} \equiv \langle x_i^l | V Q^{\frac{1}{2}} | z_k^\varkappa \rangle = \sum_{l', i} V_{il, i'l'}^{js} \sqrt{Q_{i'}} C_{i'k}^{l' \varkappa}, \quad (7.19)$$

и аналогичные выражения для вклада от связанных состояний.

Следует отметить, что в подпространстве $\mathcal{H}_\Gamma$ можно не вводить пакетный базис, а использовать его только для разложения резольвенты $G(K, E)$ по псевдосостояниям (7.17) “в середине” выражения (7.18).

Как отмечалось выше, в спектре эффективного гамильтониана (7.16) могут быть состояния с энергиями E_n , лежащими ниже порога непрерывного спектра:

$$E_n - 2\lambda < 0. \quad (7.20)$$

Такие связанные состояния могут приводить к численным неустойчивостям при традиционных методах решения уравнений БХФ, однако в предложенной схеме никаких проблем не возникает, поскольку вклад T^b выделяется явно. Такие связанные состояния в ядерной среде также интересны сами по себе, прежде всего, в связи с вопросом о существовании dineйтронных связанных состояний (см. недавние исследования [204]).

7.3. Вычисление уравнения состояния симметричной ядерной материи

Результаты расчетов, рассматриваемых в этом разделе, были получены для случая симметричной ядерной материи при различных плотностях, которые задаются значениями импульса Ферми k_F . Также здесь используется усреднение по углам для оператора Паули (7.3) и приближение эффективной массы для одночастичных энергий. Для расчетов использовался NN потенциал CD Bonn [205], с np взаимодействием во всех парциальных каналах. При этом использовался пакетный базис размерности $N = 100$ для дискретизации по относительному импульсу k . Такой размерности базиса оказалось достаточно для аппроксимации непрерывных энергетических зависимостей операторов и энергий связи. Число точек M сетки по импульсу центра масс K зависело от k_F и не превышало $M = 100$.

7.3.1. Двухчастичные связанные состояния

Рассмотрим сначала вопрос о возникновении связанных состояний в ядерной среде. Как известно, есть только одно связанное состояние в двухнуклонной системе в вакууме — дейтрон. И, конечно, все реалистические NN потенциалы дают связанное состояние при энергии близкой к -2.224 МэВ для связанных каналов 3S_1 - 3D_1 .

Можно было бы предположить, что принцип Паули будет дополнительно препятствовать образованию связанного состояния нуклонов в ядерной среде. Однако помимо самого NN взаимодействия важным фактором для формирования связанных состояний является плотность состояний вблизи порога. Эта плотность увеличивается в

ядерной среде при увеличении импульса Ферми. Поэтому энергия связанного состояния $E_1 - 2\lambda$ увеличивается по абсолютному значению при низких плотностях и достигает минимума, составляющего примерно -4.5 МэВ, при $k_F = 0.6 \text{ Фм}^{-1}$. Соответствующие зависимости энергии от плотности показанных на Рис. 7.1. Согласно принципу Паули, энергия связи становится меньше для больших значений k_F . Однако квази-дейтрон остается и при импульсе Ферми $k_F = 1.3 \text{ Фм}^{-1}$, который отвечает значению плотности чуть ниже равновесной.

Энергия связи дейтрона в среде также весьма чувствительна к значению импульса центра масс K и быстро уменьшается при его увеличении.

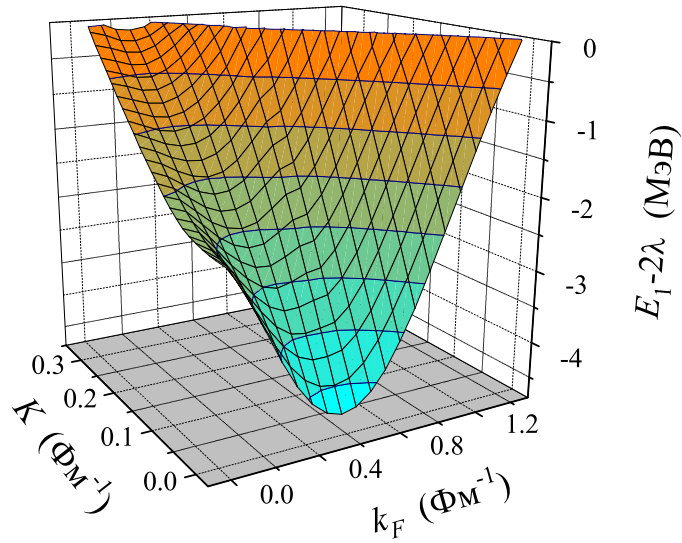


Рисунок 7.1. Энергия двухнуклонного связанного состояния в ядерной материи в канале 3SD_1 как функция импульса центра масс K и импульса Ферми k_F .

Для исследования связанных состояний, представленных выше, в качестве одночастичных энергий использовалась кинетическая энергии частиц (без учета одночастичных потенциалов). Включение одночастичных потенциалов приведет к уменьшению энергий связи, поскольку плотность состояний вблизи поверхности Ферми уменьшается. Импульсная зависимость собственной энергии обычно учитывается с помощью эффективной массы m^* (см. уравнение (7.6) и обсуждение после него). Вместе с тем, учет одночастичных потенциалов приводит к усилению такой эффективной массы вблизи энергии Ферми ($m^* \rightarrow m$), которая возникает за счет энергетической зависимости собственной энергии (E -mass эффект) [180]. Таким

образом, вычисления, не учитывающие эффект одночастичных потенциалов, могут давать достаточно точные результаты, поскольку эффективная масса близка к массе нуклона, а постоянное слагаемое U_0 в одночастичном потенциале (7.6) сокращается в разности $E_B = E_1 - 2\lambda$.

Хотя в вакууме есть только одно связанное состояние в NN системе, в ядерной среде могут возникать связанные состояния в других парциально-волновых каналах. Так используемый NN потенциал приводит к связанному состоянию в изовекторном канале 1S_0 , т.е. динейтрону (см. также [204]). Зависимость энергии такого состояния от плотности среды и импульса центра масс приводится на Рис. 7.2. Из рисунка видно, что связанное состояние возникает в синглетном канале в диапазоне импульсов Ферми k_F до 1 Фм^{-1} с максимальной энергией связи 0.6 МэВ , что значительно меньше энергии связи дейтрона.

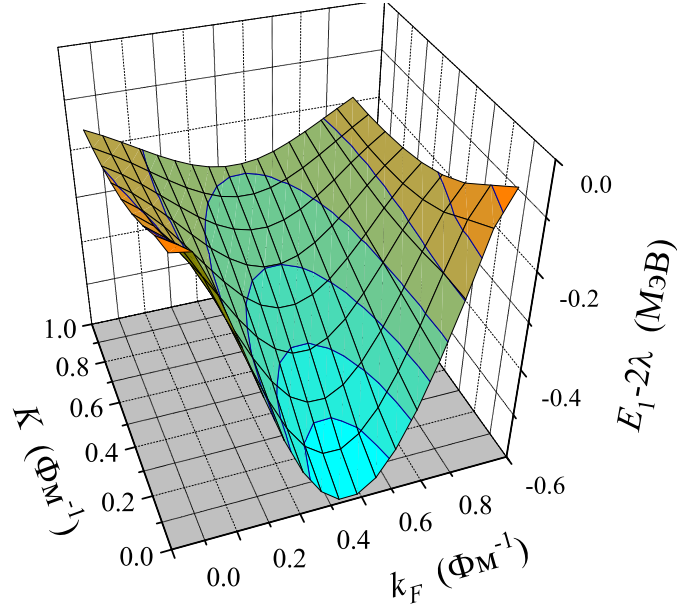


Рисунок 7.2. Энергия динейтронного связанного состояния в ядерной среде 1S_0 как функция импульса центра масс K и импульса Ферми.

Наличие таких квазисвязанных состояний, представляющих собой суперпозицию двухчастичных (pp) состояний в ядерной среде, может быть проинтерпретировано как индикатор наличия сверхтекучей фазы [206] и возникновения парных корреляций в соответствующих каналах. Следует заметить, однако, что согласованное описание короткодействующих корреляций и эффектов спаривания требует включения помимо нормальной одночастичной функции Грина аномальной части [179, 193, 207, 208].

Также такое описание, требует включения двухдырочных (hh) диаграмм. Такое обобщение дается во второй части этой главы.

7.3.2. Одночастичная собственная энергия

Одно из основных преимуществ предложенной схемы решения УБГ — ее эффективность в случае, когда матрица реакции нужна для многих значений энергии E . Диагонализационный подход оказывается очень удобен для нахождения энергетической и импульсной зависимости реальной и мнимой частей одночастичного потенциала, а также собственной энергии $U(k_1, \omega)$, определенной в уравнении (7.5).

Явную формулу для собственной энергии (7.5) в случае усредненного по углам проектора Паули можно переписать в виде парциально-волнового разложения:

$$U(k_1, \omega) = \frac{2}{k_1} \sum_{j,sl} (2j+1)(2\tau+1) \int_{\Omega(k_1)} dk dK k K T_{ll}^{js}(k, k; K, E = [\omega + E_0(k, K) - e(k_1)]) , \quad (7.21)$$

где область интегрирования $\Omega(k_1)$ по переменным k и K зависит от значения одночастичного импульса k_1 [176]. Используя дискретное пакетное представление для матрицы реакции и сетку дискретизации по импульсу центра масс $\{K_n\}$ с весами $\{\Delta K_n\}$, можно свести это выражение к дискретной сумме:

$$U(k_1, \tilde{\omega} + e(k_1)) = \frac{2}{k_1} \sum_{j,sl} (2j+1)(2\tau+1) \sum_{i,n} T_{il,il}^{js}(K_n, \tilde{\omega} + H_0(k_i, K_n)) \Delta K_n. \quad (7.22)$$

Здесь матричные элементы $T_{il,il}^{js}$ определяются уравнениями (7.18), в которых явно выделяется часть, включающая взаимодействие V , а также вклад от связанных состояний в собственную энергию. Такая диагонализационная процедура для матрицы гамильтониана должна быть сделана для каждой парциально-волновой конфигурации и каждого значения K_n , далее матричные элементы для различных k_i и $\tilde{\omega}$ вычисляются с использованием одной и той же системы псевдосостояний эффективного гамильтониана.

На Рисс. 7.3 и 7.4 показаны реальная и мнимая части собственной энергии U , вычисленные при $k_F = 1.3 \text{ Фм}^{-1}$ для различных одночастичных импульсов k_1 и энергий ω . Аналитическая структура УБГ приводит к тому, что мнимая часть собственной энергии отлична от нуля при энергиях ω , превышающих энергию Ферми

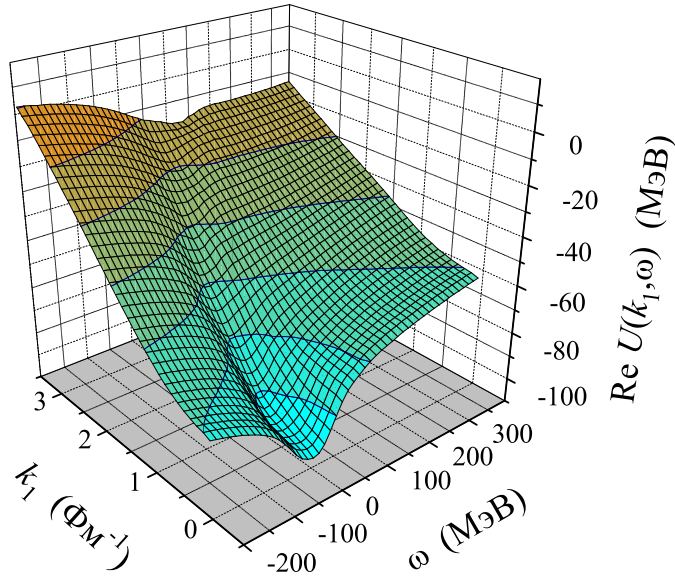


Рисунок 7.3. Реальная часть собственной энергии нуклона при $k_F = 1.3 \text{ Фм}^{-1}$ как функция одночастичного импульса и энергии.

λ , которая в рассматриваемом случае составляет около -37 МэВ . Из рисунка также видно, что $\text{Re } U(k_1, \omega)$ уменьшается, когда энергия ω растет, оставаясь отрицательной, и имеет минимум около $\omega = 0$, а далее становится положительной при положительных значениях ω .

Как следствие, импульсная зависимость одночастичного потенциала $U(k_1, \omega)$ при фиксированном значении ω оказывается сильнее (кривая идет круче вверх), чем получается из самосогласованного определения энергетической переменной согласно уравнению (7.5), если мы рассмотрим импульс ниже или немного выше импульса Ферми. Это иллюстрируется на Рис. 7.5, на котором сравниваются результаты для $\text{Re } U(k_1, \omega)$ для разных энергий ω с одночастичным потенциалом, вычисленным по самосогласованной схеме.

Это свойство хорошо известно из литературы как увеличение эффективной массы при энергии Ферми за счет энергетической зависимости собственной энергии (так называемый E -mass эффект [180, 209]).

7.3.3. Вычисление одночастичного потенциала и уравнения состояния

Вычислим далее самосогласованный одночастичный потенциал, используя простое приближение эффективной массы для одночастичной энергии на каждом

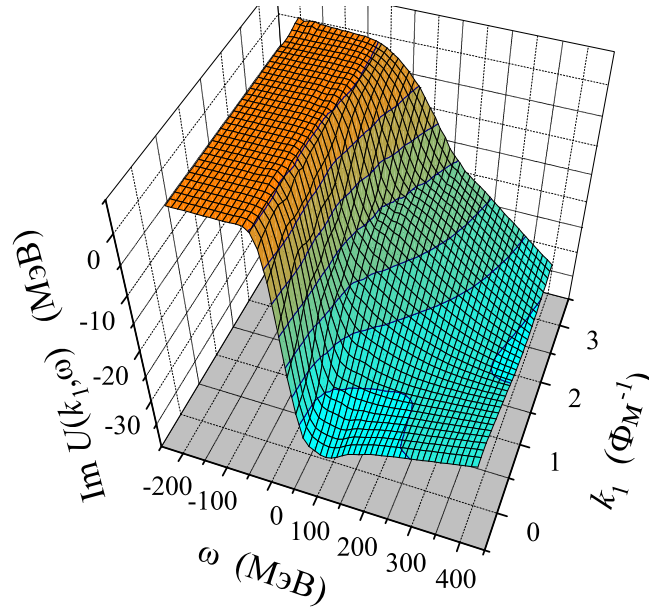


Рисунок 7.4. Мнимая часть собственной энергии нуклона при $k_F = 1.3 \text{ Фм}^{-1}$ как функция импульса и энергии.

шаге итераций. Однако для того, чтобы оценить устойчивость этой техники, в расчетах использовались два разных варианта такого приближения, отличающиеся величиной максимального одночастичного импульса $k_1^{\max}$, использованного для подгонки параметров эффективной массы (величин m^* и U_0): $k_1^{\max} = 1.5k_F$ (расчет 1) и $k_1^{\max} = 4k_F$ (расчет 2).

Оказалось, что для случая 1 с меньшим интервалом фиттирования получаются немного меньшие значения для эффективной массы ($m^*/m = 0.694$ при $k_F = 1.3 \text{ Фм}^{-1}$), чем для случая 2, где получается значение $m^*/m = 0.746$ (здесь m — масса нуклона). На Рис. 7.6а и б представлены реальные и мнимые части одночастичных потенциалов, найденных из самосогласованных итераций, используя две эти аппроксимации. Видно, что оба расчета дают кривые близкой формы, однако расчет 2 приводит к несколько большим абсолютным значениям реальной и мнимой частей. Эти различия кажутся достаточно небольшими на рисунке, однако, расчет 2 приводит к собственной энергии, которая на 2 МэВ глубже, чем для расчета 1.

Найденные отличия становятся более заметны в зависимостях энергии связи от импульса Ферми k_F , полученных из соответствующих одночастичных потенциалов из уравнения (7.7). На Рис. 7.7 сравниваются результаты, полученные на основе пакетной техники для обсуждаемых выше приближений 1 и 2, с результатами традиционных

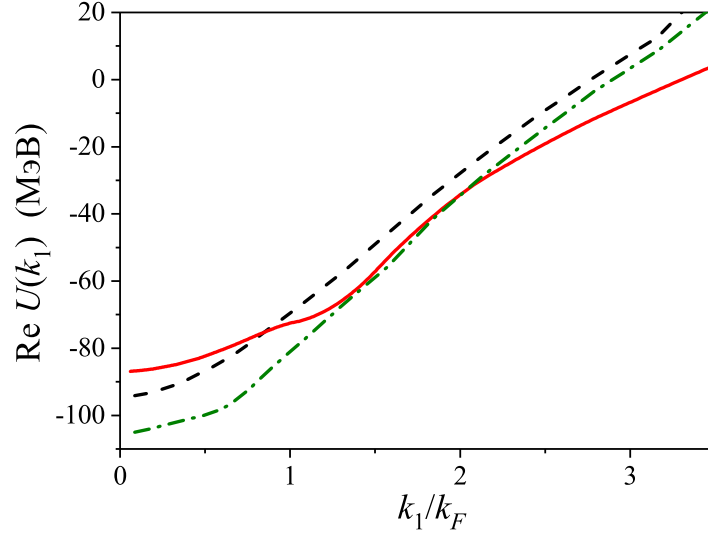


Рисунок 7.5. Реальная часть собственной энергии, вычисленная при фиксированных энергиях $\omega = -50$ МэВ (штриховая кривая) и $\omega = 0$ МэВ (штрих-пунктирная кривая) и найденная на основе самосогласованной схемы из уравнения (7.5) (сплошная кривая). Значение импульса Ферми $k_F = 1.3 \text{ ФМ}^{-1}$

самосогласованных расчетов из работ [180, 210], где также использовались приближение эффективной массы для одночастичных энергий и точный, а не усредненный по углам оператор Паули. Согласие полученных здесь результатов для случая 2 с этими более ранними расчетами очень хорошее, в то время как расчет 1 приводит к меньшей величине энергии связи. Эти результаты иллюстрируют явно проблемы приближения эффективной массы.

Таким образом, полученные здесь результаты, показывают, что развитая диагонализационная техника очень эффективна для вычисления матрицы реакции и одночастичного спектра в симметричной ядерной материи разной плотности. Однако аккуратная трактовка уравнения состояния требует учета вклада трехчастичных корреляций в энергию связи. Здесь необходимо решение сложных трехчастичных уравнений для матрицы реакции, таких как уравнения Бете–Фаддеева. Прямое решение этих уравнений для реалистических NN - и $3N$ -взаимодействий в полностью самосогласованной схеме остается очень сложной задачей даже в наши дни. Однако, по-видимому, эффективный трехчастичный гамильтониан в разрешенном проекторами Паули подпространстве можно будет ввести и для такой задачи, поэтому диагонализационная техника может быть развита и здесь, что существенно упростило

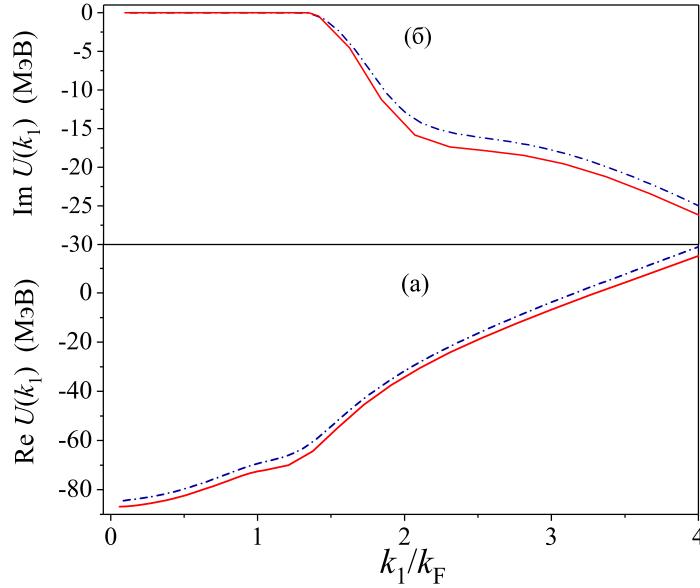


Рисунок 7.6. Реальная (а) и мнимая (б) части одночастичных потенциалов, вычисленных в приближении эффективной массы в расчетах 1 (штрих-пунктирная кривая) и 2 (сплошная кривая).

бы нахождение трехчастичных корреляций.

7.4. Учет двухдырочных корреляций

Обратимся теперь к более общей задаче в ядерной среде, когда учитываются также двухдырочные (hh) корреляции.

7.4.1. Уравнение для T -матрицы с пропагатором Галицкого–Фейнмана

T -матрица в среде удовлетворяет интегральному уравнению:

$$T(E) = V + VG_0^{\Pi}(E)T(E), \quad (7.23)$$

где $G_0^{\Pi}(E)$ свободный пропагатор и V исходное взаимодействие нуклонов. Опустим здесь квантовые числа спина и изоспина для простоты.

Как и в случае схемы БХФ, рассмотренной выше, полный пропагатор $G^{\Pi}(E)$ можно ввести следующим образом [185, 189]:

$$[G^{\Pi}(E)]^{-1} = [G_0^{\Pi}(E)]^{-1} - V. \quad (7.24)$$

Используя оператор (7.24), можно получить явное выражение для T -матрицы:

$$T(E) = V + \Delta T(E), \quad \Delta T(E) = VG^{\Pi}(E)V, \quad (7.25)$$

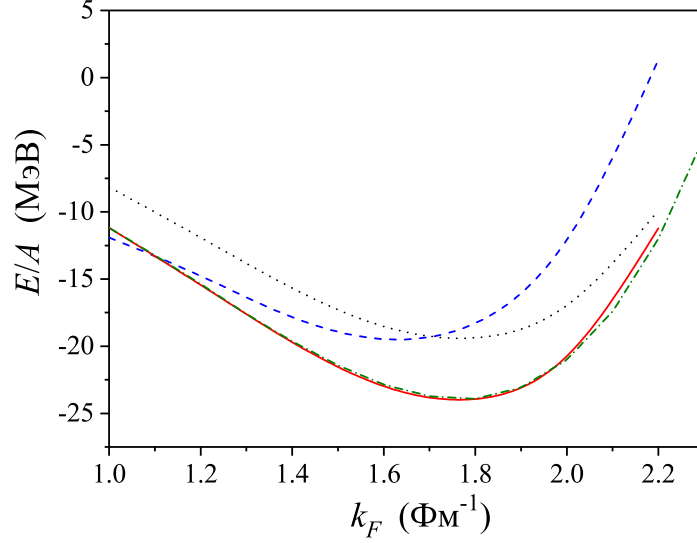


Рисунок 7.7. Энергия связи на нуклон, полученная на основе пакетной техники в случае аппроксимации эффективной массы в расчете 1 (штриховая кривая) и 2 (сплошная кривая) в сравнении с результатами других подходов, полученных на основе традиционного выбора одночастичного спектра (точечная кривая) и полного самосогласованного расчета с непрерывным одночастичным спектром (штрих-пунктирная кривая) [180, 210].

где $\Delta T(E)$ — динамическая часть.

В простейшем случае учета двухдырочных корреляций в приближении среднего поля используют свободный пропагатор Галицкого–Фейнмана [182, 189] (так называемый rphh пропагатор), функция Грина для которого имеет следующий вид:

$$G_0^{\Pi}(k_1, k_2; E) = \frac{\theta(k_1 - k_F)\theta(k_2 - k_F)}{E + i0 - (e(k_1) + e(k_2))} - \frac{\theta(k_F - k_1)\theta(k_F - k_2)}{E - i0 - (e(k_1) + e(k_2))}. \quad (7.26)$$

Оператор $G^{\Pi}(E)$ из уравнения (7.24) рассматривался раньше в связи с изучением спаривания [196] и сечений нуклон-нуклонного рассеяния в среде [185]. С таким пропагатором также проводились самосогласованные расчеты уравнения состояния [190]. С точки зрения теории рассеяния в ядерной среде T -матрица (7.23) с rphh пропагатором G_0^{Π} впервые исследовалась в работе [182]. Хотя такой пропагатор (7.26) отвечает приближению среднего поля, задачу с ним можно рассматривать как простейший случай полной самосогласованной схемы метода самосогласованных функций Грина (СФГ)¹⁷.

¹⁷ Будем далее использовать аббревиатуру согласно английскому названию — self-consistent Greens function (SCGF) method.

В предыдущих разделах и работе [86], был использован подход БХФ, в котором полный пропагатор $G_{\text{ВНФ}}^{\text{II}}$ был представлен в виде резольвенты эффективного гамильтониана в среде. Ниже будет выведена аналогичная схема для пропагатора Галицкого–Фейнмана.

7.4.2. Формулировка в пространстве относительных импульсов

В случае приближения среднего поля оператор Паули определяется ограничением на одночастичные импульсы как в уравнении (7.26). Поэтому удобно поделить двухчастичное импульсное пространство $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ на следующие подпространства: двухдырочное (hh) с проектором $\mathcal{P}$ и двухчастичное (pp) с проектором $\mathcal{Q}$ как следующие суммы:

$$\mathcal{P} = \sum_{q_1, q_2 < k_F} |\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\rangle \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2|, \quad \mathcal{Q} = \sum_{k_1, k_2 \geq k_F} |\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2|, \quad (7.27)$$

где опущены спин-изоспиновые квантовые числа и предполагается, что состояния $|\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\rangle$ и $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle$ антисимметризованы. Следует отметить, что эти два подпространства не покрывают полное импульсное пространство, и есть еще остаточный оператор $\mathcal{R} = 1 - (\mathcal{P} + \mathcal{Q})$.

Части свободного гамильтониана в pp- и hh-подпространствах имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} H_{0P} \mathcal{P} &= \sum_{q_1, q_2 < k_F} |\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\rangle (e(q_1) + e(q_2)) \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2|, \\ \mathcal{Q} H_{0Q} \mathcal{Q} &= \sum_{k_1, k_2 \geq k_F} |\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle (e(k_1) + e(k_2)) \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2|, \end{aligned} \quad (7.28)$$

где $e(q)$ и $e(k)$ — одночастичные (sh) и однодырочные (sp) энергии. Ниже проекции операторов на соответствующие подпространства будут обозначаться нижними индексами P и Q . Таким образом, полный свободный гамильтониан представляется прямой суммой:

$$H_0 = \mathcal{P} H_{0P} \mathcal{P} + \mathcal{Q} H_{0Q} \mathcal{Q}. \quad (7.29)$$

Перейдем теперь к импульсу центра масс и относительному импульсу:

$$\mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad \mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1). \quad (7.30)$$

Здесь $\mathbf{K}$ — импульс центра масс¹⁸ и $\mathbf{k}$ — относительный импульс. Как уже упоминалось выше, поскольку $\mathbf{K}$ сохраняется, уравнение (7.23) обычно решается в пространстве

¹⁸ Множитель $\frac{1}{2}$ снова выбран здесь из соображений удобства.

относительного импульса $\mathbf{k}$, где ось z выбирается по направлению импульса центра масс $\mathbf{K}$. Таким образом, пространство задачи определяется относительным импульсом, а значение K играет роль внешнего параметра.

В таком представлении операторы Паули в pp - и hh -подпространствах принимают следующий вид:

$$\mathcal{Q}(K) = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle Q_K(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}|, \quad \mathcal{P}(K) = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle P_K(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}|, \quad (7.31)$$

где $P_K(\mathbf{k}) = \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{K}|) \theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{K}|)$ и $Q_K(\mathbf{k}) = \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{K}| - k_F) \theta(|\mathbf{k} - \mathbf{K}| - k_F)$ зависят от импульсов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{K}$.

Уравнение для T -матрицы (7.23) имеет тот же вид, только добавляется зависимость от импульса K :

$$T(K, E) = V + V G_0^{\Pi}(K, E) T(K, E), \quad (7.32)$$

где оператор $G_0^{\Pi}(K, E)$ можно записать в виде двух слагаемых:

$$G_0^{\Pi}(K, E) = -\mathcal{P}(K)[E - i0 - H_{0P}(K)]^{-1} + \mathcal{Q}(K)[E + i0 - H_{0Q}(K)]^{-1}, \quad (7.33)$$

Здесь $H_0(K)$ двухчастичный свободный гамильтониан (7.29), в котором одночастичные энергии берутся при фиксированном значении K .

Для наглядности удобно представить операторы в виде матриц с проекциями на P и Q подпространства в полном пространстве $\mathcal{P}(K) \oplus \mathcal{Q}(K)$. Для дальнейших целей удобно ввести матрицу O в таком смешанном hh - и pp -представлении:

$$O(K) = \begin{pmatrix} \mathcal{P}(K) & 0 \\ 0 & \mathcal{Q}(K) \end{pmatrix}. \quad (7.34)$$

Операторы $\mathcal{P}$ и $\mathcal{Q}$ являются проекторами, т.е. $\mathcal{Q}^2(K) = \mathcal{Q}(K)$ и то же самое для $\mathcal{P}(K)$. Поскольку $\mathcal{P}$ и $\mathcal{Q}$ коммутируют с $H_0(K)$, оператор G_0^{Π} из уравнения (7.33) можно переписать в симметричном представлении $G_0^{\Pi}(K, E) = O(K) \tilde{G}_0^{\Pi}(K, E) O(K)$, где оператор $\tilde{G}_0^{\Pi}(K, E)$ имеет диагональную матричную форму:

$$\tilde{G}_0^{\Pi}(K, E) = \begin{pmatrix} -[E - i0 - H_{0P}(K)]_{PP}^{-1} & 0 \\ 0 & [E + i0 - H_{0Q}(K)]_{QQ}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (7.35)$$

Удобно ввести также оператор $\tilde{V}$, умножив взаимодействие V слева и справа на матрицу O :

$$\tilde{V}(K) \equiv O(K) V O(K). \quad (7.36)$$

Тогда уравнение для модифицированного оператора $\tilde{T} \equiv OTO$ принимает знакомый вид:

$$\tilde{T}(K, E) = \tilde{V}(K) + \tilde{V}(K)\tilde{G}_0^{\text{II}}(K, E)\tilde{T}(K, E). \quad (7.37)$$

Такой оператор отвечает модифицированному взаимодействию $\tilde{V}$ из уравнения (7.36).

Далее можно формально ввести полный пропагатор аналогично уравнению (7.24):

$$[\tilde{G}^{\text{II}}(K, E)]^{-1} = [\tilde{G}_0^{\text{II}}(K, E)]^{-1} - \tilde{V}(K). \quad (7.38)$$

Ниже будет показано, что такое преобразование позволит найти замкнутое выражение для T -матрицы в ядерной среде в виде разложения по собственным состояниям эффективного гамильтониана.

7.4.3. Двухчастичный пропагатор как резольвента эффективного гамильтониана

Удобно ввести далее оператор J :

$$J = \begin{pmatrix} -1_{PP} & 0 \\ 0 & 1_{QQ} \end{pmatrix}, \quad (7.39)$$

диагональные части которого пропорциональны единичным операторам в hh - и pp -подпространствах.

Тогда двухчастичный свободный пропагатор $\tilde{G}_0^{\text{II}}$ из уравнения (7.35) может быть формально записан как резольвента (в обобщенном смысле) двухчастичного свободного гамильтониана в среде:

$$\tilde{G}_0^{\text{II}}(K, E) = [JE + i0 - JH_0(K)]^{-1}. \quad (7.40)$$

Такой вид позволяет записать спектральное разложение для оператора $\tilde{G}_0^{\text{II}}(K, E)$ как интеграл по состояниям непрерывного спектра $H_0(K)$ (т.е. по плоским волнам).

Легко видеть, что уравнение (7.38) аналогично традиционному резольвентному тождеству в теории рассеяния, поэтому явный вид для $\tilde{G}^{\text{II}}$ будет следующим:

$$\tilde{G}^{\text{II}}(K, E) = [JE + i0 - J\tilde{H}(K)]^{-1}, \quad (7.41)$$

где роль эффективного гамильтониана играет оператор:

$$\tilde{H}(K) = H_0(K) + J\tilde{V}(K). \quad (7.42)$$

Получается, что, если рассматривать оператор $\tilde{G}_0^{\text{II}}$ как обобщенную резольвенту свободного гамильтониана H_0 , то оператор $\tilde{G}^{\text{II}}$ будет представлять собой обобщенную резольвенту эффективного гамильтониана $\tilde{H}(K)$. Оба соотношения (7.40) и (7.41) означают, что можно ввести общую полную систему собственных состояний для соответствующего гамильтониана и его обобщенной резольвенты.

Итак, если будет известен оператор $\tilde{G}^{\text{II}}$ из уравнения (7.41), исходная T -матрица в ядерной среде может быть найдена из явного выражения:

$$T(K, E) = V + VO(K)\tilde{G}^{\text{II}}(K, E)O(K)V. \quad (7.43)$$

В матричном $P+Q$ представлении, эффективный гамильтониан записывается как:

$$\tilde{H}(K) = \begin{pmatrix} H_{0P}(K) - \tilde{V}_{PP}(K) & -\tilde{V}_{PQ}(K) \\ \tilde{V}_{QP}(K) & H_{0Q} + \tilde{V}_{QQ}(K) \end{pmatrix}. \quad (7.44)$$

Таким образом, отрицательный знак у hh-части двухчастичного свободного пропагатора приводит к тому, что полный двухчастичный гамильтониан — неэрмитов оператор. Следует отметить, что задача на собственные значения для такого гамильтониана:

$$\tilde{H}(K)|\Psi(K, E)\rangle = E|\Psi(K, E)\rangle \quad (7.45)$$

аналогичная используемой в методе случайной фазы для исследования rphh случая [179].

Задача на собственные значения (7.45) для также связана напрямую с задачей на собственные значения для ядра уравнения (7.37), т.е. $\tilde{G}_0^{\text{II}}(K, E)\tilde{V}(K)$. Такая задача для нулевого импульса центра масс рассматривалась в рамках стабилизационного подхода [197].

Ниже будет введен базис для hh- и pp-подпространств и будет рассмотрен матричный формализм для нахождения $\tilde{G}^{\text{II}}$ из диагонализации матрицы эффективного гамильтониана.

7.5. Спектр эффективного гамильтониана и возникновение спаривания

Имея в виду в основном эффект спаривания, в этом разделе будет рассмотрен случай нулевого импульса центра масс $K = 0$. В этом случае, подпространства $\mathcal{P}$ и $\mathcal{Q}$

определяются простыми условиями на относительный импульс k : $k < k_F$ и $k > k_F$ соответственно, при этом пространство $\mathcal{P} + \mathcal{Q}$ совпадает с полным пространством относительного импульса. Оператор O в полном пространстве $\mathcal{P} + \mathcal{Q}$ сводится к единичной матрице, т.е. $\tilde{V}(K) = V$. Поэтому для упрощения записи знак тильды и явная зависимость от K будут опущены у всех операторов в этом разделе. Также здесь используются одночастичные кинетические энергии в качестве одночастичного и однодырочного спектров $e(k)$.

7.5.1. Решение задачи на собственные значения в пакетном базисе

Чтобы найти спектр полного гамильтониана (7.42), удобно использовать процедуру дискретизации и пакетный базис.

При этом пространство относительных импульсов делится на непересекающиеся интервалы $\{\mathfrak{D}_i = [k_{i-1}, k_i]\}_{i=1}^{M^+}$ с $k_0 = k_F$ в $\mathcal{Q}$ -подпространстве (для $k > k_F$) и аналогичный набор $\{\bar{\mathfrak{D}}_i = [k_{i-1}, k_i]\}_{i=-M^-+1}^0$ с $k_{-M^-} = 0$ в $\mathcal{P}$ -подпространстве (для $k < k_F$). Таким образом, полное число состояний в обоих подпространствах $\mathcal{P} + \mathcal{Q}$ $M = M^+ + M^-$.

Пакетные базисы в обоих подпространствах $|x_i; \alpha\rangle$ определяются как интегралы от свободных состояний (плоских волн) $|k\rangle$ по интервалам с учетом всех необходимых спин-угловых частей $|\alpha\rangle \equiv |l, s, j\rangle$ (здесь l , s и j — значения орбитального момента, спина и полного углового момента соответственно) [85, 86]:

$$|x_i, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \int_{k_{i-1}}^{k_i} dk |k, \alpha\rangle, \quad d_i = k_i - k_{i-1}. \quad (7.46)$$

Как и во всех рассмотренных ранее примерах, пакетный базис здесь очень удобен, поскольку свободный гамильтониан H_0 и матрица J имеют в нем диагональный вид.

Вопрос выбора оптимальной сетки дискретизации довольно важен здесь, поскольку нужно получить полный базис в обоих подпространствах. В расчетах используется модифицированная зеркальная сетка Чебышева:

$$\begin{aligned} k_i &= k_F + k_m \left[\tan \left(\frac{i}{M^+ + 1} \frac{\pi}{2} \right) \right]^t, & i &= 1, \dots, M^+ \\ k_i &= k_F - k_m \left[\tan \left(\frac{-i}{M^+ + 1} \frac{\pi}{2} \right) \right]^t, & i &= -1, \dots, -M^- \end{aligned} \quad (7.47)$$

Эта сетка симметрична по отношению к импульсу Ферми k_F , т.е. $k_i - k_F = k_F - k_{-i}$, $i = 1, \dots, M^-$, однако, размерности M^+ и M^- могут быть разными. В уравнении (7.47) k_m — масштабный параметр, а t определяет разреженность узлов сетки. Также предполагается, что $k_0 = k_F$ и $k_{-M^-} = 0$. Последнему условию можно удовлетворить, выбирая значение k_m для данной размерности M^- .

В таком базисе заполняется матрица гамильтониана (7.42) и решается задача на собственные значения:

$$\det ||H_{ii'} - E\delta_{ii'}|| = 0, \quad (7.48)$$

где $H_{ii'}$ — элементы матрицы гамильтониана в полном пространстве и δ — символ Кронекера.

Посмотрим, как должен выглядеть спектр эффективного гамильтониана H . Поскольку V — короткодействующее взаимодействие, непрерывный спектр оператора H должен совпадать с непрерывным спектром свободного гамильтониана H_0 . Он начинается от порогового значения $E = E_{\text{th}}$ для hh-части спектра ($E_{\text{th}} \equiv 2e(k=0)$) и состоит из двух ветвей, т.е. hh и pp, с существенно особой точкой $2\lambda = 2e(k_F)$ между ними, которая определяет порог pp-части спектра.

Хотя сам оператор H неэрмитов, его матрица и след являются вещественными, поэтому у него могут быть комплексные собственные значения, которые должны возникать в виде комплексно сопряженных пар. В случае NN взаимодействия эффективный гамильтониан имеет только одну пару таких собственных состояний с комплексными энергиями, реальные части которых находятся вблизи пороговой энергии 2λ . Наличие таких собственных состояний свидетельствует о присутствии сверхтекучей фазы. Ниже будет показано, что эффективный гамильтониан может также иметь связанные состояния с вещественными энергиями.

В результате диагонализации матрицы полного гамильтониана в пакетном базисе (7.46) получается биортогональный набор собственных векторов $\{|z_k\rangle\}_{k=1}^M$ и $\{|\bar{z}_k|\}_{k=1}^M$, соответствующих собственным значениям E_k . Основная часть этих состояний относится к дискретизованному континууму H , в то время как могут быть еще связанные состояния с вещественными или комплексными энергиями. Дискретизованный спектр H для двух таких случаев показан на Рис. 7.8 для связанных каналов 3SD_1 и для nn канала 1S_0 . Здесь и далее используется NN потенциал CD Bonn [205]. Можно показать [87, 90], что левые собственные вектора матрицы H связаны с

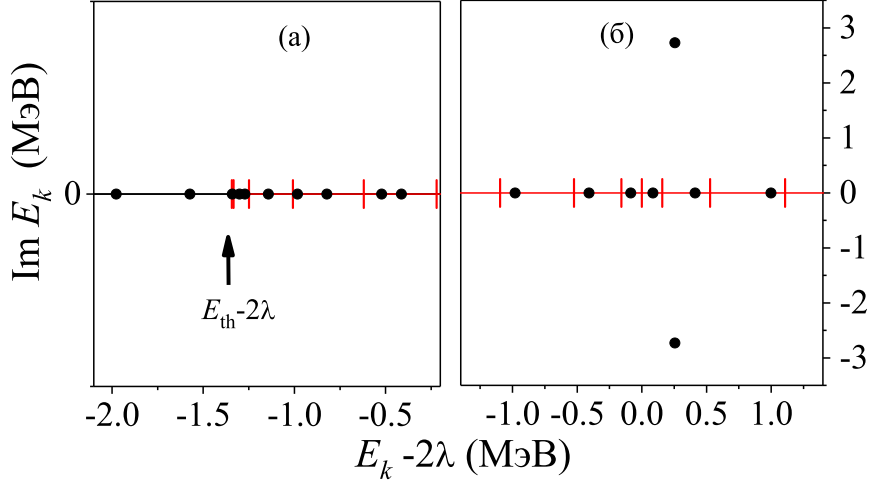


Рисунок 7.8. Дискретизованный спектр эффективного гамильтониана H (кружки) для связанных каналов 3SD_1 при $k_F = 0.18 \text{ Фм}^{-1}$ с двумя вещественными собственными значениями, расположенными ниже порога $E_{\text{th}} = 0$ (а) и для 1S_0 канала при $k_F = 0.9 \text{ Фм}^{-1}$ с двумя комплексными собственными значениями, реальные части которых близки к 2λ (б). Короткие вертикальные линии показывают границы интервалов дискретизации $2e(k_i)$ спектра свободного гамильтониана H_0 , где k_i задаются уравнением (7.47).

правыми формулой:

$$\langle \bar{z}_k | = (|z_k\rangle)^T J. \quad (7.49)$$

Здесь нет комплексного сопряжения для bra-векторов. Чтобы подчеркнуть это, ниже используется обозначение $(|z_k\rangle)^T \equiv \langle z_k^* |$ там, где это необходимо.

Согласно уравнению (7.49), собственные вектора нормируются следующим образом:

$$\langle \bar{z}_k | z_{k'} \rangle = \langle z_k^* | J | z_{k'} \rangle = N_k \delta_{kk'}, \quad (7.50)$$

где нормы N_k могут быть положительными, отрицательными или же комплексными для собственных состояний с комплексными собственными значениями.

Таким образом, спектральное разложение для полного гамильтониана записывается в следующем виде:

$$H = \sum_k E_k \frac{|z_k\rangle \langle \bar{z}_k|}{N_k}. \quad (7.51)$$

Важное свойство дискретизованного спектра состоит в том, что нормы N_k вещественны и отрицательны для hh-части спектра, и положительны для rr-части. Поэтому можно выбрать их равными -1 и 1 соответственно (см. Рис. 7.9). Это позволяет отделить

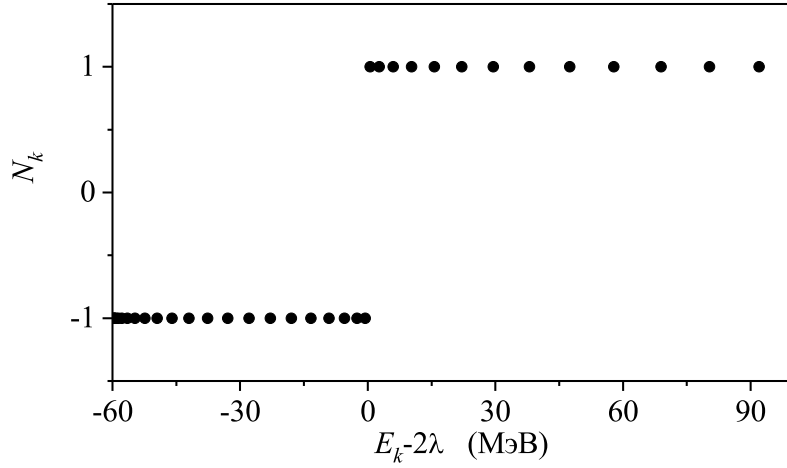


Рисунок 7.9. Нормы N_k для дискретизованного континуума гамильтониана H как функции собственных значений E_k .

одни состояния от других (т.е. поделить спектр на hh- и pp-части). Это свойство позволит далее отделить части полной T -матрицы, дающие вклады в одночастичные и однодырочные энергии.

Также удобно перенумеровать собственные состояния гамильтониана H аналогично нумерации собственных функций свободного гамильтониана (7.47). Состояния с отрицательными и положительными нормами нумеруются отрицательными и положительными индексами соответственно. Возможные связанные состояния обозначаются как $|z_{-1}\rangle$ и $|z_1\rangle$. В случае вещественных энергий $|z_1\rangle$ соответствует состоянию с положительной нормой, в то время как $|z_{-1}\rangle$ — состоянию с отрицательной нормой. При этом в случае комплексно сопряженных собственных значений $E_1 = E_0 - i\Gamma_0$ и $E_{-1} = E_1^*$, где Γ_0 положительно.

В результате спектральная сумма (7.51) для H записывается в следующем виде:

$$H = \sum_{k=2}^{M^+} E_k |z_k\rangle \langle \bar{z}_k| - \sum_{k=-M^-}^{-2} E_k |z_k\rangle \langle \bar{z}_k| + H_b, \quad (7.52)$$

где H_b — вклад от связанных состояний, который исчезает при их отсутствии. Для вещественных собственных значений этот вклад задается разностью:

$$H_b = E_1 |z_1\rangle \langle \bar{z}_1| - E_{-1} |z_{-1}\rangle \langle \bar{z}_{-1}|, \quad (7.53)$$

в то время как в случае комплексных собственных значений:

$$H_b = E_1 |z_1\rangle \langle \bar{z}_1| + E_{-1} |z_{-1}\rangle \langle \bar{z}_{-1}| = 2\text{Re} [E_1 |z_1\rangle \langle \bar{z}_1|]. \quad (7.54)$$

В любом случае вклад H_b оказывается вещественным.

7.6. Связанные состояния эффективного гамильтониана

Сверхтекучая фаза возникает в тех парциальных NN каналах, где есть притяжение [191]. Ниже в основном рассматриваются три такие NN конфигурации: синглетный канал 1S_0 и связанные каналы 3PF_2 в нейтронной материи, а также связанные каналы 3SD_1 в симметричной ядерной материи.

Спектр эффективного гамильтониана имеет непосредственное отношение к вычислению сверхтекучих корреляций. Действительно, мнимые части комплексных собственных значений равны величине сверхтекучей щели $\Delta(k_F)$ при импульсе Ферми [87, 193, 194, 197]:

$$\Delta(k_F) \approx \Gamma_0. \quad (7.55)$$

Таким образом, из диагонализации матрицы гамильтониана сразу получаются величины щелей. Это очень удобно, особенно для связанных каналов 3SD_1 и 3PF_2 , где решение традиционного уравнения БКШ для щели представляет сложную задачу.

7.6.1. Фазовый переход для связанных каналов 3SD_1

Интересно проследить изменение собственных значений энергии при увеличении плотности среды.

Для связанных парциальных каналов 3SD_1 есть связанное состояние в вакууме (при нулевой плотности среды) — это дейтрон. При увеличении импульса Ферми k_F такое связанное состояние в среде остается, более того, при определенной плотности из-под hh -порога E_{th} возникает второе вещественное связанное состояние, которое можно трактовать как дейтронную дырку. Далее существует критическое значение импульса Ферми k_F^C , ниже которого у эффективного гамильтониана H есть два связанных состояния с вещественными собственными значениями, а при более высокой плотности происходит фазовый переход, при котором открывается сверхтекучая фаза и собственные значения становятся комплексными. Такое поведение собственных значений показано на Рис. 7.10.

Этот фазовый переход, по-видимому, является частным случаем при нулевой температуре известного кроссовера между Бозе конденсатом дейтронов и сверхтекучей

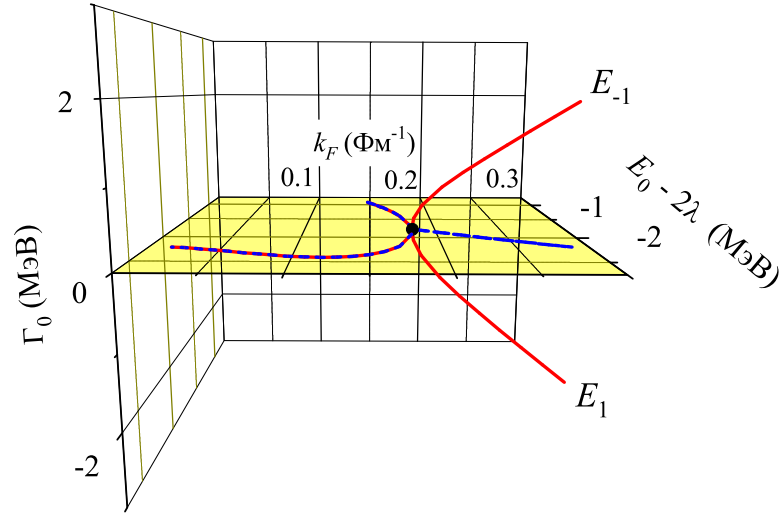


Рисунок 7.10. Движение собственных значений E_{-1} и E_1 гамильтониана H для связанных NN каналов 3SD_1 при $K = 0$ при увеличении импульса Ферми k_F (сплошная кривая). Ниже критической точки (кружок) есть два состояния с вещественными собственными значениями ($\Gamma_0 = 0$), которые выше этой точки становятся комплексными. Штриховой кривой показана проекция этих траекторий на плоскость $\Gamma_0 = 0$.

фазой (BEC to BCS crossover), который обычно изучают при ненулевой температуре [198–200]. В полученном результате весьма интересным является наличие второго вещественного собственного значения в области слева от критической точки.

Надо отметить, что подобная картина с критической точкой k_F^C была приведена впервые в работе [190], правда, без подробного дальнейшего исследования. Здесь можно упомянуть также результаты работы [211], где были получены две ветви одночастичных энергий в ядерной среде в некотором диапазоне плотностей в рамках схемы БХФ.

7.6.2. Характеристическое уравнение

Попробуем объяснить поведение собственных значений энергии, приведенное выше. Левая часть уравнения на собственные значения (7.48) представляет собой полином от энергии E , $P_M(E)$, где M — размерность используемого базиса. При изменении параметров базиса этот полином и его корни, т.е. собственные значения эффективного гамильтониана, меняются, поскольку эти корни представляют дискретизованный континуум. Однако, если у гамильтониана есть связанные состояния, его матрица и соответствующий полином должны иметь “устойчивые”

собственные значения, которые являются аппроксимациями для точных собственных энергий. Таким образом, для случая, когда есть два связанных состояния вблизи критической точки, можно сделать следующие предположения: (i) можно выделить квадратичную часть $P_2(E)$ из полного полинома $P_M(E)$; (ii) $P_2(E)$ имеет гладкую непрерывную зависимость от плотности, т.е. от импульса Ферми k_F .

Для того, чтобы проверить эти предположения, рассмотрим эволюцию такого полинома при увеличении k_F . В общем случае $P_2(E)$ можно параметризовать следующим образом:

$$P_2(E, k_F) = (E - 2\lambda)^2 - 2b(k_F)(E - 2\lambda) + q^2(k_F), \quad (7.56)$$

где $b(k_F)$ и $q(k_F)$ — вещественные параметры, зависящие от k_F . Тогда корни полинома $P_2(E, k_F)$ имеют следующий вид:

$$E_{\pm 1} - 2\lambda = b(k_F) \mp \sqrt{b^2(k_F) - q^2(k_F)}. \quad (7.57)$$

С другой стороны, параметры b и q можно определить из собственных значений:

$$b(k_F) = \frac{1}{2} (E_{-1} + E_1) - 2\lambda, \quad q^2(k_F) = (E_{-1} - 2\lambda) (E_1 - 2\lambda). \quad (7.58)$$

Зависимости параметров $b(k_F)$ и $|q(k_F)|$, вычисленные из собственных значений E_{-1} и E_1 для связанных каналов 3SD_1 , показаны на Рис. 7.11. Из рисунка видно, что предложенная параметризация и предположения (i) и (ii) оказались верны для этой NN конфигурации, поскольку b и q действительно имеют гладкие зависимости от k_F . Эти функции не имеют никаких особенностей в критической точке. Из уравнения (7.57) следует, что критическое значение k_F^C соответствует случаю $b^2 = q^2$. Более того, если $b^2 > q^2$, у эффективного гамильтониана будет два вещественных собственных значения, в то время как в противном случае, при $b^2 < q^2$, они становятся комплексными. Это то самое поведение, которое видно на Рис. 7.10 при открытии сверхтекучей фазы. Также Рис. 7.11 показывает, что обе функции b и q имеют линейную зависимость от k_F вблизи критической точки, что приводит к корневой зависимости мнимой части Γ_0 от k_F вблизи k_F^C , которую также можно увидеть на Рис. 7.10.

В то же время, закрытие щели при высоких k_F отвечает случаю, когда обе функции $b(k_F)$ и $q(k_F)$ стремятся к нулю. Однако, по всей видимости, эти функции не пересекаются, и фазового перехода при закрытии щели нет.

Рассмотрим далее, как выглядит характеристическое уравнение для других NN конфигураций.

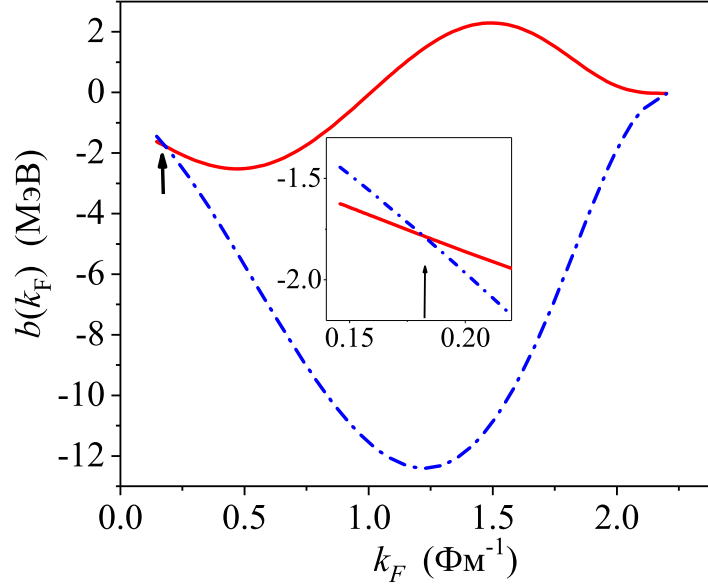


Рисунок 7.11. Зависимости параметров $b(k_F)$ (сплошная кривая) и $-|q(k_F)|$ (штрих-пунктирная кривая) от импульса Ферми для связанных каналов 3SD_1 . Небольшая внутренняя панель показывает область вблизи критической точки k_F^C , которая обозначена стрелкой.

7.6.3. Канал 1S_0

Для этого канала в вакууме нет связанного состояния, хотя есть и динейтронное связанное состояние в ядерной среде [179, 204] (см. раздел 7.3.1 этой главы). Поэтому здесь нет условий для возникновения критической точки, и сверхтекучая фаза возникает при любом значении k_F , отличном от нуля. Соответствующие функции b и q показаны на Рис. 7.12. Видно, что параметризация (7.57) применима и для этого канала, однако, в отличие от предыдущего случая здесь функции $b^2(k_F)$ и $q^2(k_F)$ не пересекаются, они обе стремятся к нулю как при нулевой плотности, так и при $k_F > 1.5 \Phi_M^{-1}$.

Для исследования поведения щели при низкой плотности можно воспользоваться известным асимптотическим выражением [212, 213]:

$$\Delta(k_F) \xrightarrow[k_F \rightarrow 0]{} 8\lambda \exp\left(\frac{\pi}{2k_F a_{nn}} - 2\right), \quad (7.59)$$

где λ — это энергия Ферми и a_{nn} — длина рассеяния в канале 1S_0 . На Рис. 7.13 показана зависимость максимальной щели $\Delta(k_F)$ для динейтронного канала 1S_0 , найденной из мнимой части собственного значения E_{-1} , от импульса Ферми k_F . Небольшая

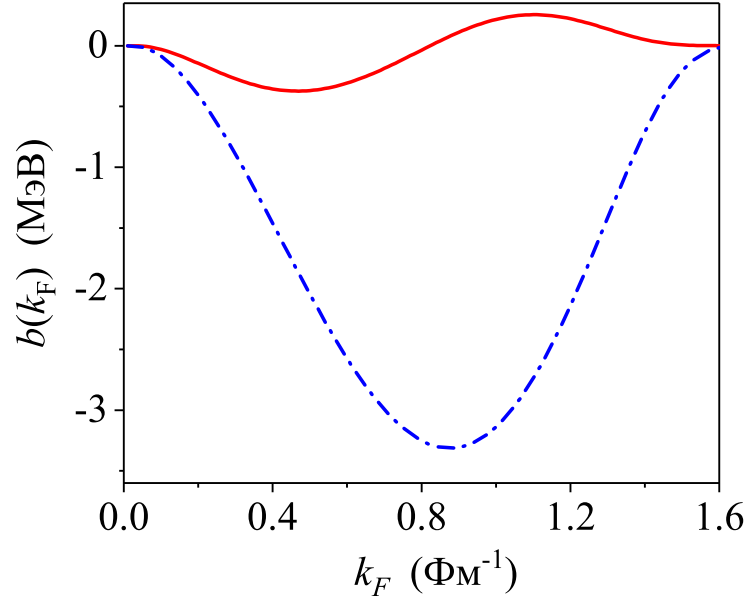


Рисунок 7.12. Зависимости параметров $b(k_F)$ (сплошная кривая) и $-|q(k_F)|$ (штрих-пунктирная кривая) от импульса Ферми для nn канала 1S_0 .

вставка отражает поведение щели при очень низких плотностях, которое практически совпадает с асимптотическим поведением (7.59). Из рисунка видно, что предложенная

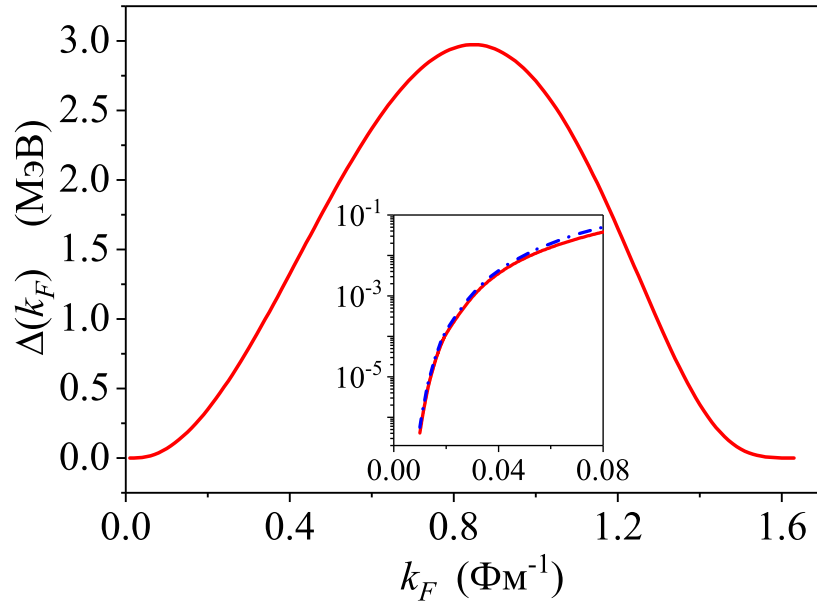


Рисунок 7.13. Сверхтекучая щель для динейтронного канала 1S_0 , найденная на основе диагонализационного подхода (сплошная кривая). Вставка отражает поведение при низкой плотности в сравнении с асимптотической формулой (7.59) (штрих-пунктирная кривая).

диагонализационная техника приводит к тем же значениям щели при низкой плотности, что и стандартный подход БКШ.

7.6.4. Собственные значения для связанных каналов 3PF_2

Сверхтекучая щель, возникающая в связанных каналах 3PF_2 , играет важную роль в нейтронной материи при высоких плотностях среды, там, где щель в канале 1S_0 уже исчезает.

Также, как и в случае с синглетным каналом, параметризация (7.11) и здесь работает, однако функции $b^2(k_F)$ и $q^2(k_F)$ не пересекаются, так что критической точки в этом канале нет.

На Рис. 7.14 приводится зависимость максимальной щели (т.е. мнимых частей собственных значений E_{-1}) от k_F . Здесь сама сверхтекучая щель невелика при равновесной плотности и имеет максимум при достаточно больших значениях импульса Ферми $k_F \approx 2.5 \Phi_M^{-1}$.

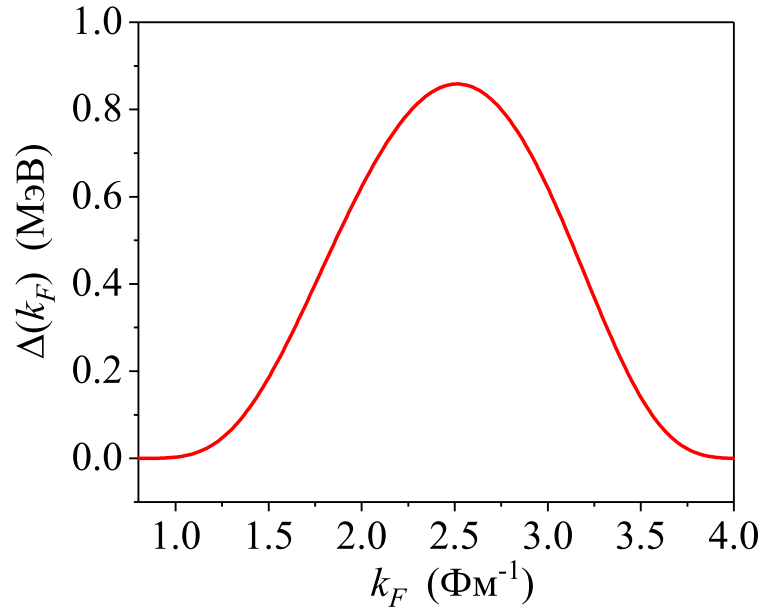


Рисунок 7.14. Сверхтекучая щель, найденная из мнимой части собственного значения E_{-1} , для динейтронных связанных каналов 3PF_2 при $K = 0$.

Таким образом, предположения, высказанные выше, о параметризации квадратичной части (7.57) полного характеристического полинома оказались верны для основных каналов со спариванием. Для связанных каналов 3SD_1 эта параметризация

важна вблизи критической точки.

7.6.5. Положение реальных частей собственных значений

Еще одно интересное свойство комплексных собственных значений состоит в том, что их реальные части E_0 не равны в точности 2λ , они смещены в hh- или pp-части непрерывного спектра H . На Рис. 7.15 приводятся диаграммы Аргана для реальной и мнимой частей $E_0 - 2\lambda$ и Γ_0 комплексных собственных значений E_{-1} для всех трех конфигураций. Здесь в качестве параметра кривой выступает значение импульса k_F . Из рисунка видны небольшие отклонения E_0 от 2λ даже для канала 3P_F2 . Для

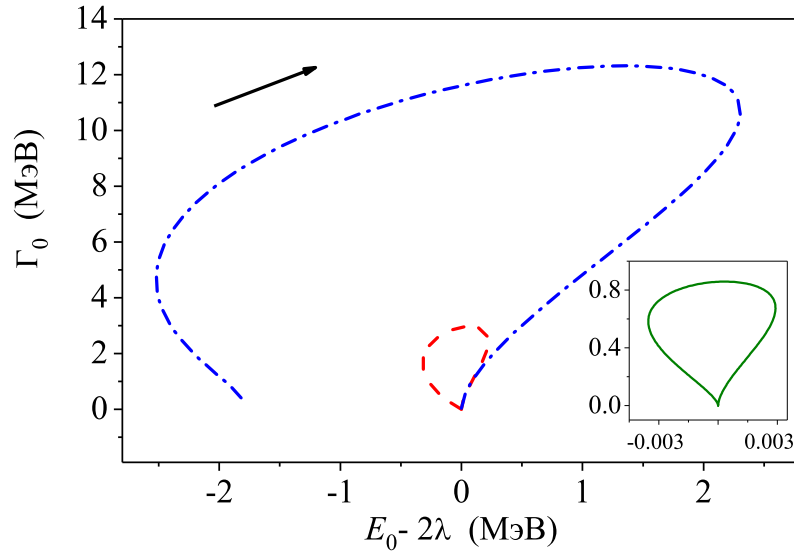


Рисунок 7.15. Диаграммы Аргана для собственных значений в каналах 1S_0 (штриховая кривая), 3SD_1 (штрих-пунктирная кривая) и 3PF_2 (слошная кривая). Стрелка показывает направление движения при увеличении k_F (по часовой стрелке для всех трех каналов).

конфигураций 3SD_1 и 1S_0 эти отличия более заметны. Величины этих отклонений связаны с силой притяжения в рассматриваемых NN каналах.

Для того, чтобы представить общую картину, следует отметить, что спаривание возможно и в других NN каналах, где есть притяжение, а именно в каналах 3P_0 , 1D_2 , 3D_2 и 3DG_3 . Соответствующие щели, найденные по мнимым частям собственных значений эффективного гамильтониана, показаны на Рис. 7.16 а и б в логарифмическом масштабе для каналов с изоспином 1 и 0 соответственно. Ясно, что щели малы для всех каналов, кроме трех основных, рассмотренных подробно выше. Исключение составляет

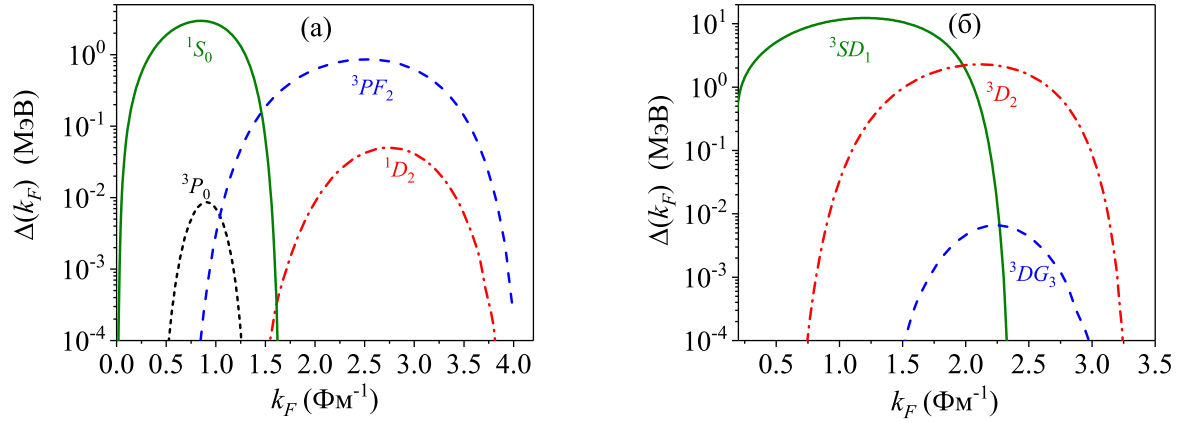


Рисунок 7.16. Щели для nn (а) и pr (б) парциальных каналов, найденные из мнимых частей соответствующих собственных значений эффективного гамильтониана для потенциала CD Bonn.

канал 3D_2 , который будет давать основной вклад в эффект спаривания в симметричной ядерной материи при высокой плотности [214].

7.7. Функции связанных состояний и импульсные зависимости щелей

Можно показать [87, 90], что волновые функции связанных состояний $z_{\pm 1}(k)$ также содержат информацию об импульсной зависимости щели $\Delta(k)$. В частности, импульсная зависимость $|z_1\rangle$ имеет следующий вид [87]:

$$|z_1(k)| = A \frac{|\Delta(k)|}{\sqrt{(2e(k) - E_0)^2 + \Gamma_0^2}}, \quad (7.60)$$

где $z_1(k) = \langle k|z_1\rangle/k$ и A — размерная константа. Таким образом, собственная функция эффективного гамильтониана $|z_1\rangle$ и соответствующее собственное значение E_1 содержат всю необходимую информацию о спаривании¹⁹ в рассматриваемом NN канале. Сравнение импульсных зависимостей щелей для каналов 3PF_2 и 3SD_1 с результатами решения уравнения БКШ для щели²⁰ показаны на Рис. 7.17 для двух значений импульса Ферми.

¹⁹ Их парные величины $|z_{-1}\rangle$ и E_{-1} отличаются только комплексным сопряжением.

²⁰ Приводимые здесь и ниже решения уравнения БКШ для сверхтекучих щелей получены Г. Мютером [87].

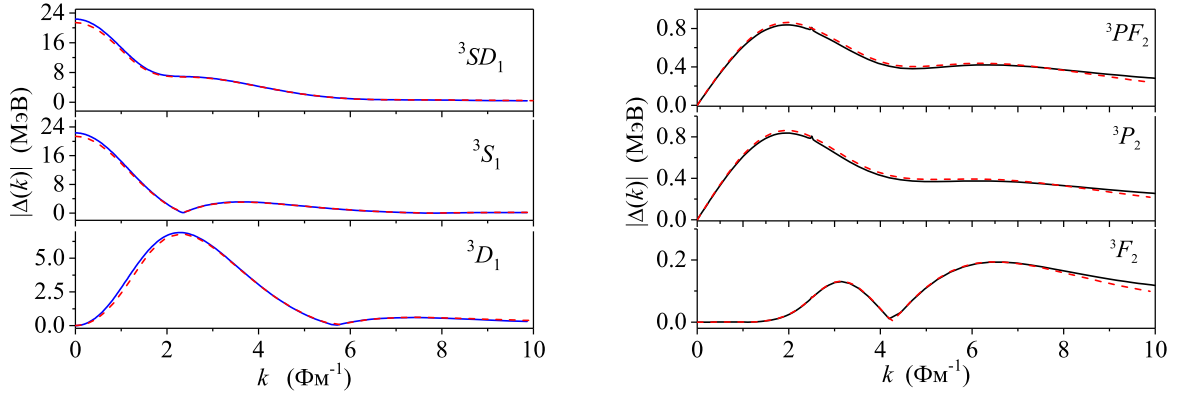


Рисунок 7.17. Абсолютная величина щели $|\Delta(k)|$ и парциальные щели для связанных каналов 3SD_1 при $k_F = 1.2 \text{ Фм}^{-1}$ (слева) и для каналов 3PF_2 при $k_F = 2.5 \text{ Фм}^{-1}$ (справа), найденные из волновых функций связанных состояний (штриховая кривая) и из решения уравнения для щели (сплошная кривая)

Следует отметить, что соотношение (7.60) можно переписать в более удобном виде. Действительно, оператор взаимодействия можно представить в виде разности $V = J(H - H_0)$. Тогда будет верно равенство:

$$\langle k|V|z_1\rangle = -J(k)(2e(k) - E_0 + i\Gamma_0)\langle k|z_1\rangle, \quad (7.61)$$

поскольку бра- и кет- вектора слева являются собственными функциями для свободного и полного гамильтонианов H_0 и H . Сравнивая уравнения (7.60) и (7.61), можно заключить, что матричный элемент в левой части (7.61) пропорционален функции щели $\Delta(k)$ с некоторым комплексным множителем. Таким образом, можно записать следующее соотношение:

$$\langle k|V|z_1\rangle/k = Be^{i\phi_k}\Delta(k), \quad (7.62)$$

где B — некоторая вещественная константа (для данного k_F)²¹ и ϕ_k — аргумент фазового множителя, который может зависеть от импульса k .

Соотношение (7.62) позволяет также определить знак $\Delta(k)$. На Рис. 7.18 приводится импульсная зависимость щели для канала 1S_0 , найденная по предложенному здесь методу, при различных значениях k_F .

Зависимость аргумента фазового множителя ϕ_k от импульса показана на Рис. 7.19. Получается, что ϕ_k почти постоянен, кроме точек, в которых матричный элемент

²¹ Размерность B — $\text{Фм}^{3/2}$. Значение B можно вычислить, используя соотношения (7.55) и (7.62) при $k = k_F$.

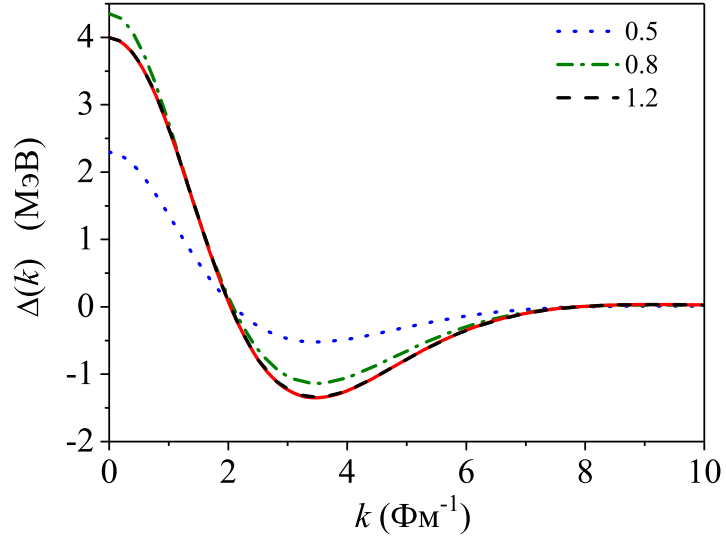


Рисунок 7.18. Импульсная зависимость щели для np канала 1S_0 при различных значениях k_F , приведенных на рисунке в Φ_M^{-1} . Сплошная кривая отвечает решению уравнения для щели при $k_F = 1.2 \Phi_M^{-1}$.

$\langle k|V|z_1\rangle$ обращается в ноль, и, соответственно, этот аргумент не определен. Следует

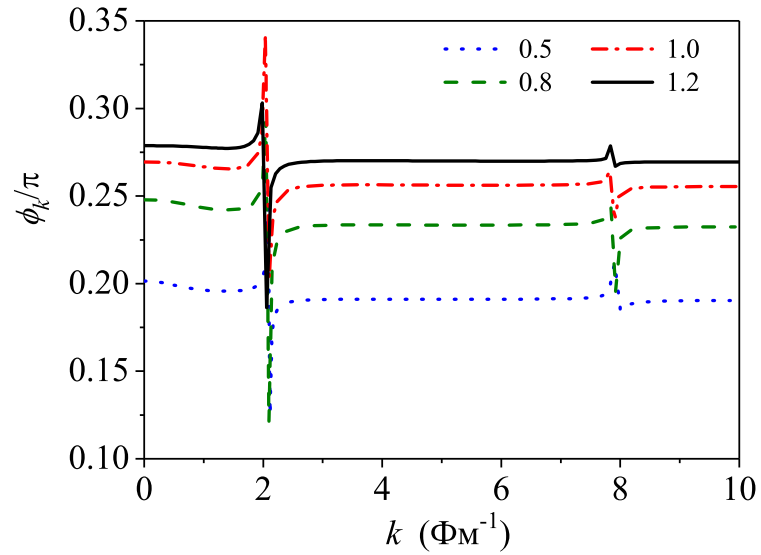


Рисунок 7.19. Импульсная зависимость аргумента ϕ_k для канала 1S_0 . Значения k_F приведены на рисунке в Φ_M^{-1} .

отметить, что $\Delta(k)$ при разных плотностях имеет близкую форму, которая связана с импульсной зависимостью потенциала [212].

Соотношения, аналогичные уравнению (7.62), для связанных каналов 3SD_1 и 3PF_2

имеют следующий вид:

$$\langle k, l | V | z_1 \rangle / k = B e^{i\phi_k^l} \Delta_l(k), \quad l = j - 1, j + 1, \quad (7.63)$$

где j — полный угловой момент и $\Delta_l(k)$ — парциальные щели. Нормировочный множитель B должен быть общим для обоих связанных каналов, в то время как аргументы фазовых множителей ϕ_k^l могут отличаться для разных l .

Таким образом, импульсные зависимости щелей, которые получаются из собственных функций матрицы эффективного гамильтониана, практически совпадают с решениями уравнения БКШ для щели. Более детально сравнение решений можно найти в работе [87].

7.8. T -матрица в ядерной среде

7.8.1. Спектральное разложение для пропагатора

Выше были рассмотрены связанные состояния эффективного гамильтониана. Обратимся теперь к дискретизованному континууму H , состояния которого имеют отношение к задаче рассеяния в ядерной среде.

Следует отметить, что задача рассеяния для гамильтониана H может быть рассмотрена как двухканальная задача с hh - и pp - каналами, которые связаны взаимодействием JV . Отличительным свойством такой задачи является то, что непрерывные спектры в этих каналах имеют только одну общую точку 2λ , которая является существенно особой точкой. Для всех других энергий выше порога hh -спектра E_{th} только один канал открыт (hh или pp), поэтому есть только одна волновая функция в непрерывном спектре H . Для такой задачи можно определить также матрицу рассеяния S (см. например [182, 185]), которая будет унитарна в областях $(E_{th}, 2\lambda)$ и $(2\lambda, \infty)$. Фактически эта матрица определяет рассеяние дырок на дырках и частиц на частицах.

Имея в виду эту картину, можно найти дискретизованное представление для полной обобщенной резольвенты $G^{\Pi}(E)$, определенной в (7.41), в явном виде. Поскольку этот оператор содержит дополнительный множитель J , его спектральное разложение по векторам $|z_k\rangle$ будет симметричным [90]. Удобно представить G^{Π} как сумму вкладов от континуума и связанных состояний:

$$G^{\Pi}(E) = G_c^{\Pi}(E) + G_b^{\Pi}(E), \quad (7.64)$$

где первая часть, в свою очередь, состоит из pp и hh частей (аналогично оператору G_0^{Π}):

$$G_c^{\Pi} \approx \sum_{k=2}^{M^+} |z_k\rangle g_k^+(E) \langle z_k| - \sum_{k=-M^-}^{-2} |z_k\rangle g_k^-(E) \langle z_k|. \quad (7.65)$$

Для того, чтобы найти коэффициенты $g_k^{\pm}(E)$, можно воспользоваться исходным непрерывным спектральным разложением для G_c^{Π} , которое имеет следующий вид (см. например [185, 196]):

$$G_c^{\Pi}(E) = \int_{2\lambda}^{\infty} dE' \frac{|\psi_+(E')\rangle \langle \psi_+(E')|}{E + i0 - E'} - \int_{-\infty}^{2\lambda} dE' \frac{|\psi_-(E')\rangle \langle \psi_-(E')|}{E - i0 - E'}, \quad (7.66)$$

где $|\psi_{\pm}(E')\rangle$ — состояния континуума в ядерной среде, которые соответствуют состояниям из pp (+) и hh (-) частей невозмущенного спектра. Эти волновые функции аппроксимируются в дискретизованном представлении состояниями $|z_k\rangle$ с положительными и отрицательными номерами соответственно. Таким образом, значения $g_k(E)$ из уравнения (7.65) могут быть определены как интегралы по интервалам дискретизации аналогично обычной задаче рассеяния:

$$g_k^{\pm}(E) = \frac{1}{D_k} \int_{\tilde{\mathfrak{D}}_k} dE' \frac{1}{E \pm i0 - E'}. \quad (7.67)$$

Сами граничные точки интервалов для возмущенного спектра $\tilde{\mathfrak{D}}_k$ и их ширины D_k могут быть найдены из общей процедуры дискретизации, которую следует провести отдельно для hh ($E_k \in (E_{\text{th}}, 2\lambda)$) и pp ($E_k \in (2\lambda, \infty)$) частей непрерывного спектра H .

Вклад от связанных состояний в разложение (7.64) в случае вещественных собственных значений имеет форму, аналогичную (7.65):

$$G_b^{\Pi}(E) = \frac{|z_1\rangle \langle z_1|}{(E - E_1)} - \frac{|z_{-1}\rangle \langle z_{-1}|}{(E - E_{-1})}. \quad (7.68)$$

Эта часть обращается в ноль вблизи критической точки k_F^C , поскольку волновые функции двух вещественных связанных состояний, как и их энергии, практически совпадают в этой точке [87]).

В случае комплексных собственных значений, однако, уравнение (7.68) переходит в сумму двух комплексно сопряженных вкладов, поэтому G_b^{Π} остается вещественным при любом E :

$$G_b^{\Pi}(E) = 2\text{Re} \left[\frac{|z_1\rangle \langle z_1^*|}{(E - E_1)} \right]. \quad (7.69)$$

При этом мнимые части отдельных вкладов от каждого связанного состояния в G_b^{Π} отличаются от нуля и влияют на части T -матрицы, определяющие одночастичные и однодырочные собственные энергии.

7.8.2. T -матрица на массовой поверхности

T -матрица может быть найдена теперь из явного выражения (7.25) (или (7.43) для $K \neq 0$). При этом часть ΔT снова представляется в виде суммы вкладов от связанных состояний и непрерывного спектра:

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_b, \quad (7.70)$$

где

$$\Delta T_c = \sum_{k=2}^{M^+} V|z_k\rangle g_k(E) \langle z_k|V - \sum_{k=-M^-}^{-2} V|z_k\rangle g_k(E) \langle z_k|V, \quad (7.71)$$

в то время как вклад от связанных состояний таков:

$$\Delta T_b = V G_b^{\Pi} V, \quad (7.72)$$

где G_b^{Π} определяется формулой (7.68) в случае связанных состояний с вещественными собственными значениями, или формулой (7.69) в случае комплексных собственных значений.

Поведение амплитуд рассеяния и парциальных фазовых сдвигов для случая pphh пропагатора было изучено достаточно детально ранее [182, 183, 185, 189]. Поэтому здесь они будут рассмотрены кратко. Основное внимание будет уделено поведению упругих амплитуд в каналах 3SD_1 вблизи критической плотности. Здесь используется определение фазового сдвига как аргумента T -матрицы на массовой поверхности согласно в работе [185], также для наглядности на рисунках представлены зависимости фаз от относительного импульса на массовой поверхности, которые легко можно перевести в привычную зависимость от энергии.

На Рис. 7.20 показаны парциальные фазовые сдвиги для канала 1S_0 при нескольких плотностях среды. Для того, чтобы оценить качество расчетов на основе диагонализационной техники, на этом рисунке выбраны те же значения импульса Ферми, что и на Рис. 5 из работы [185], где вычисления проводились для потенциала Рейда. Хотя используемые потенциалы разные, полученные в настоящей работе результаты согласуются с результатами работы [185]. Фазовые сдвиги имеют резкий

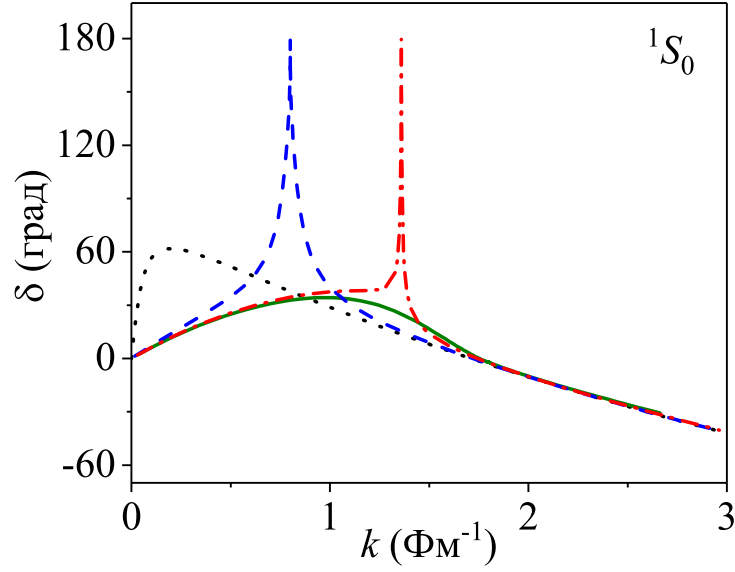


Рисунок 7.20. Парциальные фазовые сдвиги для канала 1S_0 в свободном пространстве (точечная кривая) и в среде при различных значениях импульса Ферми: $0.8 \Phi_M^{-1}$ (штриховая кривая), $1.36 \Phi_M^{-1}$ (штрих-пунктирная кривая) и $1.8 \Phi_M^{-1}$ (сплошная кривая).

всплеск и стремятся к π , когда относительный импульс близок к импульсу Ферми. В то же время такой пик исчезает при достаточно большом значении $k_F = 1.8 \Phi_M^{-1}$, там, где сверхтекучей щели практически нет.

Парциальные фазовые сдвиги для P -волновых каналов в нейтронной материи показаны на Рис. 7.21. Для каналов, в которых есть спаривание при рассматриваемой плотности (см. Рис. 7.16а), т.е. 3P_0 и 3P_2 , фаза стремится к π при $k = k_F$ ²². При этом для канала 3P_1 , в котором нет притяжения, фаза обращается в ноль при $k = k_F$.

Такое поведение можно проанализировать согласно теореме Левинсона. В свободном пространстве разность между фазовым сдвигом при нулевой энергии и на бесконечности равна $n\pi$, где n — число связанных состояний в системе. Для рассеяния в среде аналог теоремы Левинсона был получен Бишопом с соавторами [182]. Здесь ситуация более сложная. Если притяжение достаточно, чтобы возникло связанное состояние, то фаза при нулевой энергии равна π , как и в свободном пространстве. Однако в среде возможно связанное состояние hh-типа, если потенциал, наоборот,

²² Строго говоря, относительный импульс $k = k_F$ отвечает энергии в существенно особой точке $E = 2\lambda$, где фаза не определена. Однако, из результатов видно, что фаза имеет одинаковый предел справа и слева от этой точки, это предельное значение и имеется здесь в виду.

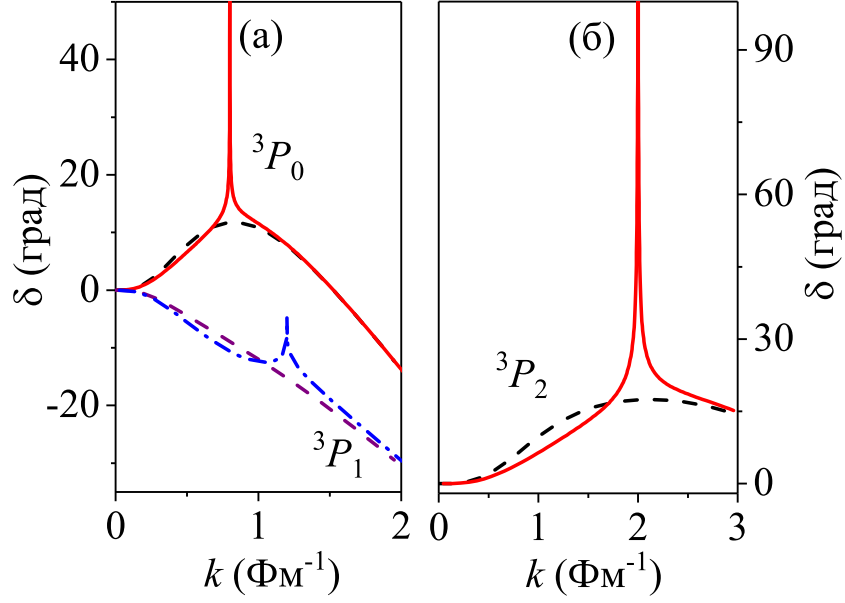


Рисунок 7.21. Парциальные фазовые сдвиги (сплошные кривые) для P -волновых nn каналов при различных значениях k_F : 0.8 ФМ^{-1} для канала 3P_0 , 1.2 ФМ^{-1} для канала 3P_1 и 2.0 ФМ^{-1} для канала 3P_2 . Соответствующие фазовые сдвиги в свободном пространстве показаны штриховыми кривыми.

слишком отталкивающий. Такой сценарий реализуется, например, для жидкого ${}^3\text{He}$ [182] (см. также пример с модельным потенциалом в работе [185]). Поэтому в общем случае фазовый сдвиг при нулевой энергии, по-видимому, должен быть равен $(n - m)\pi$, где n — число связанных pp состояний, а m — число связанных hh состояний.

Поведение фазовых сдвигов вблизи $k = k_F$, показанное на Рисс. 7.20 и 7.21, позволяет определить более детально связь между значением фазовых сдвигов на порогах и числом связанных состояний в среде. Как уже упоминалось выше, фазовые сдвиги в случае пропагатора $pphh$ отвечают двухканальной задаче с hh и pp каналами. Поэтому поведение фазового сдвига в каждой области (для $k < k_F$ и $k > k_F$) должно зависеть от числа связанных состояний в ней. В случае спаривания и комплексных собственных значений предполагается, что E_1 принадлежит pp -части спектра, в E_{-1} — hh -части (это связано с аналитической структурой двух частей T -матрицы, о которых будет сказано в следующем разделе). При такой трактовке фазовый сдвиг должен меняться на π в каждой области. Действительно, для NN конфигураций, в которых есть спаривание, фазовый сдвиг для pp -части спектра изменяется на π , начиная от порога $k = k_F$ (или $E = 2\lambda$) к бесконечности, а фазовый сдвиг в hh области изменяется

на $-\pi$ между порогами $k = 0$ и $k = k_F$. В то же время для каналов без спаривания, таких как канал 3P_1 , нет связанных состояний в среде и фазовые сдвиги обращаются в ноль на пороге $k = k_F$.

Наиболее интересное поведение можно увидеть в NN каналах 3SD_1 при низкой плотности, когда импульс Ферми меняется от нулевого до критического и выше. Это поведение показано на Рис. 7.22. Все фазовые сдвиги на этом рисунке равны π , когда

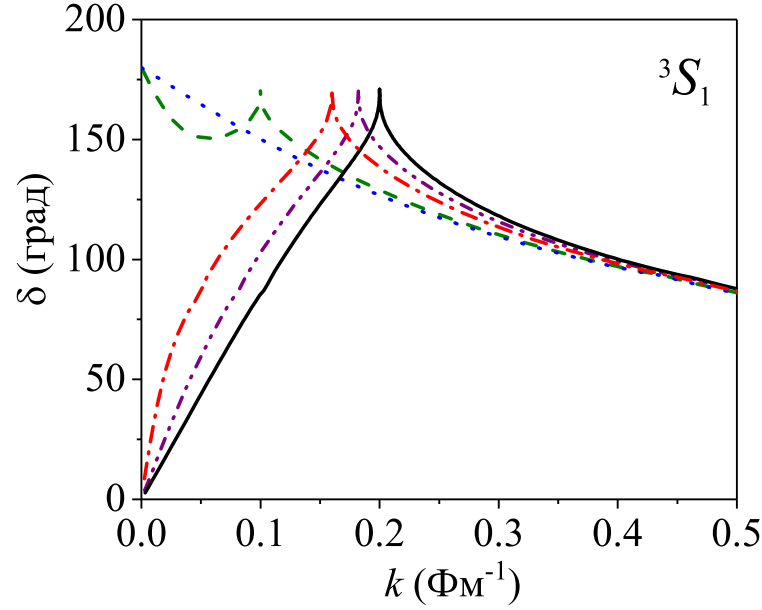


Рисунок 7.22. Парциальный фазовый сдвиг для канала 3S_1 в свободном пространстве (точечная кривая) и в ядерной среде при различных значениях k_F : $0.14 \text{ } \Phi\text{м}^{-1}$ (штриховая кривая), $0.16 \text{ } \Phi\text{м}^{-1}$ (штрих-пунктирная кривая), $0.18 \text{ } \Phi\text{м}^{-1}$ (штрих-пунктир-пунктирная кривая) и $0.2 \text{ } \Phi\text{м}^{-1}$ (сплошная кривая).

относительный импульс k равен k_F . Фазовый сдвиг в свободном пространстве ($k_F = 0$) начинается от π , согласно теореме Левинсона (т.к. есть связанное состояние). По мере увеличения плотности, когда значение импульса Ферми не превышает $k_F \sim 0.15 \text{ } \Phi\text{м}^{-1}$, в среде остается одно связанное состояние рр-типа (дейтрон в среде), поэтому фазовый сдвиг в рр-части меняется от π до нуля (на бесконечности), а для hh-части разность фазовых сдвигов равна нулю (фаза равна π при $k = 0$ и $k = k_F$). Далее, для импульса Ферми в интервале $k_F = 0.15 - 0.182 \text{ } \Phi\text{м}^{-1}$ есть два связанных состояния эффективного гамильтониана с вещественными собственными значениями (дейтрон и дейтронная дырка). Поэтому фазовый сдвиг в hh-части начинается от нуля и меняется на $-\pi$, аналогично тому, что было для канала 1S_0 . Последняя кривая при

$k_F = 0.2 \text{ Фм}^{-1}$ соответствует сверхтекучести, когда есть два связанных состояния с комплексными энергиями. Видно, что качественно фазы ведут себя так же, как и в случае вещественных связанных состояний. Таким образом, хотя в зависимости собственных значений эффективного гамильтониана наблюдается фазовый переход в критической точке, для амплитуд рассеяния нет никакого скачка при переходе через критическую точку.

Следует отметить, что картина, похожая на приведенную на Рис. 7.22, наблюдается в случае наличия связанного состояния hh-типа при низкой плотности, который рассматривался в работе [185] для модельного потенциала с сильно увеличенным отталкиванием. Только там все фазовые сдвиги сдвинуты на $-\pi$ вниз.

Как видно, режим сверхтекучести отвечает некоторой дуальности по отношению к теореме Левинсона. С одной стороны, фазовый сдвиг обращается в ноль при нулевой энергии, что формально свидетельствует об отсутствии связанных состояний в системе. С другой стороны, такое поведение может быть рассмотрено как следствие наличия связанных состояний pp- и hh-типа, что приводит к взаимному сокращению соответствующих вкладов равных $-\pi$ и π . Необходимо подчеркнуть, что предложенная трактовка поведения фаз вблизи точки k_F в связи с теоремой Левинсона чисто качественная и требует аккуратного доказательства.

В целом, задача рассеяния в среде с пропагатором prhh очень интересна и необычна с точки зрения общей теории рассеяния.

7.8.3. Выделение запаздывающей и опережающей частей из T -матрицы

Важной частью формализма самогласованных функций Грина [189] является выделение запаздывающей (forward-propagating) ΔT^+ и опережающей (backward-propagating) ΔT^- частей из полной T -матрицы. Эти части имеют отношение к определению собственных энергий для частиц и дырок соответственно. Эти части связаны со своими мнимыми частями через дисперсионные соотношения:

$$\Delta T^+(E) = -\frac{1}{\pi} \int_{2\lambda}^{\infty} dE' \frac{\text{Im}T^+(E')}{E + i0 - E'}, \quad (7.73)$$

и:

$$\Delta T^-(E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{2\lambda} dE' \frac{\text{Im}T^-(E')}{E - i0 - E'}. \quad (7.74)$$

Зная явно спектральное разложение для полной резольвенты и, соответственно, континуум-вклада T -матрицы, легко разделить ΔT на две части, в которые дают вклады состояния с отрицательной и положительной нормами:

$$\Delta T_c^-(E) = - \sum_{k=-M^-}^{-2} V|z_k\rangle g_k^-(E) \langle z_k|V, \quad \Delta T_c^+(E) = \sum_{k=2}^{M^+} V|z_k\rangle g_k^+(E) \langle z_k|V. \quad (7.75)$$

В случае одного или двух вещественных связанных состояний вклады в T -матрицу от них тоже делятся естественным образом:

$$\Delta T_b^\pm(E) = \pm \frac{V|z_{\pm 1}\rangle \langle z_{\pm 1}|V}{E \pm i0 - E_{\pm 1}}. \quad (7.76)$$

Введем функции, похожие на функцию щели, и для вещественных связанных состояний:

$$W_1^\pm(k) = \langle k|V|z_{\pm 1}\rangle/k, \quad (7.77)$$

Тогда диагональные матричные элементы от вкладов в T -матрицу $\Delta T(k, k; E) \equiv \langle k|\Delta T(E)|k\rangle/k^2$ будут пропорциональны таким функциям:

$$\Delta T_b^\pm(k, k; E) = \pm \frac{[W_1^\pm(k)]^2}{E - E_{\pm 1}} - i\pi[W_1^\pm(k)]^2\delta(E - E_{\pm 1}). \quad (7.78)$$

Здесь к реальным частям T добавлены мнимые, которые пропорциональны δ -функциям по энергии. В таком виде и вклады от связанных состояний в T -матрицу удовлетворяют дисперсионным соотношениям²³ (7.73) и (7.74) [179].

Также видно, что вблизи критической точки реальные части от “положительных” и “отрицательных” вкладов от связанных состояний равны друг другу с противоположным знаком.

В случае, когда есть сверхтекучая фаза и у эффективного гамильтониана H есть комплексные собственные значения, можно показать [189], что из-за мнимых частей запаздывающую и опережающую части нужно связать с полюсами T -матрицы в нижней и верхней полуплоскостях комплексной энергии, т.е.:

$$\Delta T_b^\pm(E) = \frac{V|z_{\pm 1}\rangle \langle z_{\pm 1}^*|V}{E - (E_0 \mp i\Gamma_0)}. \quad (7.79)$$

Такое деление связано с условием, что $\Delta T^+(E)$ ($\Delta T^-(E)$) являются аналитическими функциями энергии в верхней (нижней) полуплоскостях энергии. Собственно, из

²³ Такие мнимые части не дают вклада в T -матрицу на массовой поверхности, связанную с фазовым сдвигом и рассмотренную выше, поскольку вещественные собственные значения $E_{\pm 1}$ лежат ниже порога непрерывного спектра E_{th} .

аналитичности этих функций и следуют дисперсионные соотношения (7.73) и (7.74). При этом комплексные вклады (7.79) также удовлетворяют этим соотношениям.

В этом случае, согласно уравнению (7.62), диагональные элементы T -матрицы пропорциональны квадрату импульсной зависимости щели $\Delta(k)$:

$$\Delta T_b^\pm(k, k; E) \approx B^2 e^{\pm 2i\phi_k} \frac{\Delta^2(k)}{E - (E_0 \mp i\Gamma_0)}. \quad (7.80)$$

Если бы аргумент комплексной функции ϕ_k был бы равен $\pi/2$, эти вклады бы переходили в форму для вещественных собственных значений (7.78) при $\Gamma_0 \rightarrow 0$. И переход через критическую точку не изменил бы скачком эти вклады в запаздывающую и опережающую части ΔT^+ и ΔT^- . Однако присутствие фазовых множителей $e^{\pm 2i\phi_k}$ приводит к повороту в комплексной плоскости и изменению соотношения между реальной и мнимой частями при переходе через критическую плотность.

Зависимость усредненного по импульсам k аргумента фазового множителя 2ϕ для np канала 3S_1 и nn канала 1S_0 показана на Рис. 7.23. Вблизи критической точки такой

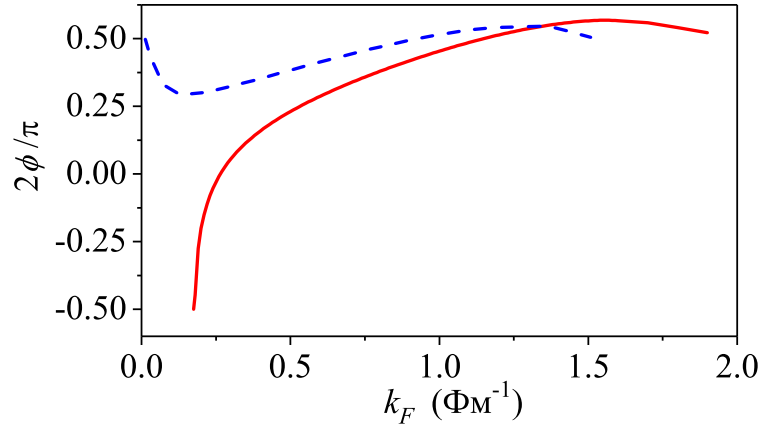


Рисунок 7.23. Усредненный аргумент 2ϕ фазового множителя как функция импульса Ферми для каналов 1S_0 (штриховая кривая) и 3S_1 (сплошная кривая).

удвоенный аргумент фазового множителя в канале 3S_1 стремится к $-\pi/2$, и поэтому реальная и мнимая части ΔT_b^+ меняются местами при проходе через критическую точку.

Таким образом, предложенный диагонализационный подход позволяет выделить явно вклады в запаздывающую и опережающую части T -матрицы. В дальнейшем их можно использовать для вычисления собственных энергий.

7.9. Случай ненулевого импульса центра масс

7.9.1. Вычисление T -матрицы

Формализм для вычисления T -матрицы в случае ненулевого импульса центра масс дан выше в разделе 7.4.3.

Однако для практических вычислений нужно напомнить, что Паули-проекторы (7.31) не коммутируют с оператором полного углового момента, сохраняется только его проекция. Поэтому парциально-волновое разложение уравнения для T -матрицы приводит к бесконечной системе связанных уравнений в случае ненулевого K . Чтобы обойти эту трудность, используем усредненные по углам проекторы [176], как и в разделе, посвященном решению УБГ. Усредненные функции $P_K(k)$ и $Q_K(k)$ не зависят от углов и отличны от нуля при следующих условиях:

$$\begin{aligned} P_K(k) &= \min \left[1, \frac{k_F^2 - k^2 - K^2}{2kK} \right], \quad \sqrt{k^2 + K^2} \leq k_F \\ Q_K(k) &= \min \left[1, \frac{k^2 + K^2 - k_F^2}{2kK} \right], \quad \sqrt{k^2 + K^2} \geq k_F. \end{aligned} \quad (7.81)$$

В результате усреднения полный момент пары j сохраняется. Однако операторы (7.31) с усредненными функциями (7.81) больше не удовлетворяют условиям для проекторов $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ и $\mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q}$. Поэтому необходимо изменить формализм. В частности, вместо уравнения (7.34) матрица преобразования $O(K)$ принимает следующий вид:

$$O(K) = \begin{pmatrix} \mathcal{P}^{\frac{1}{2}}(K) & 0 \\ 0 & \mathcal{Q}^{\frac{1}{2}}(K) \end{pmatrix}, \quad (7.82)$$

где операторы $\mathcal{P}^{\frac{1}{2}}$ и $\mathcal{Q}^{\frac{1}{2}}$ определены в подпространствах $\mathcal{H}_P$ и $\mathcal{H}_Q$. В импульсном представлении они задаются диагональными матрицами, в которых импульсные зависимости определяются квадратными корнями от функций $P_K(k)$ и $Q_K(k)$ из уравнений (7.81). При этом оператор $\mathcal{Q}^{\frac{1}{2}}$ тот же самый, что использовался для решения УБГ в начале этой главы.

Умножая далее исходное уравнение (7.32) для T -матрицы (с пропагатором (7.33)) справа и слева на $O(K)$, получаем симметричное уравнение для модифицированной T -матрицы $\tilde{T}(K) = O(K)T(K)O(K)$, которая отвечает взаимодействию $\tilde{V} = O(K)VO(K)$ полностью аналогично формализму, описанному в разделе 7.4.3.

В частности, динамическая часть исходной T -матрицы может быть найдена из

соотношения:

$$\Delta T = VO(K)\tilde{G}^{\text{II}}(K, E)O(K)V, \quad (7.83)$$

где $\tilde{G}^{\text{II}} = [JE + i0 - J\tilde{H}(K)]^{-1}$ — обобщенная резольвента эффективного гамильтониана, имеющего для ненулевого K следующий вид:

$$\tilde{H} = H_0(K) + JO(K)VO(K), \quad (7.84)$$

Матричный оператор $O(K)$ берется в усредненной по углам форме (7.82).

Таким образом, вычисление T -матрицы сводится к диагонализационной процедуре для эффективного гамильтониана (7.84), как и в случае нулевого импульса центра масс.

7.9.2. Сверхтекучие щели для ненулевого K .

Как и в случае $K = 0$, в результате диагонализации матрицы гамильтониана $\tilde{H}(K)$ могут получиться собственные состояния с комплексными энергиями, что отвечает спариванию. Здесь опять естественно связать мнимые части собственных значений Γ_0 с величиной щели при импульсе Ферми $\Delta_K(k_F)$, т.е. $\Delta_K(k_F) \approx \Gamma_0$. Однако из вида элементов матрицы $O(K)$ следует, что эффективное притяжение ослабевает по мере роста K , поэтому щели должны становиться меньше.

Такой необычный режим сверхтекучести возникает, например, в решениях уравнения для щели вида Ларкина–Овчинникова–Флюде–Феррела (LOFF) при ненулевом K [215–219], который приводит к дополнительному осциллирующему множителю и нарушению пространственной симметрии, когда волновая функция куперовской пары зависит от координаты ее центра масс. Похожий эффект возникает в асимметричной ядерной материи [198, 217–219], когда большие асимметрии приводят к зависимостям щелей от импульса центра масс. Также к этой проблеме имеют отношение случаи зависящих от углов щелей [220] и деформированных поверхностей Ферми [218].

Вычислим щели для тех же трех основных конфигураций, только с ненулевым K , т.е. для связанных каналов 3SD_1 в симметричной ядерной материи и каналов 1S_0 и 3PF_2 в нейтронной материи. На Рис. 7.24 максимальные щели для канала $\Delta_K(k_F)$ 1S_0 в нейтронной материи показаны как функции импульса Ферми k_F для различных значений импульса центра масс K . Как и ожидалось, область плотностей, где есть спаривание, становится уже с увеличением K . Такие зависимости для триплетных каналов 3SD_1 и 3PF_2 приводятся на Рис. 7.25 а и б.

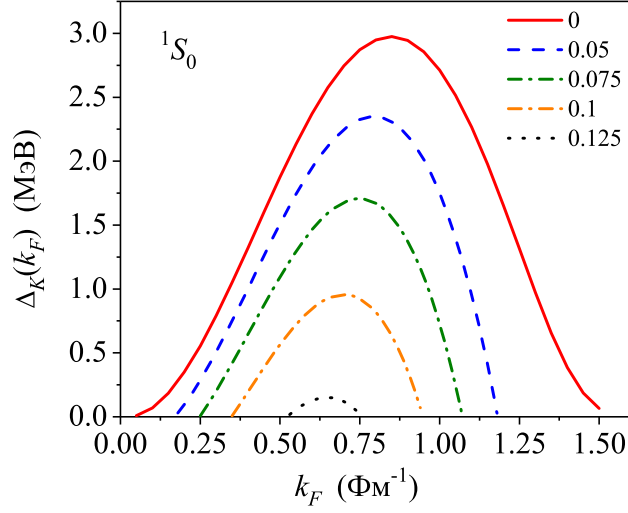


Рисунок 7.24. Щели $\Delta_K(k_F)$, найденные из мнимых частей собственных значений E_{-1} для канала 1S_0 , при различных значениях импульса центра масс K . Значения K приведены на рисунке в $\Phi\text{М}^{-1}$.

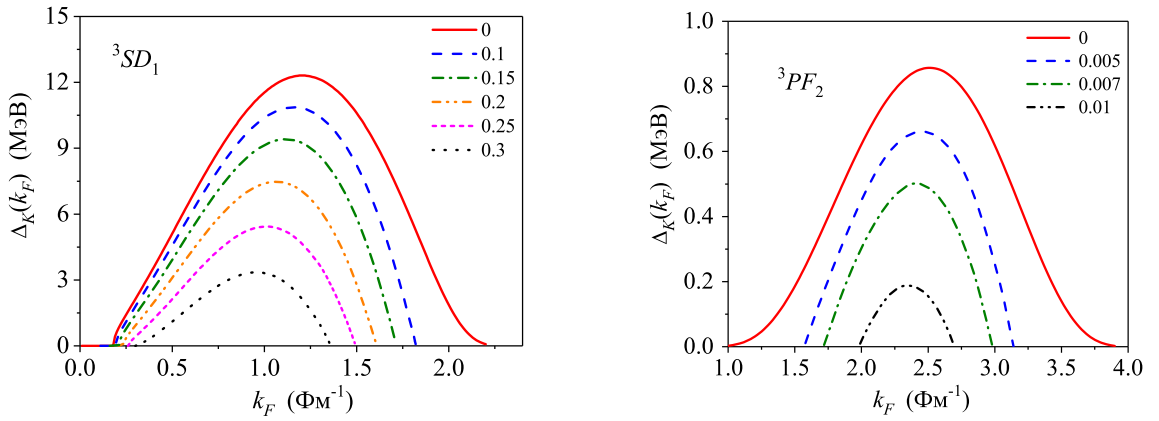


Рисунок 7.25. Сверхтекучие щели для pr каналов 3SD_1 (слева) и nn каналов 3PF_2 (справа), найденные из мнимых частей эффективного гамильтониана, для различных значений импульса центра масс K , приведенных на рисунках в $\Phi\text{М}^{-1}$.

Импульсные зависимости щели здесь также могут быть восстановлены из собственных функций эффективного гамильтониана. Однако в этом случае вклады в динамическую часть T -матрицы (7.83) содержат дополнительную матрицу O , т.е.:

$$\Delta T_b^\pm(E) = \pm \frac{VO(K)|z_{\pm 1}\rangle\langle z_{\pm 1}^*|O(K)V}{E - E_{\pm 1}}. \quad (7.85)$$

Сравнивая это выражение с уравнением (7.76) и имея в виду связь между T -матрицей на массовой поверхности и импульсной зависимостью щели (7.80), приходим к выводу,

что обобщение уравнения (7.62) на случай ненулевых K должно иметь следующий вид:

$$\langle k|VO(K)|z_1\rangle/k = Be^{i\phi_k}\Delta_K(k), \quad (7.86)$$

где функция $\Delta_K(k)$ представляет собой импульсную зависимость щели для фиксированного импульса центра масс K . Такие функции, а также аргументы ϕ_k для динейтронного канала 1S_0 , приводятся на Рис. 7.26 а и б.

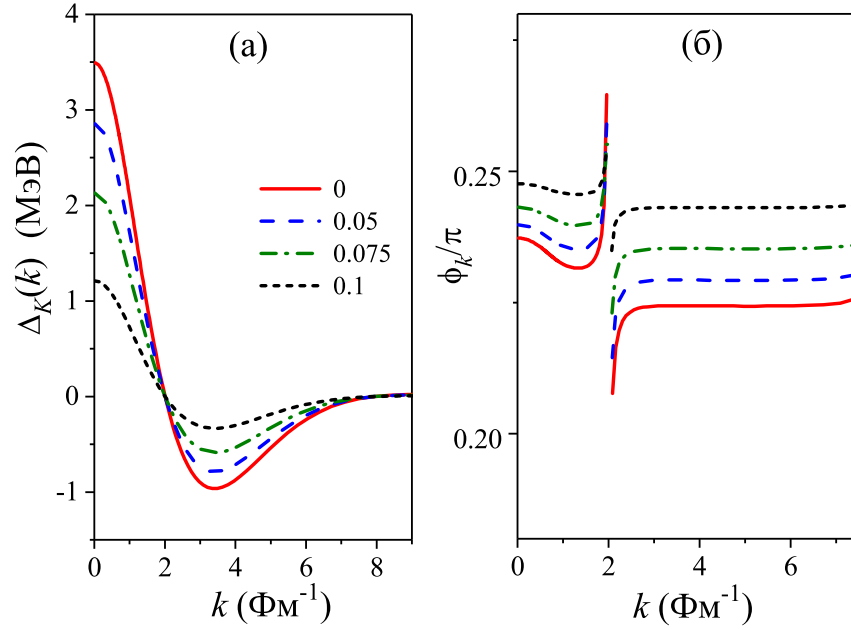


Рисунок 7.26. Импульсные зависимости щели (а) и аргументы фазовых множителей (б), найденные из уравнения (7.86) для канала 1S_0 при $k_F=0.7 \Phi M^{-1}$. Значения K указаны на панели (а) в ΦM^{-1} . Обозначения на панелях (а) и (б) одинаковые.

Здесь видна корреляция между аргументами и величиной максимальной щели. Когда $\Delta_K(k_F)$ стремится к нулю, соответствующая фаза стремится к $\pi/4$.

Таким образом, при увеличении значения K эффективное притяжение уменьшается, что приводит к более узкому интервалу плотностей, в котором есть сверхтекучая фаза, а также к уменьшению щелей во всех рассмотренных каналах. При этом способ вычисления T -матрицы остается одинаковым для случаев $K = 0$ и $K \neq 0$.

Здесь был рассмотрен достаточно простой случай, когда используется усреднение по углам в проекторах Паули, а также в качестве одночастичных и однодырочных энергий берутся соответствующие кинетические энергии. Дальнейшее обобщение схемы связано с включением одночастичных потенциалов (и с изменением спектра свободного

гамильтониана H_0), а также с учетом одночастичных и однодырочных спектральных функций.

7.10. Заключительные замечания

В этой главе было показано, как диагонализационная техника для вычисления T -матрицы, предложенная в главе 4, переносится в ядерную среду. Здесь матрица реакции из уравнения Бете–Голдстоуна определяется в явном виде через резольвенту эффективного гамильтониана в Паули-разрешенном пространстве. При этом многочисленные решения этого интегрального уравнения при многих энергиях и относительных импульсах заменяются однократной диагонализацией матрицы этого эффективного гамильтониана для каждого импульса центра масс и для каждого шага самосогласованных итераций. Также получаются простые формулы для вычисления собственной энергии.

Далее такой диагонализационный подход был обобщен на случай учета двухдырочных корреляций с пропагатором Галицкого–Фейнмана, когда эффективный гамильтониан неэрмитов, и в ядерной среде может возникать сверхтекучая фаза. Показано, как находить сверхтекучие щели и импульсные зависимости щелей из собственных функций эффективного гамильтониана. Кроме того, получено спектральное разложение для полной T -матрицы, а также для ее запаздывающей и опережающей частей, каждая из которых дает вклад в одночастичную или однодырочную собственные энергии.

Подробно была рассмотрена область низких плотностей для связанных каналов 3SD_1 , где возникает фазовый переход в зависимости собственных энергий связанных состояний эффективного гамильтониана от плотности среды. Этот фазовый переход является, по-видимому, частным случаем кроссовера между Бозе-конденсатом квази-дейтронов и сверхтекучей фазой, который известен при ненулевой температуре. Поэтому полученные результаты могут быть полезны в рамках общей проблемы такого кроссовера.

Дополнена информация о поведении парциальных фазовых сдвигов в ядерной среде в случае присутствия сверхтекучей фазы. В частности, детально изучено поведение фаз вблизи критической точки в каналах 3SD_1 . Показано, что поведение фазового сдвига вблизи импульса Ферми связано не с самим присутствием сверхтекучей

фазы, а с наличием двух связанных состояний у эффективного гамильтониана. При этом при переходе через критическую точку качественно поведение фаз не меняется. Скорее всего, этот эффект связан со свойствами кроссовера, когда основные характеристики системы меняются плавно, а не скачком, и есть некоторая переходная область плотностей между двумя разными фазами среды.

Наконец, метод вычисления T -матрицы был обобщен для случая ненулевого импульса центра масс K . Здесь также возможны комплексные собственные значения у эффективного гамильтониана, а значит, и специальный режим сверхтекучести, когда у куперовских пар есть ненулевой импульс центра масс. Были вычислены щели при ненулевых K для трех основных каналов 1S_0 , 3SD_1 и 3PF_2 . При увеличении K щели очень быстро уменьшаются, так что есть очень небольшая область, в которой эффект сверхтекучести сохраняется.

Итак, результаты этой главы показали, что метод дискретизации оказывается очень удобным инструментом для исследования процессов в ядерной материи. Выше рассмотрены достаточно простые случаи, когда использовалось приближение среднего поля, исследовались процессы при нулевой температуре, а также был задействован ряд упрощений, таких как приближение эффективной массы для одночастичных энергий, усреднение по углам для проекторов Паули и др. Однако основные характерные особенности расчетов в ядерной среде проведенные исследования учитывают. В дальнейшем планируется обобщение развитого подхода в рамках полного формализма самосогласованных функций Грина [179]. Также будет интересным обобщение развитой техники расчета сверхтекучих щелей на случай ненулевой температуры.

Заключение

В диссертационной работе дано описание нового общего подхода к решению квантовых задач рассеяния, основанного на проектировании операторов и волновых функций рассеяния в дискретный базис стационарных волновых пакетов. Развитый формализм позволяет свести интегральные уравнения теории рассеяния (Липпмана–Швингера или Фаддеева–Якубовского) к обычным матричным уравнениям, которые можно решать непосредственно на вещественной оси энергий.

Основные результаты работы следующие:

1. Развита дискретная методика, позволяющая формулировать и решать задачи рассеяния в терминах нормируемых состояний и дискретизации континуума. В таком подходе наблюдаемые находятся из матричных аналогов интегральных уравнений в базисе стационарных волновых пакетов. Эффективность метода продемонстрирована на примере различных двухчастичных задач, таких как нуклон-ядерное рассеяние с оптическим нелокальным потенциалом взаимодействия, рассеяние легких ядер с учетом кулоновского взаимодействия, нуклон-нуклонное рассеяние с учетом тензорного взаимодействия и ненуклонных степеней свободы.
2. Развита новая методика дискретных спектральных сдвигов, позволяющая находить наблюдаемые в многоканальных задачах рассеяния при многих энергиях одновременно на основе однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана системы. Впервые предложена корректная трактовка многоканальных псевдосостояний.
3. Создан новый формализм квантовой теории рассеяния на импульсной решетке, позволяющий решать общие трехчастичные задачи рассеяния в рамках фаддеевского подхода, т.е. с полным учетом обменных процессов. Метод успешно применен для описания упругого рассеяния в трехнуклонной системе с реалистическими NN потенциалами, а также для описания процессов развала.
4. Создан новый микроскопический подход к описанию прямых ядерных реакций. Подход успешно применен для описания упругого рассеяния и развала составных двухфрагментных частиц на ядрах. Показана необходимость учета вклада

закрытых каналов при низких энергиях столкновения. Обоснована применимость метода многоканальной редукции в случае использования оптических потенциалов взаимодействия между фрагментами налетающей частицы и ядром-мишенью. На основе проекционного формализма Фешбаха развита техника построения эффективных нелокальных потенциалов взаимодействия между составными частицами.

5. Развита диагонализационный подход к самосогласованному вычислению матрицы реакции (T -матрицы) в ядерной среде в приближении среднего поля в рамках схемы Бракнера-Хартри-Фока. Вычислено уравнение состояния симметричной ядерной материи на основе пакетной техники. Предложена эффективная схема вычисления собственной энергии.
6. Диагонализационный подход для вычисления T -матрицы в ядерной среде обобщен на случай учета двухдырочных корреляций. Развита новый метод вычисления сверхтекучих щелей в ядерной среде. Найдены сверхтекучие щели для всех основных парциальных NN каналов, в которых есть притяжение. Вычислены щели в случае ненулевого импульса центра масс куперовских пар.

Развитый подход имеет ряд преимуществ, позволяющих существенно упростить решение задач рассеяния нескольких тел.

Благодаря интегрированию ядер уравнений по ячейкам дискретизации сложные движущиеся особенности этих ядер сглаживаются и усредняются, в результате получаются чисто матричные уравнения без каких-либо энергетических и импульсных особенностей. Это позволяет решать их непосредственно при вещественных энергиях.

Кроме того, в пакетном подходе используется представление канального гамильтониана и формализм возмущенных волновых пакетов, что позволяет значительно упростить решение задачи. Например, вместо полной немассовой T -матрицы при многих энергиях, входящей в уравнения Фаддеева в традиционном подходе, в МПДК используется потенциал парного взаимодействия. Также метод имеет существенные преимущества, если требуются расчеты при нескольких энергиях, поскольку наиболее трудоемкие части алгоритма не зависят от энергии и могут быть выполнены один раз, что значительно уменьшает общее время вычислений.

Дискретизованные состояния континуума в парных подсистемах трактуются как

возбужденные состояния гамильтониана. Это позволяет рассматривать процессы трехчастичного развала как неупругие переходы в возбужденные состояния системы, что, в свою очередь, приводит к упрощению описания таких процессов.

Можно отметить, что поставленная цель исследования была выполнена. Развитый подход позволяет проводить вычисления в трехчастичных задачах рассеяния в нормированном базисе. При этом метод сочетает преимущества дифференциального формализма теории рассеяния (отсутствие сингулярностей) и интегрального (неявный учет граничных условий, возможность прямых расчетов с нелокальными потенциалами взаимодействия и др.). Схема решения задач близка к используемой для связанных состояний. Одним из важных следствий для практических расчетов является то, что алгоритмы решения задач допускают распараллеливание высокого уровня, в том числе и реализацию на графическом процессоре. В частности, на основе развитого в диссертации формализма для решения уравнений Фаддеева были выполнены первые расчеты на персональном компьютере, оснащенный графической картой, в трехнуклонной системе с реалистическими потенциалами взаимодействия [93].

Основанный на дискретизации непрерывного спектра подход открывает новые возможности в решении задач рассеяния. Так наблюдаемые в многоканальной задаче могут быть найдены из дискретизованных спектров полного и невозмущенного гамильтонианов. Можно перейти от “пакетированных” плоских волн к кулоновским функциям с помощью матриц поворота, в то время как для исходных ненормируемых функций коэффициенты такого преобразования содержат существенные особенности. Более того, можно построить аппроксимации для различных “пакетных” состояний в некотором удобном L_2 базисе, что позволяет существенно упростить вычисление матричных элементов взаимодействия.

В заключение хочется отметить, что метод продолжает активно развиваться. В ближайшее время планируется его обобщение для фаддеевских расчетов с потенциалами, включающими внутренние степени свободы. Также предполагается дальнейшее развитие диагонализационного подхода в ядерной материи для наиболее общей самосогласованной схемы формализма СФГ, обобщение техники расчета сверхтекучих щелей при ненулевой температуре.

Развитый метод пакетной дискретизации континуума является универсальным и может быть использован в различных других областях ядерной физики, не

рассмотренных здесь, а также в атомной и химической физике, в квантовой статистике. Также метод может быть обобщен на релятивистский случай.

Благодарности

Большая часть проделанной работы, начиная от постановки первых задач и заканчивая важными приложениями развитого подхода, была сделана под руководством и в многолетнем сотрудничестве с моим учителем проф. В.И. Кукулиным, памяти которого я посвящаю эту диссертацию.

Глубокую благодарность автор выражает своему коллеге, соавтору и учителю В.Н. Померанцеву за плодотворную совместную работу и помощь во всех вопросах, большая часть результатов получена в общих работах с ним. Автор выражает свою признательность ближайшей коллеге и соавтору М.Н. Платоновой.

Особую сердечную благодарность автор приносит проф. Л.Д. Блохинцеву за постоянную поддержку и помощь. Автор признательна всему коллективу лаборатории теории атомного ядра и сотрудникам отдела физики атомного ядра НИИЯФ МГУ во главе с проф. Н.Г. Чечениным за прекрасную дружескую атмосферу и участие. Часть работы, посвященная приложениям в ядерной материи, появилась по инициативе немецкого соавтора и коллеги проф. Герберта Мютера из Тюбингенского Университета.

Эта работа не была бы написана без неоценимой многолетней поддержки и помощи всей моей семьи.

Список литературы

- [1] Л.Д. Фаддеев, *Теория рассеяния для системы трех частиц*, ЖЭТФ **39**, 1459 (1960).
- [2] О.А. Якубовский, *Об интегральных уравнениях теории рассеяния для N частиц*, Ядерная физика **5**, 1312 (1967).
- [3] С.П. Меркурьев, Л.Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц* (М., Наука, 1985).
- [4] S.P. Merkuriev, C. Gignoux, A. Laverne, *Three-body scattering in configuration space*, Ann. Phys. (N.Y.) **99**, 30 (1976).
- [5] W. Gloeckle, H. Witala, D. Hueber, H. Kamada, J. Golack, *The three-nucleon continuum: achievements, challenges and applications*, Phys. Rep. **274**, 107 (1996).
- [6] H. Witala, W. Gloeckle, *Di-neutron and the three-nucleon continuum observables*, Phys. Rev. C **85**, 064003 (2012).
- [7] A. Deltuva, A.C. Fonseca, *Four-body calculation of proton- ^3He scattering*, Phys. Rev. Lett. **98**, 162502 (2007).
- [8] M. Viviani et al., *Benchmark calculation of p - ^3H and n - ^3He scattering*, Phys. Rev. C **95**, 034003 (2017).
- [9] R. Lazauskas, *Solution of the n - ^4He elastic scattering problem using the Faddeev-Yakubovsky equations*, Phys. Rev. C **97**, 044002 (2018).
- [10] I.C. Percival, *A box variational method for scattering phases*, Proc. Phys. Soc. **70**, 494 (1957).
- [11] E.P. Wigner and L. Eisenbud, *Higher angular momenta and long range interaction in resonance reactions*, Phys. Rev. **72**, 29 (1947).
- [12] A.M. Lane, D. Robson, *Comprehensive formalism for nuclear reaction problems. I. Derivation of existing reaction theories*, Phys. Rev. **151**, 774 (1966).

- [13] C.W. McCurdy, T.N. Rescigno and B.I. Schneider, *Interrelation between variational principles for scattering amplitudes and generalized R-matrix theory*, Phys. Rev. A **36**, 2061 (1987).
- [14] O.I. Tolstikhin, V.N. Ostrovsky and H. Nakamura, *Siegert pseudostate formulation of scattering theory: One-channel case*, Phys. Rev. A **58**, 2077 (1998).
- [15] M. Hesse, J. Roland and D. Baye, *Solving the resonating-group equation on a Lagrange mesh*, Nucl. Phys. A **709**, 184 (2002).
- [16] P. Descouvemont, D. Baye, *The R-matrix theory*, Rep. Prog. Phys. **73**, 036301 (2010).
- [17] E.J. Heller, T.N. Rescigno, W.P. Reinhardt, *Extraction of scattering information from Fredholm determinants calculated in an L^2 basis: A Chebyshev discretization of the continuum* Phys. Rev. A **8**, 2946 (1973).
- [18] E.J. Heller, *Theory of J-matrix Green's functions with applications to atomic polarizability and phase-shift error bounds*, Phys. Rev. A **12**, 1222 (1975).
- [19] C.T. Corcoran, P.W. Langhoff, *Moment-theory approximations for nonnegative spectral densities*, J. Math. Phys. **18**, 651 (1977).
- [20] J.R. Winick, W.P. Reinhardt, *Moment T-matrix approach to e^+ -H scattering. I. Angular distribution and total cross section for energies below the pickup threshold*, Phys. Rev. A **18**, 910 (1978), *ibid. II. Elastic scattering and total cross section at intermediate energies*, **18**, 925 (1978).
- [21] I. Cacelli, R. Moccia and A. Rizzo, *Gaussian-type-orbital basis sets for the calculation of continuum properties in molecules: The differential photoionization cross section of molecular nitrogen*, Phys. Rev. A **57**, 1895 (1998).
- [22] В.Д. Эфрос, *Вычисление инклюзивных спектров переходов и сечений реакций без волновых функций непрерывного спектра*, Ядерная физика **41**, 1498 (1985).
- [23] V.D. Efros, W. Leidemann and G. Orlandini, *Photodisintegration of the three-nucleon systems and their polarizabilities*, Phys. Lett. B **408**, 1 (1997); V.D. Efros, W. Leidemann and G. Orlandini, *Exact ^4He spectral function in a semirealistic NN potential model*, Phys. Rev. C **58**, 582 (1998).

- [24] A. La Piana and W. Leidemann, *Calculation of exclusive cross sections with the Lorentz integral transform method*, Nucl. Phys. A. **677**, 423 (2000).
- [25] V.D. Efros, W. Leidemann, G. Orlandini, N. Barnea, *The Lorentz integral transform (LIT) method and its applications to perturbation-induced reactions*, J. Phys. G **34**, R459 (2007).
- [26] V.D. Efros, W. Leidemann, V.Yu. Shalamova, *On calculating response functions via their Lorentz integral transforms*, Few-Body Syst. **60**, 35 (2019).
- [27] Г.Ф. Филиппов, И.П. Охрименко, *О возможности использования осцилляторного базиса для решения задач непрерывного спектра*, Ядерная физика **32**, 332 (1980).
- [28] Ю.И. Нечаев, Ю.Ф. Смирнов, *О решении задачи рассеяния в осцилляторном представлении*, Ядерная физика **35**, 1385 (1982).
- [29] С.А. Зайцев, Ю.Ф. Смирнов, А.М. Широков, *Истинно многочастичное рассеяние в осцилляторном представлении*, Теоретическая и математическая физика **117**, 227 (1998).
- [30] V.A. Knyr, L.Ya. Stotland, *Possibility of solving the three-body problem by the J-matrix method*, Phys. At. Nucl. **59**, 575 (1996).
- [31] J.M. Bang, A.I. Mazur, A.M. Shirokov, Yu.F. Smirnov, S.A. Zaytsev, *P-matrix and J-matrix approaches: Coulomb asymptotics in the harmonic oscillator representation of scattering theory*, Ann. Phys. **280**, 299 (2000).
- [32] A.M. Shirokov, A.I. Mazur, I.A. Mazur, J.P. Vary, *Shell model states in the continuum*, Phys. Rev. C **94**, 064320 (2016).
- [33] A.M. Shirokov et al., *Prediction for a four-neutron resonance* Phys. Rev. Lett. **117**, 182502 (2016).
- [34] H.A. Yamani, M.S. Abdelmonem, *A simple method to extract resonance information from the Harris energy eigenvalues and eigenvectors*, J. Phys. A **26**, L1183 (1993).
- [35] H.A. Yamani and M.S. Abdelmonem, *The complex-scaling method using a complete L^2 -basis*, J. Phys. A **29**, 6991 (1996).

- [36] H.A. Yamani and M.S. Abdelmonem, *Multi-channel Green's functions in complete bases*, J.Phys. B **30**, 1633 (1997).
- [37] Z. Papp, C.-Y. Hu, Z.T. Hlousek, B. Kónya, S.L. Yakovlev, *Three-potential formalism for the three-body scattering problem with attractive Coulomb interactions*, Phys. Rev. A **63**, 062721 (2001); P. Doleschall, Z. Papp, *p-d scattering with a nonlocal nucleon-nucleon potential below the breakup threshold*, Phys. Rev. C **72**, 044003 (2005).
- [38] С.Л. Яковлев, З. Папп, *Кулоновская трехчастичная задача рассеяния в представлении дискретного базиса в гильбертовом пространстве*, Теоретическая и математическая физика **163**, 314 (2010).
- [39] R.C. Johnson and P.J.R. Soper, *Contribution of deuteron breakup channels to deuteron stripping and elastic scattering*, Phys. Rev. C **1**, 976 (1970).
- [40] G.H. Rawitscher, *Effect of deuteron breakup on elastic deuteron-nucleus scattering*, Phys. Rev. C **9**, 2210 (1974).
- [41] B. Anders and A. Lindner, *Elastic deuteron-nucleus scattering as a discretized three-body problem*, Nucl. Phys. A **296**, 77 (1978).
- [42] J.P. Farrell, C.M. Vincent and N. Austern, *Three-body model of deuteron breakup and stripping*, Ann. Phys. (N.Y.) **96**, 333 (1976); *Three-body model of deuteron breakup and stripping, II*, *ibid.* **114**, 93 (1978).
- [43] M. Yahiro, M. Nakano, Y. Iseri and M. Kamimura, *Coupled-Discretized-Continuum-Channels method for deuteron breakup reactions based on three-body model: Justification of the method for truncation and discretization of the p-n continuum*, Progr. Theor. Phys. **67**, 1467 (1982).
- [44] R. Y. Rasoanaivo and G. H. Rawitscher, *Discretization methods of the breakup continuum in deuteron-nucleus collisions*, Phys. Rev. C **39**, 1709 (1989).
- [45] M. Takashina, S. Takagi, Y. Sakuragi, Y. Iseri, *Continuum-discretized coupled-channels study of the $^{11}\text{Be} \rightarrow ^{10}\text{Be} + n$ breakup effect on ^{11}Be elastic scattering*, Phys. Rev. C **67**, 037601 (2003); T. Egami, K. Ogata, T. Matsumoto, Y. Iseri, M. Kamimura and M. Yahiro, *Gaussian expansion approach to nuclear and Coulomb breakup*, Phys. Rev. C **70**, 047604 (2004).

- [46] J. A. Tostevin, F.M. Nunes, I.J. Thompson, *Calculations of three-body observables in ^8B breakup*, Phys. Rev. C **63**, 024617 (2001).
- [47] N.C. Summers, F.M. Nunes and I.J. Thompson, *Extended continuum discretized coupled channels method: Core excitation in the breakup of exotic nuclei*, Phys. Rev. C **74**, 014606 (2006).
- [48] R.A.D. Piyadasa, M. Kawai, M. Kamimura, M. Yahiro, *Convergence of the solution of the continuum discretized coupled channels method*, Phys. Rev. C **60**, 044611 (1999).
- [49] I.J. Thompson, *Methods of Direct Reaction Theories*, in *Scattering*, edited by E.R. Pike and P.C. Sabatier (Academic Press , 2001) pp. 1360-1372.
- [50] Z.C. Kuruoglu, *Simulation of the breakup channel in three-particle collisions with pseudoreaction channels*, Phys. Rev. A **44**, 7307 (1991).
- [51] Z.C. Kuruoglu, *Coupled-reaction-channel calculation of a model n -d scattering problem above the breakup threshold*, Phys. Rev. C **44**, 1354 (1991).
- [52] S. Geltman and P.G. Burke, *Electron scattering by atomic hydrogen using a pseudo-state expansion. II. Excitation of $2s$ and $2p$ states near threshold*, J. Phys. B **3**, 1062 (1970).
- [53] I. Bray, A.T. Stelbovics, *Convergent close-coupling calculations of electron-hydrogen scattering*, Phys. Rev. A **46**, 6995 (1992).
- [54] A.S. Kadyrov, I. Bray, *Two-center convergent close-coupling approach to positron-hydrogen collisions*, Phys. Rev. A **66**, 012710 (2002).
- [55] I.B. Abdurakhmanov, A.S. Kadyrov, I. Bray, *Wave-packet continuum-discretization approach to ion-atom collisions: Nonrearrangement scattering*, Phys. Rev. A **94**, 022703 (2016).
- [56] E.A. Kolganova, A.K. Motovilov, Y.K. Ho, *Complex scaling of the Faddeev operator*, Nucl. Phys. A **684**, 623 (2001).
- [57] R. Lazauskas, J. Carbonell, *Application of the complex-scaling method to few-body scattering*, Phys. Rev. C **84**, 034002 (2011).

- [58] A. Kievsky *et al.*, *A high-precision variational approach to three- and four-nucleon bound and zero-energy scattering states*, J. Phys. G **35**, 063101 (2008).
- [59] J. Carbonell, A. Deltuva, A.C. Fonseca, R. Lazauskas, *Bound state techniques to solve the multiparticle scattering problem*, Progr. Part. Nucl. Phys. **74**, 55 (2014).
- [60] H. Weyl, *Über gewöhnliche Differentialgleichungen mit Singularitäten und die zugehörigen Entwicklungen willkürlicher Funktionen*, Math. Ann. **68**, 220 (1910).
- [61] Е. Вигнер, *Теория групп* (пер. с англ., ИИЛ, Москва, 1961).
- [62] Г. Бете, *Квантовая механика простейших систем* (пер. с нем., ОНТИ, Главред. общетехн. лит., Ленинград, Москва, 1935).
- [63] А. Мессиа, *Квантовая механика* (пер. с франц. под ред. Л.Д. Фаддеева, Наука, Москва, 1978).
- [64] W. Greiner, *Quantum Mechanics: An introduction* (Fourth Edition, Springer, 2001).
- [65] О.А.Рубцова, В.И. Кукулин, *Новый подход к решению задачи рассеяния составной частицы в поле ядра*, Ядерная физика **64**, 1769 (2001) .
- [66] О.А.Рубцова, В.И. Кукулин, *Функция Грина и матрица рассеяния в дискретном осцилляторном базисе*, Ядерная физика **64**, 1882 (2001).
- [67] В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Формулировка квантовой теории рассеяния в терминах собственных дифференциалов (стационарных волновых пакетов)*, Теоретическая и математическая физика **130**, 64 (2002).
- [68] В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Дискретная квантовая теория рассеяния*, Теоретическая и математическая физика **134**, 459 (2003).
- [69] В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Конечномерные аппроксимации операторов теории рассеяния в представлении волновых пакетов*, Теоретическая и математическая физика **139**, 291 (2004).
- [70] В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Решение задачи рассеяния заряженных частиц с помощью пакетной дискретизации континуума*, Теоретическая и математическая физика **145**, 393 (2005).

- [71] В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, О.А. Рубцова, *Метод пакетной дискретизации континуума для решения трехчастичной задачи рассеяния*, Теоретическая и математическая физика **150**, 473 (2007).
- [72] О.А. Рубцова, В.И. Кукулин, *Метод пакетной дискретизации континуума: путь к практическим вычислениям в многочастичных задачах рассеяния*, Ядерная физика **70**, 2077 (2007).
- [73] V.I. Kukulin and O.A. Rubtsova, *Elastic scattering on a nucleus and the breakup of the composite projectile via wave-packet continuum discretization*, Phys. Rev. C **76**, 047601 (2007).
- [74] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, A.M.M. Moro, *Continuum discretization methods in a composite particle scattering off a nucleus: Benchmark calculations*, Phys. Rev. C **78**, 034603 (2008).
- [75] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Quantum scattering theory on the momentum lattice*, Phys. Rev. C **79**, 064602 (2009).
- [76] В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, О.А. Рубцова, *Дискретное представление для функции спектрального сдвига и многоканальная S-матрица*, Письма в ЖЭТФ **90**, 443 (2009).
- [77] О.А. Рубцова, В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, *Микроскопическая теория ядерных реакций на основе техники волновых пакетов*, Известия РАН. Сер. физ. **73**, 798 (2009).
- [78] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, A. Faessler, *New approach toward a direct evaluation of the multichannel multienergy S matrix without solving the scattering equations*, Phys. Rev. C **81**, 064003 (2010).
- [79] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Validity of the coupled-channel reduction in three-body scattering*, Phys. Rev. C **84**, 044002 (2011).
- [80] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomeranysev, *Quantum scattering theory on the momentum lattice*, Phys. Part. Nucl. **41**, 1123 (2010).

- [81] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, A. Faessler, *Three-body breakup within the fully discretized Faddeev equations*, Phys. Rev. C **86**, 034004 (2012).
- [82] V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, *New way in few-body scattering calculations*, Few-Body Systems **54**, 1611 (2013).
- [83] О.А. Рубцова, *Новая трактовка процессов развала в малочастичных системах*, Известия РАН. Серия физ. **77**, 487 (2013).
- [84] О.А. Рубцова, В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, *Решение многоканальной задачи рассеяния на основе метода дискретных спектральных сдвигов*, Ядерная физика **77**, 514 (2014).
- [85] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Wave-packet continuum discretization for quantum scattering*, Ann. Phys. **360**, 613 (2015).
- [86] H. Müther, O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Discrete wave-packet representation in nuclear matter calculations*, Phys. Rev. C **94**, 024328 (2016).
- [87] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, H.Müther, *In medium bound states and pairing gap*, Phys. Rev. C **96**, 034327 (2017).
- [88] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Continuum discretization for quantum scattering and nuclear matter calculations*, Few-Body Systems **58**, 130 (2017).
- [89] V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, M.N. Platonova, V.N. Pomerantsev, H. Clement, T. Skorodko, *Nature of S-wave NN interaction and dibaryon production at nucleonic thresholds*, Eur. Phys. J. A **56**, 229 (2020).
- [90] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *In-medium T matrix in case of pairing instability*, Phys. Rev. C **103**, 014307 (2021).
- [91] V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, *Solving three-body scattering problems in the momentum lattice representation*, Phys. Rev. C **79**, 034001 (2009).
- [92] V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, *New general approach in few-body scattering calculations: Solving discretized Faddeev equations on a graphics processing unit*, Phys. Rev. C **89**, 064008 (2014).

- [93] V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, S.K. Sakhiev, *Fast GPU-based calculations in few-body quantum scattering*, Comp. Phys. Commun. **204**, 121 (2016).
- [94] D.A. Sailaubek, O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, *Charged particle scattering problem with a complex-range Gaussian basis*, Eur. Phys. J. A **54**, 126 (2018).
- [95] V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, *Model with coupled internal and external channels for $2N$ and $3N$ systems*, Few-Body Systems **60**, 48 (2019).
- [96] V.I. Kukulin *et al.*, *Role of the $d^*(2380)$ dibaryon in NN interaction*, Phys. Lett. B **801**, 135146 (2020).
- [97] O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, M.N. Platonova, *P-wave dibaryon resonances in pp elastic scattering and near-threshold pion production*, Phys. Rev. D **102**, 114040 (2020).
- [98] Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц* (перев. с англ., Мир, Москва, 1969).
- [99] О.А. Рубцова, *Развитие метода пакетной дискретизации континуума в квантовой теории рассеяния*, диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н. (Москва, 2004).
- [100] М. Мошинский, *Гармонический осциллятор: от атомов до кварков* (перев. с англ., Мир, Москва, 1972).
- [101] M. Čížek, J. Horáček, H.-D. Meyer, *Schwinger–Lanczos algorithm for calculation of off-shell T -matrix elements and Wynn’s epsilon algorithm*, Comp. Phys. Commun. **131**, 41 (2000).
- [102] A. Kievskiy, M. Viviani, S. Rosati, *Polarization observables in p - d scattering below 30 MeV*, Phys. Rev. C **64**, 024002 (2001).
- [103] H. Feshbach, *The S matrix for absorptive Hamiltonians*, Ann. Phys. (N.Y.) **164**, 398 (1985).
- [104] E. Hiyama and M. Kamimura, *Gaussian and Infinitesimally-Shifted Gaussian Lobe Basis Functions for Precision Few-Body Calculations* (Preprint of Kuyshu Univ., 2002).
- [105] F. Perey and B. Buck, *A non-local potential model for the scattering of neutrons by nuclei*, Nucl. Phys. **32**, 353 (1962).

- [106] V.I. Kukulin, V.M. Krasnopolsky, V.T. Voronchev, P.B. Sazonov, *Detailed study of the cluster structure of light nuclei in a three-body model: (II). The spectrum of low-lying states of nuclei with $A = 6$* , Nucl. Phys. A **453**, 365 (1986).
- [107] V.G. Neudatchin, V.I. Kukulin, V.L. Korotkich, V.P. Korennoy, *A microscopically substantiated local optical potential for α - α scattering*, Phys. Lett. B **34**, 581 (1971).
- [108] B. Buck, H. Friedrich, C. Wheatley, *Local potential models for the scattering of complex nuclei*, Nucl. Phys. A **275**, 246 (1977).
- [109] V.I. Kukulin *et al.*, *Integral equations for composite-particle scattering taking the Pauli principle into account*, J. Phys. G **4**, 1409 (1978); V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *The orthogonal projection method in scattering theory*, Ann. Phys. (N.Y.) **111**, 330 (1978).
- [110] R.L. Workman, W.J. Briscoe, I.I. Strakovsky, *Partial-wave analysis of nucleon-nucleon elastic scattering data*, Phys. Rev. C **94**, 065203 (2016); URL: <http://gwdac.phys.gwu.edu>.
- [111] V.G.J. Stoks, R.A.M. Klomp, C.P.F. Terheggen, J.J. de Swart, *Construction of high-quality NN potential models*, Phys. Rev. C **49**, 2950 (1994).
- [112] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (Наука, Москва, 1971).
- [113] Э. Шмид, Х. Цигельман, *Проблема трех тел в квантовой механике* (перев. с англ., Наука, Москва, 1979).
- [114] A.U. Hazi, H.S. Taylor, *Stabilization method of calculating resonance energies: Model problem*, Phys. Rev. A **1**, 1109 (1970).
- [115] A.T. Kruppa, K. Arai, *Resonances and the continuum level density*, Phys. Rev. A **59**, 3556 (1999); K. Arai, A.T. Kruppa, *Continuum level density in a microscopic cluster model: Parameters of resonances*, Phys. Rev. C. **60**, 064315 (1999).
- [116] R. Suzuki, T. Myo, K. Katō, *Level density in the complex scaling method*, Progr. Theor. Phys. **113**, 1273 (2005).

- [117] S.N. More et al., *Universal properties of infrared oscillator basis extrapolations*, Phys. Rev. C **87**, 044326 (2013).
- [118] E. Beth, G.E. Uhlenbeck, *The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures*, Physica **4**, 915 (1937).
- [119] В.С. Буслаев, С.П. Меркурьев, *О связи между третьим виртуальным коэффициентом и матрицей рассеяния*, Теоретическая и математическая физика **5**, 372 (1970).
- [120] I.C. Percival, *Energy moments of scattering phase shifts*, Proc. Phys. Soc. **80**, 1290 (1962).
- [121] И.М. Лифшиц, *Об одной задаче теории возмущений, связанной с квантовой статистикой*, Успехи математических наук **7**, 171 (1952).
- [122] М.Г. Крейн, *О формуле следов в теории возмущений*, Матем. сборник **33**, 597 (1953).
- [123] М.Ш. Бирман, М.Г. Крейн, *К теории волновых операторов и операторов рассеяния*, Докл. АН СССР **144**, 475 (1962).
- [124] Д.Р. Яфаев, *Математическая теория рассеяния* (изд. С.-Петербургского университета, СПб., 1994) [D.R. Yafaev, *Mathematical scattering theory. General theory*, (Amer. Math. Soc. Providence, RI, 1992)].
- [125] M.Sh. Birman, A.B. Pushnitsky, *Spectral shift function, amazing and multifaceted*, Integr. eq. oper. theory **30**, 191 (1998).
- [126] S. Albeverio, K. A. Makarov, A. K. Motovilov, *Graph subspaces and the spectral shift function*, Canadian Journal of Mathematics **55**, 449 (2003).
- [127] И.М. Лифшиц, *О вырожденных регулярных возмущениях. I. Дискретный спектр*, Журнал экспериментальной и теоретической физики **17**, 1017 (1947).
- [128] И.М. Лифшиц, *О вырожденных регулярных возмущениях. II. Квази-непрерывный и непрерывный спектры*, Журнал экспериментальной и теоретической физики **17**, 1076 (1947).

- [129] J. Friedel, *Metallic alloys*, Nuovo Cim. Ser. 10 Suppl. **7**, 287 (1958).
- [130] P. Lloyd, *Wave propagation through an assembly of spheres: II. The density of single-particle eigenstates*, Proc. Phys. Soc. **90**, 207 (1967).
- [131] J.S. Faulkner, *Scattering theory and cluster calculations*, J. Phys. C **10**, 4661 (1997).
- [132] P. Cvitanović et al., *Chaos: Classical and Quantum*, Part V, URL: <http://www.chaosbook.org>.
- [133] M.G. Krein, V.A. Yavryan, *Functions of spectral shift appearing as a result of perturbations of a positive operator*, J. Oper. Theor. **6**, 155 (1981); V.M. Adamjan, H. Neidhardt, *On the summability of the spectral shift function for pair of contractions and dissipative operators*, J. Oper. Theor. **24**, 187 (1990).
- [134] Sh. Shlomo, *Energy level density of nuclei*, Nucl. Phys. A **539**, 17 (1992).
- [135] K. Konishi, G. Paffuti, *Quantum Mechanics. A New Introduction*, (Oxford University Press Inc., New York, 2009).
- [136] E. Hiyama, Y. Kin, M. Kamimura, *Gaussian expansion method for few-body systems*, Progr. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003).
- [137] P. Klos et al., *Signatures of few-body resonances in finite volume*, Phys. Rev. C **98**, 034004 (2018).
- [138] Y. Suzuki, D. Baye, A. Kievsky, *Solving a coupled-channels scattering problem by adding confining potentials*, Nucl. Phys. A **838**, 20 (2010).
- [139] O.A. Rubtsova, V.N. Pomerantsev, *Spectral shift function for a discretized continuum*, J. Phys. A (submitted).
- [140] M. Danos, W. Greiner, *Eigenchannel theory of nuclear reactions*, Phys. Rev. **146**, 708 (1966);
- [141] H.G. Wahsweller, W. Greiner, M. Danos, *Continuum nuclear structure of ^{16}O in the eigenchannel reaction theory*, Phys. Rev. **170**, 893 (1968).
- [142] Ch.W. Clark, K.T. Taylor, *Eigenchannel analysis of neon-negative-ion resonances*, J. Phys. B **15**, L213 (1982).

- [143] V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, A. Faessler, *Generalized orthogonality-condition model for the NN interaction*, Phys. Rev. C **59**, 3021 (1999).
- [144] H. Witała, W. Glöckle, J. Golak, A. Nogga, H. Kamada, R. Skibinski, J. Kuros-Zolnierczuk, *Nd elastic scattering as a tool to probe properties of $3N$ forces*, Phys. Rev. C **63**, 024007 (2001).
- [145] V.M. Suslov and B. Vlahovic, *Generalization of the Numerov method for solution of Nd breakup problem in configuration space*, Phys. Rev. C **69**, 044003 (2004).
- [146] Ch. Elster, T. Lin, W. Glöckle, S. Jeschonnek, *Faddeev and Glauber calculations at intermediate energies in a model for $n+d$ scattering*, Phys. Rev. C **78**, 034002 (2008).
- [147] A. Deltuva, A.C. Fonseca, *Ab initio four-body calculation of n - ^3He , p - ^3H and d - d scattering*, Phys. Rev. C **76**, 021001(R) (2007).
- [148] R. Lazauskas, J. Carbonell, *Testing nonlocal nucleon-nucleon interactions in four-nucleon systems*, Phys. Rev. C **70**, 044002 (2004).
- [149] A. Deltuva, A.C. Fonseca, P.U. Sauer, *Momentum-space treatment of the Coulomb interaction in three-nucleon reactions with two protons*, Phys. Rev. C **71**, 054005 (2005).
- [150] H. Witała, W. Glöckle, *Cross sections for the three-body photodisintegration of ^3He at $E_\gamma=12.8$, 13.5 , and 14.7 MeV*, Phys. Rev. C **83**, 034003 (2011).
- [151] X. C. Ruan *et al.*, *Experimental study of neutron-neutron quasifree scattering in the nd breakup reaction at 25 MeV*, Phys. Rev. C **75**, 057001 (2007).
- [152] A. Deltuva, A.C. Fonseca, P.U. Sauer, *Momentum-space description of three-nucleon breakup reactions including the Coulomb interaction*, Phys. Rev. C **72**, 054004 (2005).
- [153] W. Glöckle, G. Rawitscher, *Scheme for an accurate solution of Faddeev integral equations in configuration space*, Nucl. Phys. A **790**, 282c (2007).
- [154] Z.C. Kuruoglu and F.S. Levin, *Tests of an L^2 discretization procedure for approximating three-body breakup effects*, Phys. Rev. Lett. **48**, 899 (1982); R. Kozack and F.S. Levin, *Deuteron-nucleus elastic scattering: Solution of the standard model via the finite element method*, Phys. Rev. C **36**, 883 (1987).

- [155] I. Bray, D.A. Kononov, I.E. McCarthy, *Convergence of an L^2 approach in the coupled-channel optical-potential method for e - H scattering*, Phys. Rev. A **43**, 1301 (1991).
- [156] W. Glöckle, G.L. Payne, *Boundary conditions for three-body scattering in configuration space*, Phys. Rev. C **45**, 974 (1992).
- [157] G.L. Payne, W. Glöckle, J.L. Friar, *Boundary conditions for three-body scattering in configuration space*, Phys. Rev. C **61**, 024005 (2000).
- [158] P. Schwartz *et al.*, *Elastic neutron-deuteron scattering in the energy range from 2.5 MeV to 30 MeV*, Nucl. Phys. A **398**, 1 (1983).
- [159] S.N. Bunker *et al.*, *Differential cross sections and polarizations in elastic p - d scattering at medium energies*, Nucl. Phys. A **113**, 461 (1968).
- [160] Juan L. Romero, J.A. Jungerman, F.P. Brady, W.J. Knox, Y. Ishizaki, *Elastic scattering of 36.0- and 46.3-MeV neutrons from deuterium*, Phys. Rev. C **2**, 2134 (1970).
- [161] F. P. Brady, W.B. Broste, J. C. Wang, *Neutron-deuteron differential cross sections at 35.0 and 46.3 MeV*, Phys. Rev. C **9**, 1784 (1974).
- [162] R.T. Cahill, I.H. Sloan, *Theory of neutron-deuteron break-up at 14.4 MeV*, Nucl. Phys. A **165**, 161 (1971).
- [163] J.L. Friar *et al.*, *Benchmark solutions for n - d breakup amplitudes*, Phys. Rev. C **51**, 2356 (1995).
- [164] П.А. Белов, С.Л. Яковлев, *Асимптотический метод нахождения амплитуды трехчастичного развала. n - d рассеяние*, Ядерная физика **76**, 153 (2013).
- [165] A. Deltuva, *Three-body direct nuclear reactions: Nonlocal optical potential*, Phys. Rev. C **79**, 021602(R) (2009).
- [166] K. Ogata, K. Yoshida, *Applicability of the continuum-discretized coupled-channels method to the deuteron breakup at low energies*, Phys. Rev. C **94**, 051603(R) (2016).
- [167] N.K. Timofeyuk, R.C. Johnson, *Theory of deuteron stripping and pick-up reactions for nuclear structure studies*, Prog. Part. Nucl. Phys. **111**, 103738 (2020).

- [168] M. Kawai, M. Kamimura, K. Takesako, *Chapter V. Coupled-channels variational method for nuclear breakup and rearrangement processes*, Progr. Theor. Phys. Suppl. **89**, 118 (1986).
- [169] V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Break-up and elastic scattering of a composite particle in the field of a nucleus in the three-body realistic problem*, Yad. Fiz. (Sov. J. Nucl. Phys.) **50**, 27 (1989).
- [170] V.P. Popov, V.N. Pomerantsev, *Formation and collisional quenching of the long-lived $2s$ state of muonic hydrogen*, Phys. Rev. A **83**, 032516 (2011).
- [171] T. Sawada and K. Thushima, *Asymptotic conditions of the CDCC and the Faddeev treatments of three-body scattering problems in coordinate space*, Prog. Theor. Phys. **76**, 440 (1986).
- [172] A.J. Koning, J.P. Delaroche, *Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV*, Nucl. Phys. A **713**, 231 (2003).
- [173] I.J. Thompson, *Coupled reaction channels calculations in nuclear physics*, Comp. Phys. Rep. **7**, 167 (1988).
- [174] E.J. Stephenson *et al.*, *Polarized deuteron elastic scattering at 79 MeV and the effects of breakup channel coupling*, Phys. Rev. C **28**, 134 (1983); E.J. Stephenson *et al.*, *Features of the analyzing powers in deuteron elastic scattering near 80 MeV*, Nucl. Phys. A **359**, 316 (1981).
- [175] H. Feshbach, *A unified theory of nuclear reactions. II*, Ann. Phys. (N.Y.) **19**, 127 (1962).
- [176] M. I. Haftel and F. Tabakin, *Nuclear saturation and the smoothness of nucleon-nucleon potentials*, Nucl. Phys. A **158**, 1 (1970).
- [177] E. Schiller, H. Mütter, P. Czerski, *Pauli exclusion operator and binding energy of nuclear matter*, Phys. Rev. C **59**, 2934 (1999).
- [178] M. Baldo *et al.*, *High density symmetric nuclear matter in the Bethe-Brueckner-Goldstone approach*, Phys. Rev. C **65**, 017303 (2001).

- [179] W.H. Dickhoff, D. van Neck, *Many-Body Theory Exposed! Propagator description of quantum mechanics in many-body systems* (World Scientific, 2005).
- [180] T. Frick, Kh. Gad, H. Mütter, P. Czerski, *Nuclear self-energy and realistic interactions*, Phys. Rev. C **65**, 034321 (2002).
- [181] R. Sartor, *Solution to the Bethe–Faddeev equation within the continuous version of the hole-line expansion*, Phys. Rev. C **73**, 034307 (2006).
- [182] R.F. Bishop, H.B. Ghassib, M.R. Strayer, *Composite pairs and effective two-body scattering in a many-body medium*, Phys. Rev. A **13**, 1570 (1976).
- [183] H.R. Glyde, S.I. Hernadi, *Effective interactions in liquid ^3He* , Phys. Rev. B **28**, 141 (1983).
- [184] M. Beyer, S.A. Sofianos, *In-medium nucleon-nucleon potentials in configuration space*, J. Phys. G **27**, 2081 (2001).
- [185] W.H. Dickhoff, C.C. Gearhart, E.P. Roth, A. Polls, A. Ramos, *Phase shifts and in-medium cross sections for dressed nucleons in nuclear matter*, Phys. Rev. C **60**, 064319 (1999).
- [186] H.-J. Schulze, A. Schnell, G. Röpke, U. Lombardo, *Nucleon-nucleon cross sections in nuclear matter*, Phys. Rev. C **55**, 3006 (1997).
- [187] V.M. Galitskii, *The energy spectrum of a non-ideal Fermi gas*, Sov. Phys. JETP **7**, 104 (1958).
- [188] A. Ramos, A. Polls, W.H. Dickhoff, *Single-particle properties and short-range correlations in nuclear matter*, Nucl. Phys. A **503**, 1 (1989).
- [189] W.H. Dickhoff, C. Barbieri, *Self-consistent Green’s function method for nuclei and nuclear matter*, Progr. Part. Nucl. Phys. **52**, 377 (2004).
- [190] Y. Dewulf, D. Van Neck, M. Waroquier, *Effects of self-consistency in a Green’s function description of saturation in nuclear matter*, Phys. Rev. C **65**, 054316 (2002).
- [191] D.J. Dean, M. Hjorth-Jensen, *Pairing in nuclear systems: from neutron stars to finite nuclei*, Rev. Mod. Phys. **75**, 607 (2003).

- [192] A. Sedrakian, J.W. Clark, *Superfluidity in nuclear systems and neutron stars*, Eur. Phys. J. A **55**, 167 (2019).
- [193] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Perseus Books, New York, 1999).
- [194] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinski, *Quantum field theoretical methods in statistical physics* (sec. edition, Pergamon press, 1965).
- [195] H. Mütter, W.H. Dickhoff, *Pairing properties of nucleonic matter employing dressed nucleons*, Phys. Rev. C **72**, 054313 (2005).
- [196] B.E. Vonderfecht et al., *Bound pair states in nuclear matter*, Phys. Lett B **253**, 1 (1991).
- [197] S. Ramanan, S.K. Bogner, R.J. Furnstahl, *Weinberg eigenvalues and pairing with low-momentum potentials*, Nucl. Phys. A **797**, 81 (2007); Saras Srinivas, S. Ramanan, *Triplet pairing in pure neutron matter*, Phys. Rev. C **94**, 064303 (2016).
- [198] M. Stein, A. Sedrakian, X.G. Huang, J.W. Clark, *BCS-BEC crossovers and unconventional phases in dilute nuclear matter*, Phys. Rev. C **90**, 065804 (2014).
- [199] G.C. Strinati et al., *The BCS-BEC crossover: From ultra-cold Fermi gases to nuclear systems*, Phys. Rep. **738**, 1 (2018).
- [200] S. V. Loon, J. Tempere, H. Kurkjian, *Beyond Mean-Field Corrections to the Quasi-particle Spectrum of Superfluid Fermi Gases*, Phys. Rev. Lett. **124**, 073404 (2020).
- [201] H.A. Bethe, B.H. Brandow, and A.G. Petchek, *Reference spectrum method for nuclear matter*, Phys. Rev. **129**, 225 (1963).
- [202] H.Q. Song, M. Baldo, G. Giansiracusa, and U. Lombardo, *Bethe-Brueckner-Goldstone expansion in nuclear matter*, Phys. Rev Lett. **81**, 1584 (1998).
- [203] J.P. Jeukenne, A. Lejeune, and C. Mahaux, *Optical-model potential in finite nuclei from Reid's hard core interaction*, Phys. Rev. C **16**, 80 (1977).
- [204] F. Isaule, H. F. Arellano, A. Rios, *Di-neutrons in neutron matter within a Brueckner-Hartree-Fock approach*, Phys. Rev. C **94**, 034004 (2016).

- [205] R. Machleidt, F. Sammarruca, and Y. Song, *Nonlocal nature of the nuclear force and its impact on nuclear structure*, Phys. Rev. C **53**, R1483 (1996).
- [206] L.N. Cooper, *Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas*, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [207] A.B. Migdal, *Theory of Finite Fermi Systems* (Wiley, New York, 1967).
- [208] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum Press, New York, 1981).
- [209] C. Mahaux and R. Sartor, *Single-Particle Motion in Nuclei*, Adv. Nucl. Phys. **20**, 1 (1991).
- [210] Kh. Gad, *Equation of state for neutron matter*, Nucl. Phys. A **747**, 655 (2005).
- [211] H.F. Arellano, J.P. Delaroche, *Low-density homogeneous symmetric nuclear matter: Disclosing dinucleons in coexisting phases*, Eur. Phys. J. A **51**, 7 (2015).
- [212] V.A. Khodel, V.V. Khodel, J.W. Clark, *Solution of the gap equation in neutron matter*, Nucl. Phys. A **598**, 390 (1996).
- [213] H.-J. Schulze, A. Polls, A. Ramos, *Pairing with polarization effects in low-density neutron matter*, Phys. Rev. C **63**, 044310 (2001).
- [214] T. Alm, G. Röpke, A. Sedrakian, F. Weber, *3D_2 pairing in asymmetric nuclear matter*, Nucl. Phys. A **604**, 491 (1996).
- [215] А.И. Ларкин, Ю.Н. Овчинников, ЖЭТФ **47**, 1136 (1964) [Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965)].
- [216] P. Fulde, R.A. Ferrell, *Superconductivity in a strong spin-exchange field*, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).
- [217] A. Sedrakian, *Spatially inhomogeneous condensate in asymmetric nuclear matter*, Phys. Rev. C **63**, 025801 (2001).
- [218] H. Müther, A. Sedrakian, *Phases of asymmetric nuclear matter with broken space symmetries*, Phys. Rev. C **67**, 015802 (2003).
- [219] X.L. Shang, P. Wang, P. Yin, W. Zuo, *FFLO state with angle-dependent gap in asymmetric nuclear matter*, J. Phys. G **42**, 055105 (2015).

- [220] X.L. Shang, W. Zuo, *Angle-dependent gap state in asymmetric nuclear matter*, Phys. Rev. C **88**, 025806 (2013).

Приложения

А. Детали расчетов в пакетном базисе

Сетки дискретизации, используемые в расчетах

Для построения сеток дискретизации (по энергии или импульсам) в пакетном базисе используются в основном два распределения.

1) Эквидистантная сетка (ЭС). Здесь задается максимальное значение энергии $E_{\max}$ и далее ограниченный отрезок энергий $[0, E_{\max}]$ (или импульсов с $q_{\max} = \sqrt{2\mu E_{\max}}$) делится на N интервалов одинаковой ширины D :

$$E_i = i \cdot D, \quad i = 1, \dots, N, \quad D = \frac{E_{\max}}{N}. \quad (\text{A.1})$$

С ростом размерности $E_{\max}$ остается прежним, а ширины интервалов уменьшаются.

2) Сетка Чебышева (СЧ). Такая сетка позволяет перевести конечный интервал на всю полуось $[0, \infty)$. Распределение имеет вид:

$$\mathcal{E}_i = E_{\text{mid}} \left[\tan \left(\frac{2i-1}{2N} \frac{\pi}{2} \right) \right]^t, \quad i = 1, \dots, N, \quad (\text{A.2})$$

где E_{mid} — общий масштабный параметр и параметр t вводится для регулирования степени разреженности сетки (большие значения t отвечают меньшим $\mathcal{E}_1$ и более высоким $E_{\max} \equiv E_N$). Для СЧ с фиксированными значениями E_{mid} и t максимальная энергия будет также увеличиваться с увеличением размерности базиса N .

Построение разбиения по дискретизованному спектру

В практических расчетах часто вместо точных взаимодействующих волновых пакетов используются псевдосостояния гамильтониана $\hat{h}$, полученные из диагонализации его матрицы в некотором L_2 базисе. Основное условие соответствия состоит в том, чтобы энергии псевдосостояний E_i совпадали с собственными энергиями в пакетном базисе $\mathcal{E}_i^*$.

Восстановление границ интервалов $[\mathcal{E}_{i-1}, \mathcal{E}_i]_{i=1}^N$ может быть сделано приближенно следующим образом:

$$\mathcal{E}_0 = 0, \quad \mathcal{E}_i = \frac{1}{2}[E_i + E_{i+1}], \quad i = 1, \dots, N-1, \quad \mathcal{E}_N = E_N + \frac{1}{2}(\mathcal{E}_{N-1} - \mathcal{E}_{N-2}). \quad (\text{A.3})$$

в этом случае средние точки интервалов $\mathcal{E}_i^*$ будут немного отличаться от собственных значений E_i (если спектр не эквидистантный), однако при увеличении размерности

базиса эти отличия становятся практически незаметными. Также ширины интервалов можно получить из численного дифференцирования распределения E_i как функций индекса.

Б. Гауссов базис

Вещественный гауссов базис

В качестве базиса для псевдосостояний удобно использовать неортогональный гауссов базис. Радиальные части базисных функций (редуцированные) имеют следующий вид:

$$\phi_{jl}(r) = A_{jl} r^{l+1} e^{-\beta_j r^2}, \quad A_{jl} = \left[\frac{2(2\beta_j)^{l+\frac{3}{2}}}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad j = 1, \dots, N_G, \quad (\text{Б.1})$$

где A_{jl} — нормировочный множитель и Γ — гамма-функция. Функции вида (Б.1) воспроизводят правильное поведение радиальной части решения уравнения Шредингера (1.1) для орбитального момента l при $r \rightarrow 0$. Набор состояний (Б.1) представляет собой неортогональный неминимальный базис, если набор параметров β_j выбран соответствующим образом. Ранее было показано [106], что для вариационных расчетов такой базис может быть построен с параметрами, удовлетворяющими обобщенному распределению Чебышева (такому же, как в уравнении (А.2)):

$$\beta_j = \beta_0 \left[\tan \left(\frac{2i-1}{2N_G} \frac{\pi}{2} \right) \right]^t, \quad (\text{Б.2})$$

где β_0 — общий масштабный параметр и t определяет разреженность узлов сетки.

Также для расчетов может использоваться распределение для параметров β_j , построенное на основе геометрической прогрессии [104]:

$$\beta_n = \beta_1 \left(\frac{\beta_N}{\beta_1} \right)^{\frac{n-1}{N_G-1}}, \quad n = 2, \dots, N_G. \quad (\text{Б.2a})$$

Диагонализационная процедура для матрицы гамильтониана $\mathbf{h}_{ij}^l$ (невозмущенного или полного) сводится к обобщенной задаче на собственные значения, поскольку матрица перекрытия базисных функций $\mathbf{I}_{ij}^l \equiv \langle \phi_{il} | \phi_{jl} \rangle$ не является единичной:

$$\det |\mathbf{h}_{ij}^l - E \mathbf{I}_{ij}^l| = 0. \quad (\text{Б.3})$$

В результате диагонализации получается набор собственных значений E_j^0 и E_j для матриц невозмущенного и полного гамильтонианов соответственно.

Комплексный гауссов базис

При использовании неортогонального гауссова базиса возникают проблемы, связанные с тем, что функции $\phi_{jl}(r)$ становятся численно линейно зависимыми при увеличении размерности базиса (для заданной размерности мантиссы чисел с плавающей запятой). В результате в практических расчетах приходится ограничивать эту размерность несколькими десятками функций.

Для того, чтобы обойти эту проблему, в [104] был предложен модифицированный набор функций следующего вида:

$$\psi_{nl}(r) = r^{l+1} e^{-\beta_n r^2} \cos \gamma_n r^2, \quad n = 1, \dots, N. \quad (\text{Б.4})$$

Здесь γ_n — дополнительные масштабные параметры. Легко видеть, что функции (Б.4) определяются через гауссианы с комплексными параметрами:

$$\psi_{nl}(r) = r^{l+1} \frac{1}{2} \{ e^{-(\beta_n + i\gamma_n)r^2} + e^{-(\beta_n - i\gamma_n)r^2} \}. \quad (\text{Б.5})$$

Поэтому базис (Б.4) называют комплексным гауссовым базисом. Он является очень гибким, так как в каждой базисной функции можно легко регулировать соотношение между скоростью спада и частотой осцилляций при $r \rightarrow \infty$ путем выбора подходящих значений β_n и γ_n . Причем число членов N ряда с различными β_n и γ_n может быть заметно увеличено, по сравнению с вещественным базисом, построенным на том же распределении для параметров β_n [94]. Более того, благодаря своему осциллирующему поведению, функции комплексного гауссова базиса хорошо подходят для описания спектров сильно возбужденных состояний квантовых систем и состояний рассеяния (см. детали в [94]).

В. Вычисление элементов матрицы оператора перестановки

Для удобства читателя, здесь приводятся явные формулы для оператора перестановки из работы [92]. Ядро оператора перестановки в импульсном представлении имеет следующий вид [5]:

$$\langle pq\gamma | P | p'q'\gamma' \rangle = \int_{-1}^1 dx \frac{\delta(p' - \pi_1) \delta(p - \pi_2)}{(p')^{l'+2} p^{l+2}} G_{\gamma\gamma'}(q, q', x), \quad (\text{В.1})$$

где мульти-индексы γ и γ' включают возможные спин-угловые квантовые числа для трехчастичных состояний (как они определены в главе 5, т.е. $\gamma = l, s, j, \lambda, I, J, \pi, t, T$) и

введены следующие обозначения:

$$\pi_1 = \sqrt{q^2 + \frac{1}{4}(q')^2 + qq'x}, \quad \pi_2 = \sqrt{\frac{1}{4}q^2 + (q')^2 + qq'x}. \quad (\text{B.2})$$

Спин-угловые коэффициенты G определяются по формуле

$$G_{\gamma\gamma'}(q, q', x) = \sum_{l_1, l'_1, k} q^{l_2+l'_2} (q')^{l_1+l'_1} P_k(x) g_{\gamma\gamma'}^{l_1 l'_1 k}, \quad \begin{aligned} l_1 + l_2 &= l, \\ l'_1 + l'_2 &= l', \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

где l и l' — орбитальные моменты для двухчастичной подсистемы и индексы l_1, l_2, k, l'_1, l'_2 возникают из промежуточных треугольных сумм. В уравнении (B.3) пределы суммирования определяются согласно правилам треугольников для парциальных коэффициентов $g_{\gamma\gamma'}^{l_1 l'_1 k}$, явный вид которых приводится в работе [5]:

$$\begin{aligned} g_{\gamma\gamma'}^{l_1 l'_1 k} = & -\sqrt{\hat{l}\hat{s}\hat{j}\hat{t}\hat{\lambda}\hat{I}\hat{l}'\hat{s}'\hat{j}'\hat{t}'\hat{\lambda}'\hat{I}'} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & t' \\ \frac{1}{2} & T & t \end{Bmatrix} \sum_{LS} (\hat{L}\hat{S}) \times \\ & \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s' \\ \frac{1}{2} & S & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & s & j \\ \lambda & \frac{1}{2} & I \\ L & S & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l' & s' & j' \\ \lambda' & \frac{1}{2} & I' \\ L & S & J \end{Bmatrix} \times \\ & \hat{k} \left(\frac{1}{2}\right)^{l'_2+l_1} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{(2l_1)!(2l_2)!}} \sqrt{\frac{(2l'+1)!}{(2l'_1)!(2l'_2)!}} \times \\ & \sum_{ff'} \begin{Bmatrix} l'_1 & l'_2 & l' \\ \lambda' & L & f' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_2 & l_1 & l \\ \lambda & L & f \end{Bmatrix} \langle l'_2 0 \lambda' 0 | f' 0 \rangle \langle l_1 \lambda 0 | f 0 \rangle \times \\ & \begin{Bmatrix} f' & l'_1 & L \\ f & l_2 & k \end{Bmatrix} \langle k 0 l'_1 0 | f 0 \rangle \langle k 0 l_2 0 | f' 0 \rangle, \end{aligned}$$

где суммирование ведется по всем возможным промежуточным индексам.

Для того, чтобы перейти к матричным элементам в решеточном базисе, нужно воспользоваться соотношением для нередуцированных пакетных функций в импульсном представлении:

$$\langle p, q | x_i \bar{x}_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} \frac{\theta(p \in \mathfrak{D}_i) \theta(q \in \bar{\mathfrak{D}}_j)}{pq}. \quad (\text{B.4})$$

Здесь θ — это аналог функции Хевисайда: $\theta(p \in \mathfrak{D}_i) = 1$ если p принадлежит интервалу $\mathfrak{D}_i$ и $\theta(p \in \mathfrak{D}_i) = 0$ в противном случае.

Таким образом, для вычисления элементов матрицы перестановок в решеточном

базисе (5.13), нужно проинтегрировать ядро (B.1) по интервалам $\mathfrak{D}_{ij}$ и $\mathfrak{D}_{i'j'}$:

$$[\mathbb{P}_0]_{ij,i'j'}^{\gamma\gamma'} = \sum_{kl_1l'_1} \frac{g_{\gamma\gamma'}^{kl_1l'_1}}{\sqrt{d_i \bar{d}_j d_{i'} \bar{d}_{j'}}} \int_{\mathfrak{D}_{ij}} dp dq \int_{\mathfrak{D}_{i'j'}} dp' dq' \int_{-1}^1 dx \frac{q^{l_2+l'_2+1} (q')^{l_1+l'_1+1}}{(p')^{l'+1} p^{l+1}} \delta(p' - \pi_1) \delta(p - \pi_2) P_k(x). \quad (\text{B.5})$$

Два интегрирования по p и p' снимаются за счет дельта-функций Дирака:

$$[\mathbb{P}_0]_{ij,i'j'}^{\gamma\gamma'} = \sum_{kl_1l'_1} \frac{g_{\gamma\gamma'}^{kl_1l'_1}}{\sqrt{d_i \bar{d}_j d_{i'} \bar{d}_{j'}}} \int_{\mathfrak{D}_j} dq \int_{\mathfrak{D}_{j'}} dq' \int_{-1}^1 dx \frac{q^{l_2+l'_2+1} (q')^{l_1+l'_1+1}}{(\pi_1)^{l'+1} (\pi_2)^{l+1}} P_k(x) \theta(\pi_1 \in \mathfrak{D}_{i'}) \theta(\pi_2 \in \mathfrak{D}_i).$$

Оставшиеся интегралы удобно вычислить в полярных координатах:

$$q = Q \cos \phi, \quad q' = Q \sin \phi.$$

Тогда матричные элементы (B.5) принимают следующий вид:

$$[\mathbb{P}_0]_{ij,i'j'}^{\gamma\gamma'} = \sum_{kl_1l'_1} \frac{g_{\gamma\gamma'}^{kl_1l'_1}}{\sqrt{d_i \bar{d}_j d_{i'} \bar{d}_{j'}}} I,$$

где

$$I = \int_{-1}^1 dx P_k(x) \int_{\phi_1}^{\phi_2} d\phi \frac{(\cos \phi)^{l_2+l'_2+1} (\sin \phi)^{l_1+l'_1+1}}{(\zeta_1)^{l'+1} (\zeta_2)^{l+1}} \int_{Q_1(\phi)}^{Q_2(\phi)} Q dQ \theta \left(Q \in \frac{\mathfrak{D}_{i'}}{\zeta_1} \right) \theta \left(Q \in \frac{\mathfrak{D}_i}{\zeta_2} \right),$$

и используются следующие обозначения:

$$\zeta_1 = \sqrt{\cos^2 \phi + \frac{1}{4} \sin^2 \phi + x \cos \phi \sin \phi}, \quad \zeta_2 = \sqrt{\frac{1}{4} \cos^2 \phi + \sin^2 \phi + x \cos \phi \sin \phi}. \quad (\text{B.6})$$

Границы области интегрирования в плоскости (Q, ϕ) определяются преобразованием прямоугольника в плоскости (q, q') , поэтому:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \arctan \left(\frac{q_{j'-1}}{q_j} \right), \quad Q_1(\phi) = \max \left(\frac{q_{j-1}}{\cos \phi}, \frac{q_{j'-1}}{\sin \phi} \right), \\ \phi_2 &= \arctan \left(\frac{q_{j'}}{q_{j-1}} \right), \quad Q_2(\phi) = \min \left(\frac{q_j}{\cos \phi}, \frac{q_{j'}}{\sin \phi} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

После аналитического вычисления интеграла по Q получается следующее выражение для интеграла I :

$$I = \int_{-1}^1 dx P_k(x) \int_{\phi_1}^{\phi_2} d\phi F_{ij,i'j'}(\phi, x) \frac{(\cos \phi)^{l_2+l'_2+1} (\sin \phi)^{l_1+l'_1+1}}{(\zeta_1)^{l'+1} (\zeta_2)^{l+1}},$$

где введена следующая функция:

$$F_{ij,i'j'}(\phi, x) = \frac{1}{2} \left[\min \left(\frac{q_j}{\cos \phi}, \frac{q_{j'}}{\sin \phi}, \frac{p_{i'}}{\zeta_1}, \frac{p_i}{\zeta_2} \right) \right]^2 - \frac{1}{2} \left[\max \left(\frac{q_{j-1}}{\cos \phi}, \frac{q_{j'-1}}{\sin \phi}, \frac{p_{i'-1}}{\zeta_1}, \frac{p_{i-1}}{\zeta_2} \right) \right]^2, \quad (\text{B.8})$$

которая считается отличной от нуля там, где ее значение положительно.

Окончательно получается следующее выражение для матричного элемента оператора перестановки:

$$[\mathbb{P}_0]_{ij,i'j'}^{\gamma\gamma'} = \sum_{kl_1l'_1} \frac{g_{\gamma\gamma'}^{kl_1l'_1}}{\sqrt{d_i d_j d_{i'} d_{j'}}} \int_{-1}^1 dx P_k(x) \int_{\phi_1}^{\phi_2} d\phi F_{ij,i'j'}(\phi, x) \frac{(\cos \phi)^{l_2+l'_2+1} (\sin \phi)^{l_1+l'_1+1}}{(\zeta_1)^{l'+1} (\zeta_2)^{l+1}}. \quad (\text{B.9})$$

Интегралы считаются численно.