

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. И. Кукулин, О. А. Рубцова, Конечномерные аппроксимации операторов теории рассеяния в представлении волновых пакетов, *ТМФ*, 2004, том 139, номер 2, 291–306

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf53>

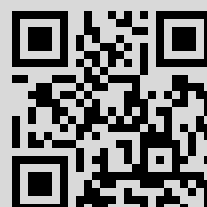
Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 85.141.69.149

28 февраля 2020 г., 15:31:28



КОНЕЧНОМЕРНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ ОПЕРАТОРОВ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

Рассмотрено несколько типов пакетной дискретизации непрерывного спектра в квантовых задачах теории рассеяния. Подобная дискретизация ведет, как показано авторами ранее, к удобной конечномерной (т.е. матричной) аппроксимации интегральных операторов в теории рассеяния и позволяет свести решение сингулярных интегральных уравнений, отвечающих задаче рассеяния, к удобным чисто алгебраическим уравнениям на аналитическом базисе. При этом все сингулярности выделяются в явном виде. Основное внимание уделяется вопросам практической реализации метода.

Ключевые слова: теория рассеяния, волновой оператор, волновые пакеты, функция Грина, дискретизация континуума.

1. ВВЕДЕНИЕ

Как хорошо известно, квантовая теория рассеяния [1], [2] может быть наиболее последовательно сформулирована на языке интегральных операторов в гильбертовом (или более общем) пространстве. Основное преимущество такого интегрального подхода заключается в том, что граничные условия уже включены в ядра уравнений, что позволяет сделать естественный переход к случаю рассеяния трех и большего числа частиц. Поэтому язык интегральных операторов в теории рассеяния не только часто используется для формулировки новых подходов, но также очень активно применяется при решении практических задач. Для этих целей интегральные операторы, как правило, заменяют с помощью подходящих квадратурных методов конечномерными аппроксимациями и затем численно решают получившиеся матричные уравнения. Однако на этом пути возникают практические трудности (особенно в многочастичных и многомерных задачах), обусловленные рядом причин.

Во-первых, ядра соответствующих операторов содержат сингулярности, от простых полюсных – в одночастичных задачах, до сложных логарифмических с движущимися

* Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына, Московский государственный университет, Москва, Россия. E-mail: kukulin@nucl-th.sinp.msu.ru

точками ветвления – в задачах рассеяния трех и большего числа тел. Эти сложные особенности должны как-то учитываться в используемых квадратурных методах. Иначе сходимость соответствующих аппроксимаций к точному решению будет плохой (или вообще будет отсутствовать).

Во-вторых, перевязки между разными наборами координат частиц, неизбежные в многочастичном случае, приводят к появлению в ядрах интегральных операторов громоздких численных матриц преобразования, что заметно усложняет решение соответствующих матричных уравнений [3], [4]. В итоге практическое решение задачи рассеяния даже в системе трех частиц (например для трех нуклонов) приводит к исключительно сложной вычислительной схеме, требующей применения мощных суперкомпьютеров [5].

Поэтому крайне желательна формулировка альтернативных методов решения многочастичных задач рассеяния, например, с помощью построения особых конечномерных аппроксимаций интегральных операторов, не основанных на обычных численных квадратурах.

Один из таких общих подходов был предложен авторами в работах [6]–[8]. Этот подход основан на формулировке теории рассеяния в терминах чисто дискретных ортонормированных базисов, построенных из стационарных волновых пакетов, принадлежащих пространству L_2 . Тем самым теория рассеяния формулируется в гильбертовом пространстве через конечномерные (т.е. матричные) аналоги интегральных операторов. При этом удалось найти исключительно удобное аналитическое представление для волновых пакетов через суперпозицию хорошо известных в физике собственных функций гармонического осциллятора или суперпозицию гауссовых экспонент. В итоге основные операторы теории рассеяния представляются в виде разложений по простому аналитическому базису с зависящими от энергии коэффициентами [6], [7], которые могут быть найдены из решения простых матричных уравнений как в случае двух частиц, так и в многочастичном случае. Очень важно, что сложная аналитическая зависимость от энергетической переменной оказывается включенной в эти коэффициенты через довольно простые логарифмические члены. Это существенно упрощает решение соответствующих уравнений.

В работах [6], [7] мы ввели несколько типов таких пакетных базисов: базис свободных волновых пакетов (отвечающих плоским волнам), базис возмущенных волновых пакетов (отвечающих точным функциям рассеяния на некотором потенциале), а также несколько типов разложений для ядер операторов. Эти разные типы разложений имеют разные условия применимости, а также разную точность. Поэтому в данной работе, имеющей практическую направленность, мы решили сравнить между собой различные типы разложений и пакетных базисов.

2. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

Поскольку представление волновых пакетов для задачи рассеяния нескольких частиц строится путем прямого умножения (конволюции) соответствующих пакетов по отдель-

ным (независимым) координатам Якоби [9], различные типы пакетных представлений удобнее всего исследовать на примере базовой одночастичной задачи [6], [7].

Рассмотрим задачу рассеяния с гамильтонианом

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

где H_0 – оператор кинетической энергии, V – оператор взаимодействия, форма которого не важна для данного рассмотрения. Далее везде мы предполагаем, что значение орбитального момента определено и равно l .

В основе метода пакетной дискретизации лежит разбиение непрерывного спектра гамильтонианов H_0 и H на узкие энергетические полосы (“бины”):

$$0 = \mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_1 < \dots < \mathcal{E}_i < \dots < \mathcal{E}_N, \quad \Delta_i = \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_{i-1}, \quad \mathcal{E}_i^* = \frac{1}{2}(\mathcal{E}_i + \mathcal{E}_{i-1}). \quad (2)$$

Здесь весь непрерывный спектр ограничивается максимальным значением энергии $\mathcal{E}_N$, при этом считается, что $\mathcal{E}_N \rightarrow \infty$ при $N \rightarrow \infty$. В каждой такой полосе строятся стационарные волновые пакеты либо из функций свободного движения $\Psi_0(E)$, либо из точных функций рассеяния $\Psi(E)$ (предполагается, что и те, и другие нормированы на δ -функцию по энергии),

$$X_i(r) = \frac{1}{\sqrt{\Delta_i}} \int_{\mathcal{E}_{i-1}}^{\mathcal{E}_i} \Psi_0(E; r) dE - \text{свободные волновые пакеты (СВП)}, \quad (3)$$

$$Y_i(r) = \frac{1}{\sqrt{\Delta_i}} \int_{\mathcal{E}_{i-1}}^{\mathcal{E}_i} \Psi(E; r) dE - \text{возмущенные волновые пакеты (ВВП)}. \quad (4)$$

Как легко показать, состояния $\{|X_i\rangle\}_{i=1}^N$ и $\{|Y_i\rangle\}_{i=1}^N$ образуют ортонормированные наборы, поэтому проекционные операторы на подпространства волновых пакетов имеют вид

$$P_F = \sum_{j=1}^N |X_j\rangle\langle X_j|, \quad P_I = \sum_{j=1}^N |Y_j\rangle\langle Y_j|. \quad (5)$$

Одно из первых упоминаний о стационарных волновых пакетах можно найти в монографии Вигнера [10], где для этих L_2 -векторов используется название “собственные дифференциалы” (или eigendifferentials). Пакетное представление первоначально было использовано для формулировки задачи рассеяния в терминах векторов гильбертова пространства. Наша цель состоит скорее в том, чтобы использовать пакетное представление как удобный и эффективный метод дискретизации континуума, особенно в задачах нескольких тел.

Главное свойство пакетных состояний заключается в том, что их функции являются собственными для соответствующих спроектированных гамильтонианов, так что имеет место спектральное разложение

$$P_F H_0 P_F = \sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i^* |X_i\rangle\langle X_i|, \quad P_I H P_I = \sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i^* |Y_i\rangle\langle Y_i|. \quad (6)$$

Свойство (6) позволяет провести полную аналогию между “пакетными” состояниями в континууме и состояниями, полученными при диагонализации матрицы гамильтониана в некотором базисе конечной размерности (последние часто используются для численного решения задач). Таким образом, легко найти хорошо сходящиеся разложения СВП и ВВП через какой-либо удобный L_2 -базис (например базис собственных функций гармонического осциллятора или другого подходящего самосопряженного гамильтониана). В итоге удастся построить удобные конечномерные аппроксимации основных операторов теории рассеяния в выбранном L_2 -базисе [6]–[8].

Если разложить в определении (4) функцию $|\Psi(E)\rangle$ в ряд Тейлора по энергии в окрестности $E = \mathcal{E}_i^*$, а затем проинтегрировать по полосе, получим следующее разложение ВВП через производные по энергии от точной волновой функции рассеяния:

$$\frac{|Y_i\rangle}{\sqrt{\Delta_i}} = |\Psi(E)\rangle + \frac{\partial|\Psi(E)\rangle}{\partial E}(\mathcal{E}_i^* - E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2|\Psi(E)\rangle}{\partial E^2} \left\{ (E - \mathcal{E}_i^*)^2 + \frac{1}{12}(\Delta_i)^2 \right\} + \dots \quad (7)$$

Когда E принадлежит i -му интервалу, т.е. $|E - \mathcal{E}_i^*| \leq \Delta_i/2$, можно рассматривать (7) как некоторый ряд по параметру Δ_i . Заметим, что формально выражение (7) представляет собой бесконечный ряд по степеням ширины энергетического интервала Δ_i . Однако в работе [6] было показано, что в координатном представлении реально возникает ряд по безразмерному параметру $r\delta k_i$, где

$$\delta k_i = \sqrt{\frac{m}{2\mathcal{E}_i^* \hbar^2}} \Delta_i,$$

m – приведенная масса частиц в данном канале. Поэтому везде, где мы говорим о малости ширины Δ_i , подразумевается, что малы безразмерные величины $r\delta k_i$, т.е. получаемые выражения верны в ограниченной области пространства $r \ll R = \delta k_i^{-1}$. В этой области можно считать, что собственные дифференциалы $Y_i(r)$ отличаются от точных волновых функций рассеяния только нормировочным множителем, причем точность такой аппроксимации имеет порядок малости Δ_i ,

$$\frac{Y_i(r)}{\sqrt{\Delta_i}} \approx \Psi(E; r) + O(\Delta_i). \quad (8)$$

Разложение, аналогичное (7), будет верно и для СВП $|X_i\rangle$.

3. ПОСТРОЕНИЕ КОНЕЧНОМЕРНОЙ АППРОКСИМАЦИИ ОПЕРАТОРА ГРИНА

Для удобства читателя мы помещаем в этом разделе результаты, полученные нами ранее [6]. Однако здесь мы предлагаем более универсальный способ их вывода.

Мнимая часть оператора Грина в случае простого одноканального рассеяния имеет вид

$$\text{Im } G_l^{(+)}(E) = -i\pi |\Psi(E)\rangle \langle \Psi(E)|. \quad (9)$$

Далее мы будем опускать в обозначении оператора G индексы l и $(+)$, считая, что речь идет о парциальной резольвенте, отвечающей граничному условию на бесконечности в виде расходящихся волн.

Действительную часть оператора Грина можно связать с мнимой посредством дисперсионных соотношений¹⁾

$$\operatorname{Re} G(E) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int dE' \frac{\operatorname{Im} G(E')}{E - E'}. \quad (10)$$

Таким образом можно построить конечномерную аппроксимацию оператора $\operatorname{Im} G(E)$ на основе пакетного представления, а затем получить “согласованное” конечномерное представление для действительной части, используя соотношения (10).

Итак, будем далее считать, что E принадлежит некоторому интервалу $(\mathcal{E}_{j-1}, \mathcal{E}_j)$, и называть этот интервал сингулярным. Используя (7), легко вывести разложение для оператора $|Y_j\rangle\langle Y_j|$, которое можно переписать в следующем виде:

$$|\Psi(E)\rangle\langle\Psi(E)| = \frac{|Y_j\rangle\langle Y_j|}{\Delta_j} - \frac{\partial[|\Psi(E)\rangle\langle\Psi(E)|]}{\partial E}(\mathcal{E}_j^* - E) + O(\Delta_j^2). \quad (11)$$

Согласно (11) можно записать следующую “гистограммную”, т.е. конечномерную аппроксимацию для мнимой части оператора Грина (с точностью до величины порядка $O(\Delta_j)$):

$$\operatorname{Im} G^{(1)}(E) = \frac{-i\pi|Y_j\rangle\langle Y_j|}{\Delta_j}, \quad E \in (\mathcal{E}_{j-1}, \mathcal{E}_j). \quad (12)$$

Подставляя выражение (12) в дисперсионное соотношение (10), получаем следующую конечномерную аппроксимацию для действительной части оператора Грина:

$$\operatorname{Re} G^{(1)}(E) \approx \sum_{i=1}^N \frac{|Y_i\rangle\langle Y_i|}{\Delta_i} \ln \left| \frac{\mathcal{E}_{i-1} - E}{\mathcal{E}_i - E} \right|. \quad (13)$$

Легко видеть, что (12) и (13) отвечают проекции полного оператора Грина на подпространство волновых пакетов, т.е. $G^{(1)}(E) = P_I G_l^{(+)}(E) P_I$. Такая аппроксимация в работе [7] была дополнительно упрощена заменой непрерывного энергетического спектра гамильтониана дискретным набором точек $\{\mathcal{E}_i^*\}_{i=1}^N$ (средних точек бинов). Расчеты наблюдаемых величин (фаз рассеяния) в этих дискретных точках, основанные на представлении (13), привели к достаточно точным значениям. Для дальнейшего уточнения этих результатов нужно учесть более высокие порядки разложения (11).

¹⁾ Для простоты будем считать, что связанные состояния в системе отсутствуют.

В работе [6] было показано, что конечномерный оператор $\widehat{D}_i$, определяемый следующим образом:

$$\widehat{D}_i = \begin{cases} \frac{|Y_i\rangle\langle Y_i|}{\Delta_i} - \frac{|Y_{i-1}\rangle\langle Y_{i-1}|}{\Delta_{i-1}}, & i = N, \\ \frac{1}{2} \left\{ \frac{|Y_{i+1}\rangle\langle Y_{i+1}|}{\Delta_{i+1}} - \frac{|Y_{i-1}\rangle\langle Y_{i-1}|}{\Delta_{i-1}} \right\}, & i = 2, \dots, N-1, \\ \frac{|Y_{i+1}\rangle\langle Y_{i+1}|}{\Delta_{i+1}} - \frac{|Y_i\rangle\langle Y_i|}{\Delta_i}, & i = 1, \end{cases} \quad (14)$$

является аппроксимацией билинейной формы

$$\left[\frac{\partial |\Psi(E)\rangle\langle\Psi(E)|}{\partial E} \right]_{E=\mathcal{E}_i^*} \Delta_i \quad (15)$$

с точностью до малых второго порядка относительно ширины бинов. Таким образом, можно записать соотношение, аналогичное (11),

$$\begin{aligned} |\Psi(E)\rangle\langle\Psi(E)| &= \frac{|Y_j\rangle\langle Y_j|}{\Delta_j} + \widehat{D}_j(E - \mathcal{E}_j^*) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [|\Psi(E)\rangle\langle\Psi(E)|]}{\partial E^2} (E - \mathcal{E}_j^*)^2 - \\ &- \frac{1}{24} \left\{ \frac{\partial^2 |\Psi(E)\rangle}{\partial E^2} \langle\Psi(E)| + |\Psi(E)\rangle \frac{\partial^2 \langle\Psi(E)|}{\partial E^2} \right\} \Delta_j^2 + O((\Delta_j)^3). \end{aligned} \quad (16)$$

Заметим, что последнее выражение верно при том условии, что разбиение спектра локально мало отличается от эквидистантного, т.е. $|\Delta_{j+1} - \Delta_j| \ll \Delta_j$.

Итак, поправка к выражению (12), имеющая порядок малости $O(\Delta_j^2)$, имеет вид

$$\text{Im } G^{(2)}(E) = -i\pi \widehat{D}_j \frac{E - \mathcal{E}_j^*}{\Delta_j}. \quad (17)$$

Для действительной части оператора Грина на основе дисперсионного представления получаем следующую поправку второго порядка:

$$G^{(2)}(E) \approx - \sum_{i=1}^N \widehat{D}_i \left[1 - \frac{(E - \mathcal{E}_i^*)}{\Delta_i} \ln \left| \frac{\mathcal{E}_{i-1} - E}{\mathcal{E}_i - E} \right| \right]. \quad (18)$$

По-видимому, можно построить и поправки более высокого порядка, используя конечномерные аппроксимации для высших производных по энергии от точных функций рассеяния.

Запишем окончательно полученную конечномерную аппроксимацию оператора Грина в представлении волновых пакетов в следующем виде:

$$\widetilde{G}(E) = G^{(1)}(E) + G^{(2)}(E), \quad (19)$$

где $G^{(1)}(E) \sim O(\Delta_i)$, $G^{(2)}(E) \sim O(\Delta_i^2)$ как для действительной, так и для мнимой частей оператора Грина. Член $G^{(2)}(E)$ будем называть поправочным.

Более точная оценка величины поправочного члена. Как уже упоминалось выше, “гистограммная” аппроксимация $G^{(1)}(E)$ возникает при нахождении наблюдаемых в точках “дискретизованного” спектра $\mathcal{E}_i^*$, т.е. в средних точках бинов Δ_i . Оценим величину поправки $G^{(2)}$ при этих значениях энергии. Пусть $E = \mathcal{E}_j^*$. Запишем следующие разложения логарифмических функций:

$$\begin{aligned} \ln \left| \frac{\mathcal{E}_{i-1} - E}{\mathcal{E}_i - E} \right| &= \ln \left| \frac{\mathcal{E}_i^* - \frac{1}{2}\Delta_i - E}{\mathcal{E}_i^* + \frac{1}{2}\Delta_i - E} \right| = \\ &= \begin{cases} \frac{\Delta_i}{E - \mathcal{E}_i^*} \left\{ 1 + \frac{1}{12} \left(\frac{\frac{1}{2}\Delta_i}{E - \mathcal{E}_i^*} \right)^2 + O \left(\left[\frac{\Delta_i}{E - \mathcal{E}_i^*} \right]^4 \right) \right\}, & |E - \mathcal{E}_i^*| > \frac{1}{2}\Delta_i, \\ 4 \frac{E - \mathcal{E}_i^*}{\Delta_i} \left\{ 1 + \frac{1}{12} \left(\frac{E - \mathcal{E}_i^*}{\frac{1}{2}\Delta_i} \right)^2 + O \left(\left[\frac{E - \mathcal{E}_i^*}{\Delta_i} \right]^4 \right) \right\}, & |E - \mathcal{E}_i^*| < \frac{1}{2}\Delta_i. \end{cases} \end{aligned} \quad (20)$$

Из этих разложений легко получается и разложение для функции

$$1 - \frac{(E - \mathcal{E}_i^*)}{\Delta_i} \ln \left| \frac{\mathcal{E}_{i-1} - E}{\mathcal{E}_i - E} \right|.$$

В результате, учитывая в упомянутых выше разложениях только квадратичные порядки малости, можно записать

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \tilde{G}(E) &\approx \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \left\{ \frac{|Y_i\rangle\langle Y_i|}{\Delta_i} \frac{\Delta_i}{E - \mathcal{E}_i^*} - \hat{D}_i \left(\frac{\Delta_i}{E - \mathcal{E}_i^*} \right)^2 \right\} + \\ &+ 4 \frac{|Y_j\rangle\langle Y_j|}{\Delta_j} \frac{E - \mathcal{E}_i^*}{\Delta_i} - \hat{D}_j \left\{ 1 - 4 \left(\frac{E - \mathcal{E}_i^*}{\Delta_i} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Из этого приближенного равенства видно, что основной вклад в поправку второго порядка $G^{(2)}(E)$ дает слагаемое на сингулярном интервале (т.е. при $|E - \mathcal{E}_j^*| < \Delta_j/2$). Учитывая лишь основные слагаемые при $E = \mathcal{E}_j^*$, получаем простое выражение для конечномерной аппроксимации действительной части оператора Грина,

$$\operatorname{Re} \tilde{G}(E) \approx \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \frac{|Y_i\rangle\langle Y_i|}{E - \mathcal{E}_i^*} - \hat{D}_j, \quad (22)$$

где оператор $\hat{D}_j$ определяется согласно (14).

Итак, с учетом “основных порядков малости” видно, что поправка второго порядка $G^{(2)}$ существенна главным образом на сингулярном интервале ($\mathcal{E}_{j-1} < E < \mathcal{E}_j$) и что ее величина в средней точке равна $G^{(2)}(\mathcal{E}_j^*) = -\hat{D}_j$. Если далее использовать для этого оператора определение (14), представление (22) будет практически точно совпадать с аппроксимацией оператора Грина, полученной в работе [8] на основе качественных соображений.

Таким образом, мы нашли для операторной функции Грина в общем виде конечномерное представление, справедливое с точностью $O(\Delta_i^2)$. На основе этого представления общего вида можно элементарным образом построить весьма точные аналитические конечномерные аппроксимации для резольвенты путем простой диагонализации свободного или полного гамильтониана на подходящем L_2 -базисе.

4. КОНЕЧНОМЕРНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ T - И Ω -ОПЕРАТОРОВ

На основе полученных выше конечномерных представлений для оператора Грина легко построить дискретные аналоги других операторов теории рассеяния. В частности, для нахождения наблюдаемых величин удобно использовать T -оператор. В рамках метода пакетной дискретизации континуума конечномерный аналог этого оператора можно построить двумя способами на основе либо возмущенных, либо свободных волновых пакетов.

4.1. Представление возмущенных волновых пакетов. В качестве основного базиса системы будем использовать набор ВВП $\{|Y_i\rangle\}_{i=1}^N$. Тогда для нахождения T -оператора достаточно подставить одну из конечномерных аппроксимаций оператора Грина в известное тождество

$$T(E) = V + VG^{(+)}(E)V. \quad (23)$$

Далее элементы T -матрицы на массовой поверхности и вне ее находятся по определению

$$T_l(E_1, E_2; E) = \langle \Psi_0(E_1) | T(E) | \Psi_0(E_2) \rangle. \quad (24)$$

В качестве ВВП-состояний можно использовать собственные функции матрицы гамильтониана в некотором L_2 -базисе, если параметры разбиений будут совпадать (см. детали в работе [6]).

Описанный здесь метод нахождения наблюдаемых величин с использованием ВВП-представления кажется очень удобным. В самом деле, он позволяет решать множество типов задач рассеяния для эрмитовых гамильтонианов, например для сложных нелокальных операторов взаимодействия, путем простой диагонализации матрицы гамильтониана в подходящем L_2 -базисе (см. [6] и ниже). Однако в случае неэрмитовых операторов взаимодействия этот метод вряд ли применим. В последнем случае удобнее использовать аппроксимации свободной резольвенты в базисе свободных волновых пакетов.

4.2. Представление свободных волновых пакетов. В работе [7] было показано, что дискретные аналоги основных операторов теории рассеяния и дискретизованные функции рассеяния (т.е. стационарные волновые пакеты) можно построить также в базисе СВП $\{|X_i\rangle\}_{i=1}^N$. В таком подходе в качестве “краеугольного камня” используется конечномерная аппроксимация свободной резольвенты. Последняя подставляется в уравнение Липмана–Швингера для T -оператора

$$T(E) = V + VG_0^{(+)}(E)T(E). \quad (25)$$

В результате получается простое алгебраическое уравнение для матрицы дискретизованного оператора $P_I T P_I$, решением которого является матрица

$$T = \Omega V, \quad (26)$$

где $\Omega = (1 - VG_0(E))^{-1}$ представляет собой конечномерный аналог волнового оператора Меллера (подробно см. в [6]).

В работе [6] в качестве конечномерной аппроксимации для операторной функции Грина использовался спроектированный оператор свободной резольвенты $G_0^{(1)} = P_F G_0 P_F$ (при этом наблюдаемые величины в точности отвечают рассеянию на потенциале $P_F V P_F$). В дальнейшем можно улучшить аппроксимацию операторов рассеяния, если использовать представление для свободной резольвенты в виде

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0(E) = \sum_{i=1}^N & \left\{ \frac{|X_i\rangle\langle X_i|}{\Delta_i} \ln \left| \frac{\mathcal{E}_{i-1} - E}{\mathcal{E}_i - E} \right| - \hat{D}_{0i} \left[1 - \frac{(E - \mathcal{E}_i^*)}{\Delta_i} \ln \left| \frac{\mathcal{E}_{i-1} - E}{\mathcal{E}_i - E} \right| \right] \right\} - \\ & - i\pi \left\{ \frac{|X_j\rangle\langle X_j|}{\Delta_j} + \hat{D}_{0j} \frac{(E - \mathcal{E}_j^*)}{\Delta_j} \right\} \quad \text{при } E \in (\mathcal{E}_{j-1}, \mathcal{E}_j). \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь операторы для поправок $\hat{D}_{0i}$ определяются формулой (14), в которой состояния $|Y_i\rangle$ заменены на $|X_i\rangle$.

Удобством представления в базисе свободных волновых пакетов является его полная универсальность и применимость как для аппроксимации эрмитовых, так и для неэрмитовых или даже зависящих явно от энергии операторов взаимодействия. В последнем случае $V = V(E)$ и $\Omega = (1 - V(E)G_0(E))^{-1}$.

Однако платой за универсальность является большая трудоемкость численного решения задачи, которая в данном случае требует многократного обращения матрицы $(1 - VG_0(E))$ при всех требуемых энергиях. Здесь уместно напомнить, что построение T -матрицы через ВВП при всех энергиях требует всего лишь однократной диагонализации матрицы гамильтониана на выбранном L_2 -базисе.

Возможно использовать гибридный подход в тех случаях, когда основная часть оператора Гамильтона является эрмитовым оператором, а неэрмитова (или зависящая от энергии) часть может рассматриваться как возмущение H' . В этом случае для эрмитовой части строится представление ВВП (через диагонализацию эрмитовой части гамильтониана), а для неэрмитовой добавки H' можно построить ряд теории возмущений в пакетном представлении (т.е. также в простой матричной форме [6]). Такой гибридный подход должен быть очень удобным в многоканальных задачах рассеяния, в которых связь остальных каналов с упругим (или каким-то выделенным) каналом является достаточно слабой. При этом исключение неупругих каналов дает, как хорошо известно [11], явно зависящую от энергии нелокальную добавку $\delta V(E)$ к прямому взаимодействию в упругом канале V_{dir} . Именно такую структуру имеют все операторы так называемого поляризационного взаимодействия составных частиц, возникающего из-за учета виртуальных переходов взаимодействующих частиц в свои возбужденные состояния или в промежуточные возбужденные состояния системы как целого, в атомной, молекулярной и ядерной физике.

5. ПРИМЕРЫ

В этом разделе мы на ряде простых примеров продемонстрируем скорость сходимости обсужденных выше конечномерных аппроксимаций операторов резольвенты и T -матрицы, а также удобство развитой схемы.

5.1. Конкретные реализации СВП- и ВВП-базисов. Как было сказано выше, для решения задачи рассеяния на центральном потенциале можно использовать либо СВП-, либо ВВП-базисы, при этом в случае неэрмитовых потенциалов предпочтительнее использовать базис СВП. Для иллюстрации и сравнения точности разных представлений мы вычислили S -волновые фазовые сдвиги рассеяния на потенциале гауссова типа на основе этих двух подходов. Волновые пакеты строились путем диагонализации матриц свободного и полного гамильтонианов в одном и том же L_2 -базисе. В качестве такого базиса был выбран ортогональный базис волновых функций гармонического осциллятора. Свойства базиса зависят от радиального параметра $r_\omega = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$, который подбирается так, чтобы сходимость к точному решению была наилучшей (в случае низкоэнергетического рассеяния значение r_ω легко находится из принципа Ритца, т.е. из условия минимума энергии связанных состояний). На рис. 1 приведены зависимости от энергии фазовых сдвигов, полученных в ВВП-базисе (т.е. при использовании лишь однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана) для разного числа базисных функций N . Расчеты проводились в средних точках энергетических интервалов. Обозначения G1 и G2 на рисунке отвечают расчетам на основе гистограммной аппроксимации оператора Грина и по формуле с учетом поправок второго порядка, соответственно, V_0 – глубина потенциальной ямы.

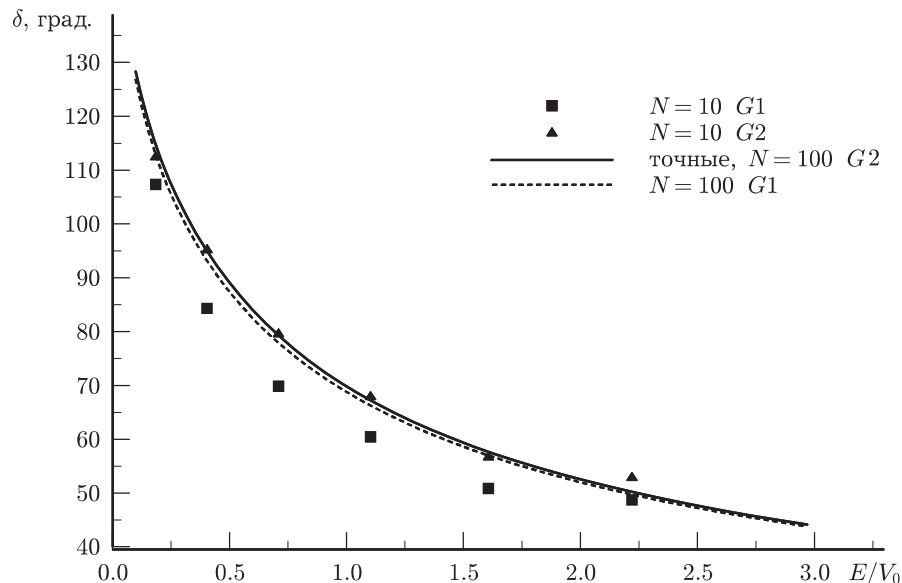


Рис. 1

Расчеты тех же фазовых сдвигов в СВП-базисе в средних точках энергетических интервалов привели к практически таким же результатам (поэтому мы не приводим для них отдельного рисунка). Сравнительный анализ точности нахождения фаз рассеяния в СВП- и ВВП-подходах приведен на рис. 2. При этом в качестве “точных” значений использовались фазовые сдвиги, полученные путем прямого численного интегрирования уравнения Шредингера. На рис. 2а приведены относительные погрешности фаз рассеяния α , полученных с использованием гистограммной аппроксимации как в ВВП-, так и СВП-подходах для разного числа базисных функций. На рис. 2б приведены относительные погрешности фаз, найденных с использованием поправочного члена второго порядка. Как хорошо видно из приведенных рисунков, точность расчетов в СВП- и ВВП-подходах практически совпадает (метод СВП дает несколько лучшие результаты). Важно отметить, что учет поправочных членов позволяет улучшить точность вычислений фазовых сдвигов на порядок величины.

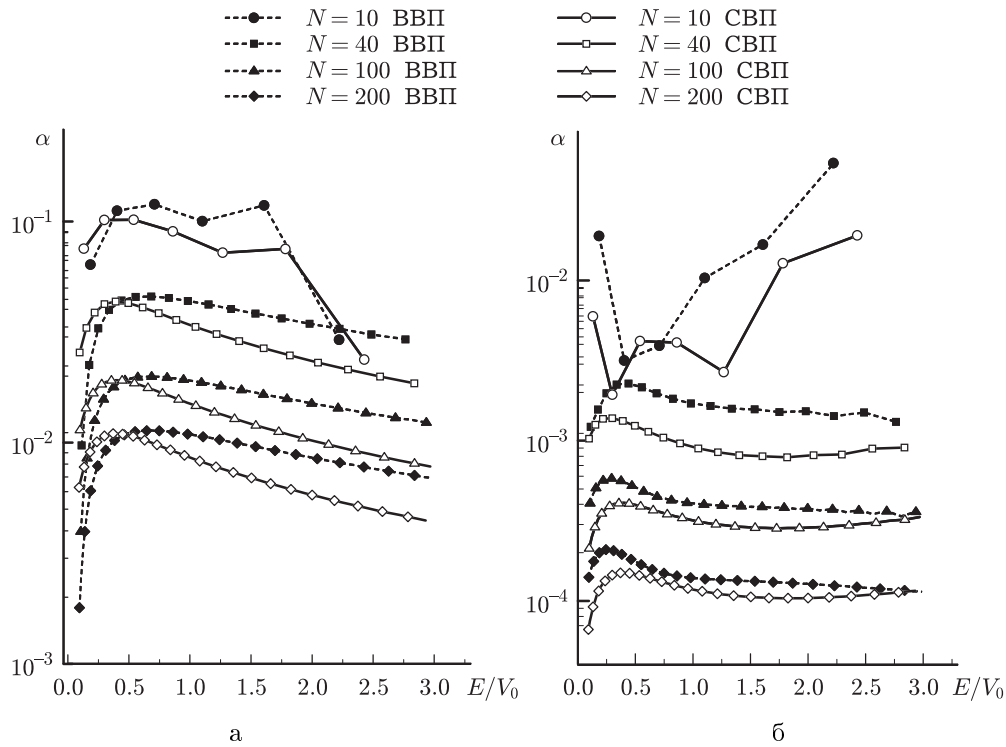


Рис. 2

Следует подчеркнуть, что построенная в СВП-представлении T -матрица удовлетворяет точному условию унитарности (при расчетах в средних точках бинов), в то время как T -матрица, найденная в ВВП-представлении, этому условию не удовлетворяет.

Подводя итог, следует отметить, что расчеты даже с простой гистограммной аппрок-

симацией приводят к ошибкам порядка нескольких процентов при весьма скромной размерности базиса $N = 20$. А при размерности базиса $N \simeq 50 - 60$ ошибка в фазовом сдвиге составляет уже 0.1%. Это весьма важно для обобщения метода пакетной дискретизации на задачу рассеяния нескольких тел, где проективный метод позволяет значительно упростить решение [9]. Более того, исключение вклада закрытых каналов, как показано ниже, позволяет дополнительно уменьшить размерность базиса в 2–3 раза!

Энергетическое поведение конечномерной аппроксимации для резольвенты. Легко видеть, что построенный конечномерный оператор Грина $\tilde{G}(E)$ не является непрерывной по энергии функцией. В граничных точках интервалов ее действительная часть имеет логарифмические разрывы, а мнимая – скачки. Однако при вычислениях для некоторой фиксированной энергии эти трудности легко обойти путем увеличения числа базисных функций (при этом положения “особых” точек сдвигаются). Для иллюстрации мы разделили весь энергетический спектр в интервале $(0.1-3.0)V_0$ на 100 субинтервалов равной ширины и вычислили фазовые сдвиги в каждой “граничной” точке. Результаты вычислений в ВВП-базисе по формуле с поправкой второго порядка представлены на рис. 3. Как хорошо видно, при выбранном шаге вычислений достаточно использовать базис всего из 40 функций для получения весьма “гладкой” кривой фазовых сдвигов, практически совпадающей с кривой точных значений.

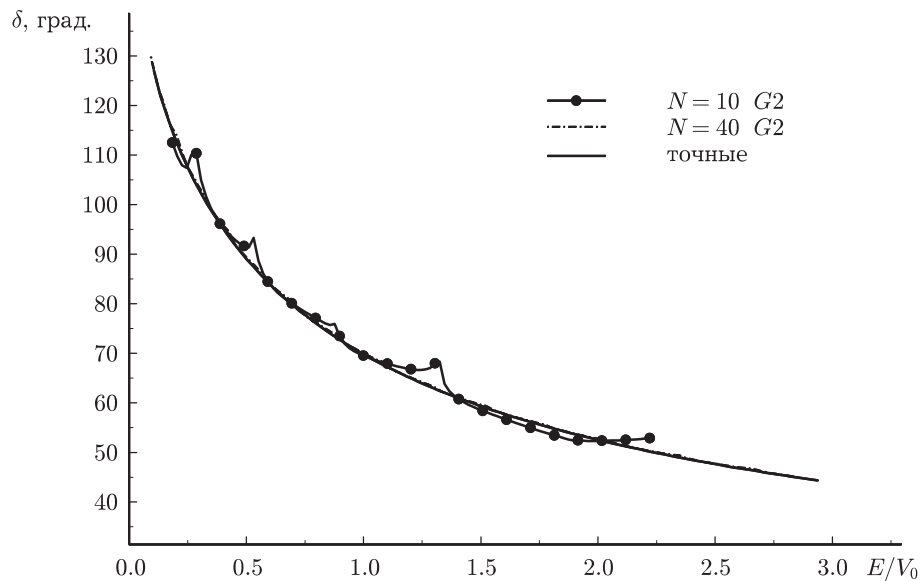


Рис. 3

5.2. Исследование сходимости при фиксированной энергии. Влияние закрытых каналов. Построенные конечномерные аппроксимации для действительных частей полной $\tilde{G}(E)$ или свободной $\tilde{G}_0(E)$ резольвент представляют собой спектральные разложения по “полному спектру” ВВП- или СВП-состояний, соответственно.

При этом сумма по тем энергетическим интервалам, которые лежат выше сингулярного (т.е. того интервала, которому принадлежит выбранное значение энергии, будем считать его j -м), представляет собой сумму по закрытым каналам. Вполне естественно допустить, что вклад от каждого бина, представляющего закрытый канал, будет заметно уменьшаться с удалением от сингулярного интервала. Таким образом, при выбранном значении энергии можно будет учесть лишь вклад нескольких таких закрытых каналов, непосредственно примыкающих к порогу, т.е. заменить полную спектральную сумму для резольвенты, состоящую из N слагаемых, суммой из M слагаемых, где $j < M \leq N$.

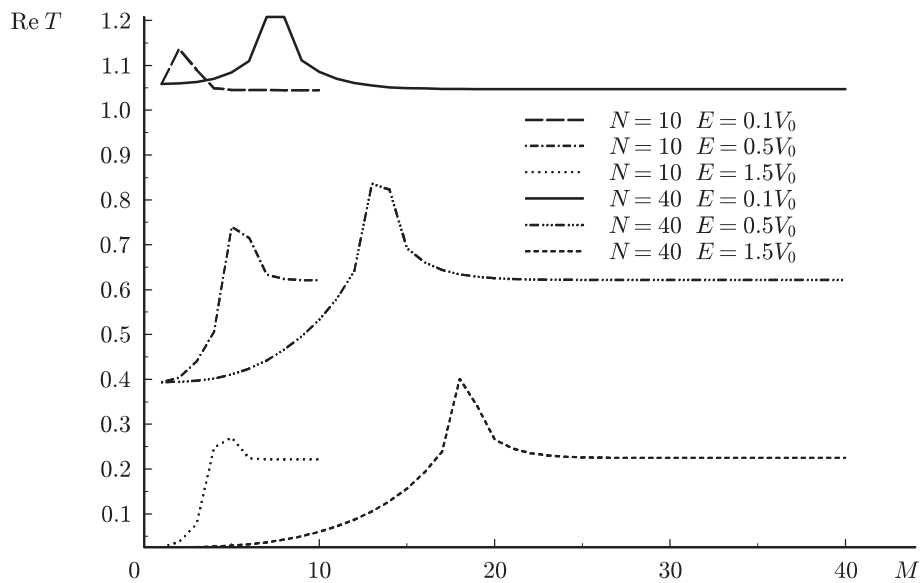


Рис. 4

Для проверки этих предположений мы провели детальные расчеты элементов T -матрицы на массовой поверхности и связанных с ними фазовых сдвигов при трех значениях энергии: $E_1 = 0.1V_0$, $E_2 = 0.5V_0$ и $E_3 = 1.5V_0$ (где V_0 – параметр глубины тестового потенциала). Наиболее наглядно картина сходимости относительно вклада закрытых каналов видна при расчетах в ВВП-представлении, поскольку T -матрица в этом случае представляется в виде простой спектральной суммы. На рис. 4 представлены зависимости действительной части элементов T -матрицы на массовой поверхности, найденных в ВВП-представлении, от числа M учитываемых бинов для трех разных значений энергии (малого, промежуточного и достаточно высокого) и двух размерностей базисов $N=10$ и 40 . Как хорошо видно, графики выходят на “плато” достаточно быстро с увеличением M .

Мы также провели исследование величины вклада закрытых каналов в СВП-представлении. На рис. 5 приведены кривые “сходимости” фазовых сдвигов по числу учитываемых каналов M для значений энергии $E = 0.1V_0$ и $E = 0.5V_0$ в ВВП- и СВП-

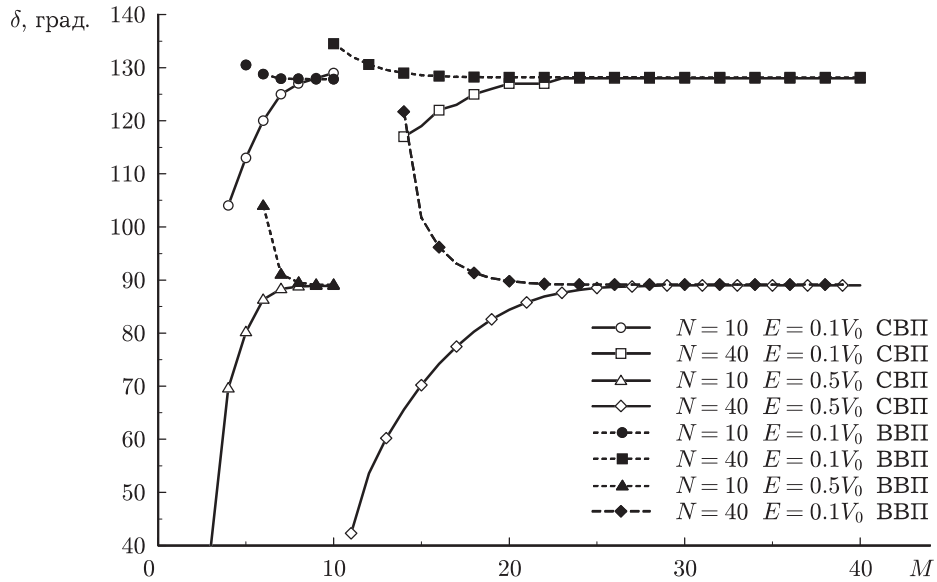


Рис. 5

представлениях. Легко видеть, что сходимость для ВВП-представления оказывается более быстрой. Кроме того, в последнем случае наблюдается сходимость фазовых сдвигов “сверху”, в то время как в СВП-представлении сходимость будет “снизу”.

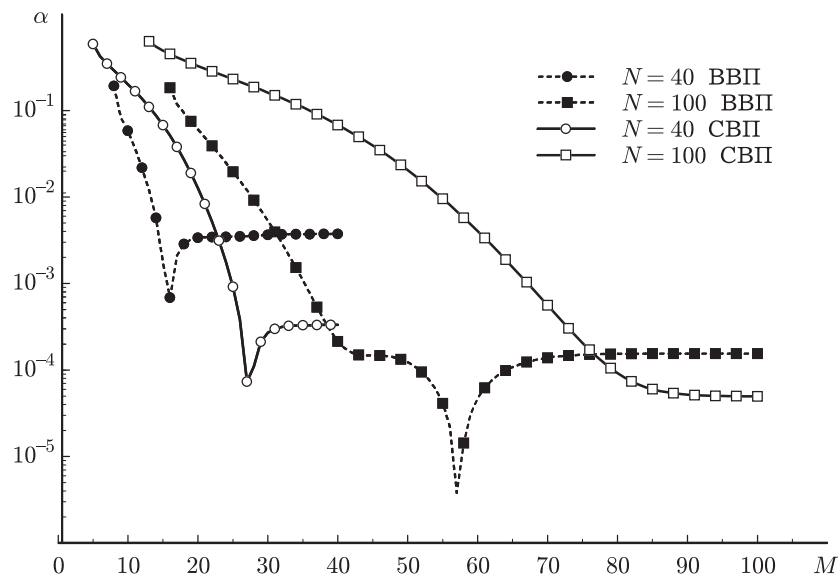


Рис. 6

На рис. 6 приведены зависимости абсолютных величин относительных погрешностей α фазовых сдвигов от числа учитываемых каналов M при малой энергии $E = 0.1V_0$ для СВП- и ВВП-базисов при полной размерности $N = 40$ и 100 .

Анализируя приведенные графики, можно сделать вывод, что в ВВП-представлении достаточно учитывать вклад лишь от половины или даже одной трети (в зависимости от значений N и E) полного числа энергетических полос, что позволяет заметно ускорить процесс вычислений. В СВП-представлении “отбрасывание лишних вкладов” связано с потерей точности, однако, если ограничиться точностью порядка нескольких десятых процента, то и в этом случае можно заметно сократить размерность матриц при обращении. При этом выигрыш будет многократно расти в задачах многочастичного рассеяния, где размерности базисов по каждой независимой координате Якоби будут перемножаться. Таким образом, уменьшение базиса в три раза в одночастичном (и двухчастичном) рассеянии приводит к сокращению размера пакетного базиса почти на порядок (!) в задачах трехчастичного рассеяния.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы детально исследовали различные типы пакетной дискретизации как универсальные методы построения конечномерной аппроксимации основных операторов теории рассеяния и сравнили их между собой. Это сравнение показало, что пакетные базисы СВП и ВВП дают примерно одинаковую точность представления для операторной резольвенты. При этом базис ВВП предпочтительнее использовать для любых эрмитовых операторов взаимодействия, тогда как базис СВП хорошо работает как для эрмитовых, так и для неэрмитовых гамильтонианов.

Мы также развили общий метод нахождения поправок высших порядков (относительно ширины энергетических полос Δ) к оператору Грина на основе дисперсионных соотношений. Было, в частности, показано, что учет поправки второго порядка позволяет на порядок увеличить точность вычисления наблюдаемых. Однако дальнейшее увеличение точности вычислений за счет поправок более высоких порядков хотя и возможно, но, по-видимому, нецелесообразно. Удобнее достигать более высокой точности либо путем увеличения размерности базиса N (см. рис. 1 и 3), либо выбором более подходящего L_2 -базиса для представления волновых пакетов. В этой связи весьма обещающим кажется недавно разработанный авторами базис гибридного типа [12], который представляет собой среднее между обычным одночастотным осцилляторным базисом и мультимасштабным гауссовым базисом (многочастотный осцилляторный базис).

Здесь уместно подчеркнуть, что при всем удобстве дискретного пакетного представления для задач потенциального рассеяния различного типа основные преимущества такого подхода по сравнению с традиционными методами аппроксимации интегральных операторов в теории рассеяния будут проявляться в многомерных и многочастичных задачах, где пакетная техника допускает прямое обобщение, сохраняя свою простоту и аналитический характер [9].

Благодарности. Авторы выражают глубокую благодарность редактору английского издания ТМФ Вильяму Эверетту за ряд полезных замечаний, относящихся к терминологии, а также за важные ссылки на работы, связанные с нашим подходом. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты № 01-02-16621 и 03-02-06506).

Список литературы

- [1] *Р. Ньютон*. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969.
- [2] *М. Гольдбергер, К. Ватсон*. Теория столкновений. М.: Мир, 1967.
- [3] *Э. Шмид, Х. Цигельман*. Проблема трех тел в квантовой механике. М.: Наука, 1979.
- [4] *Y. E. Kim, A. Tubis*. Phys. Rev. C. 1973. V. 7. P. 1710.
- [5] *W. Glöckle, H. Witala, D. Hüber, H. Kamada, J. Golak*. Phys. Rep. 1996. V. 274. P. 107.
- [6] *В. И. Кукулин, О. А. Рубцова*. ТМФ. 2002. Т. 130. С. 64.
- [7] *В. И. Кукулин, О. А. Рубцова*. ТМФ. 2003. Т. 134. С. 460.
- [8] *О. А. Рубцова, В. И. Кукулин*. ЯФ. 2001. Т. 64. С. 1882.
- [9] *О. А. Rubtsova, V. I. Kukulin*. Efficient technique for solving few-body scattering problems by the wave-packet continuum discretization. In: Few-Body Problems in Physics'02 (Few-Body Systems Supplement. V. 14). Eds. R. Krivec, B. Golli, M. Rosina, S. Širca. Wien: Springer, 2003. P. 211.
- [10] *Е. Вигнер*. Теория групп и ее приложение к квантовомеханической теории атомных спектров. М.: ИЛ, 1961.
- [11] *Дж. Тейлор*. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М.: Мир, 1975.
- [12] *О. А. Рубцова, В. И. Кукулин, С. А. Никольчинкина*. Построение оптимальных вариационных базисов для расчета спектров квантовых систем. ЯФ. (в печати).

Поступила в редакцию 10.IV.2003 г.