Развитие общего дискретного подхода в теории рассеяния и его применение для описания малочастичных систем и прямых ядерных реакций

О.А. Рубцова, ЛТАЯ

Научный семинар по ядерной физике НИИЯФ МГУ

16 октября 2012

Цель работы: Развитие общего подхода к решению проблем стационарной квантовой теории рассеяния в гильбертовом пространстве, т.е. в терминах нормируемых состояний, и его практическое применение для описания различных процессов в ядерных системах, состоящих из нескольких частиц.

Основу для развиваемого подхода составляют дискретизация непрерывных спектров систем и использование специального базиса стационарных волновых пакетов, позволяющего формулировать задачи рассеяния в таком дискретном представлении .

Содержание

Предпосылки исследования

Расчеты наблюдаемых для процессов рассеяния с учетом современных полностью реалистических типов взаимодействия на основе решения точных уравнений квантовой теории рассеяния весьма трудоемки. Для их реализации требуются современные мощные суперкомпьютеры. Всего несколько групп в мире способны проводить такие расчеты.

«Точные» подходы – численное решение точных уравнений теории рассеяния

1. Численное решение уравнений Фаддеева в импульсном пространстве.
   группа В. Глекле.
2. Численное решение уравнений АГС.
   группа А. Фонсеки

3. Решение уравнений Фаддеева и Фадеева-Меркурьева в конфигурационном пространстве (на основе метода Нумерова).
 В.М. Суслов, Б. Влахович, Долешаль и др.
4. Решение уравнений Фаддеева и Фаддеева-Якубовского в конфигурационнном пространстве на основе метода коллокации
Д. Карбонель, Р. Лазаускас

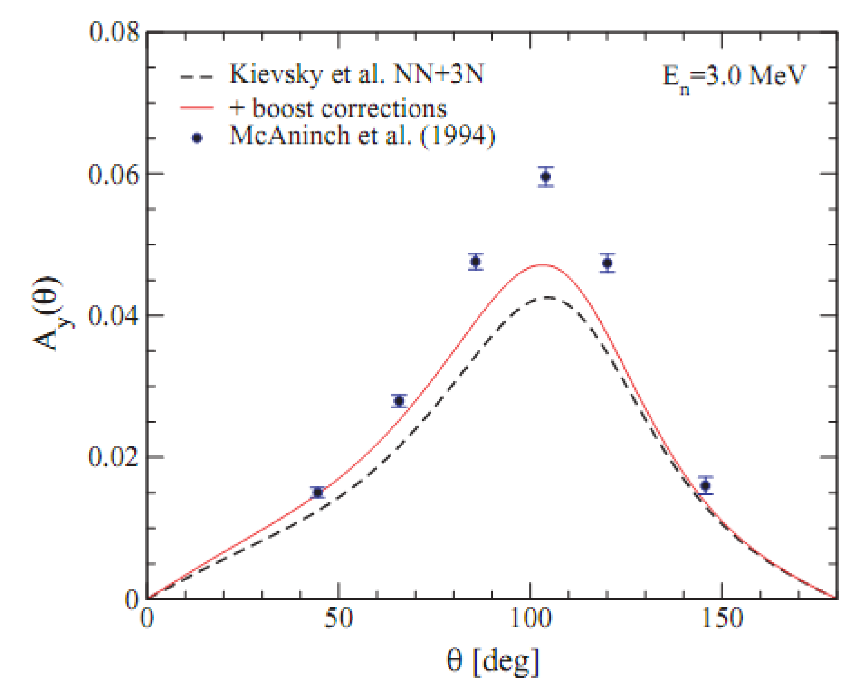
5. Метод парно-коррелированных гиперсферических гармоник.
   Решение на основе вариационного принципа Кона.
   группа А. Киевского.

И другие подходы…

При этом остаются нерешенными многие проблемы, например в малонуклонных системах, когда теоретические предсказания не согласуются с экспериментальными данными, что ставит вопрос о правильности используемых моделей ядерных сил.

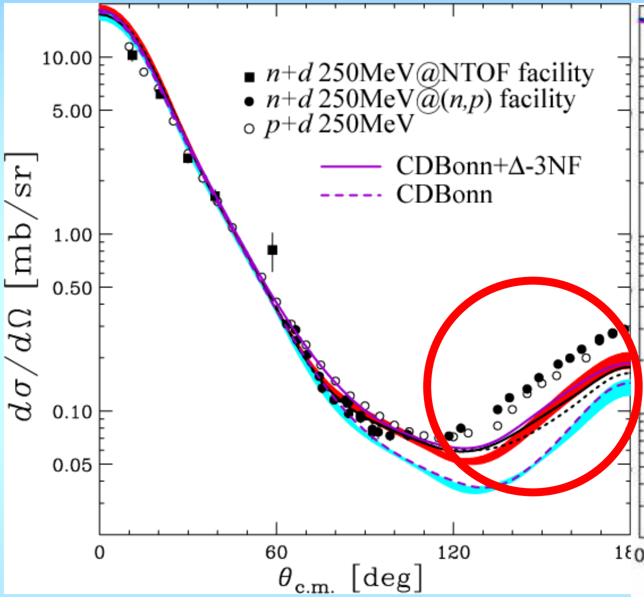
Описание векторной анализирующей способности упругого nd и pd рассеяния при низких энергиях. (Ay-puzzle)

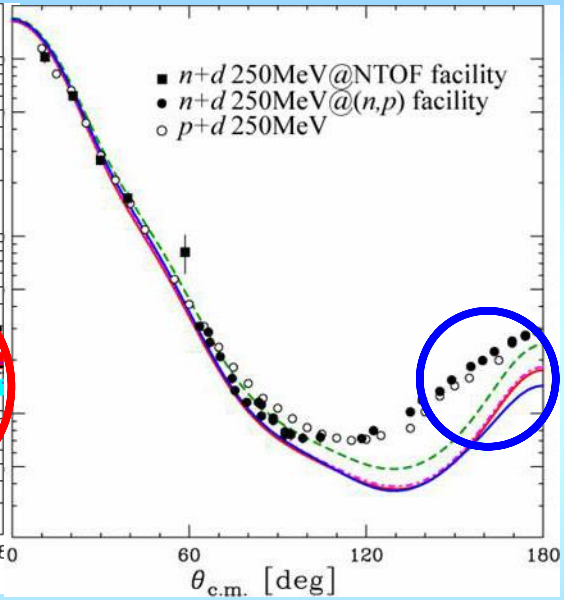
$$A_y = \frac{\sigma(\Omega)\big|_{\uparrow} - \sigma(\Omega)\big|_{\downarrow}}{\sigma(\Omega)\big|_{\uparrow} + \sigma(\Omega)\big|_{\downarrow}}$$



$d\sigma/d\Omega$? (T_p>200 MeV)

nd **elastic scattering measurements at E_n=250MeV**



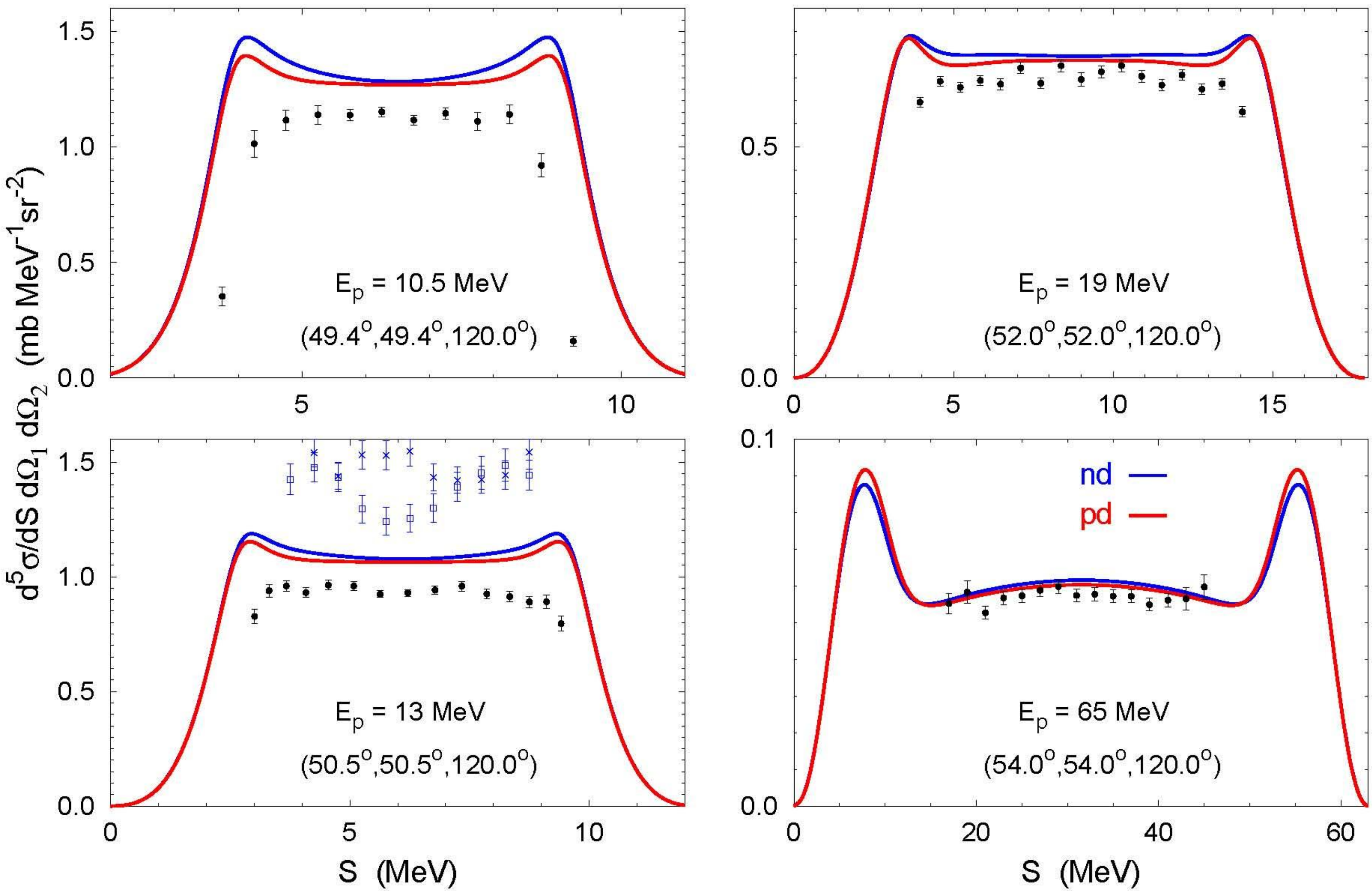


Calc. even including 3NF still underestimate the data by 50% !

Relativistic calc. by Witala improve the fit only at θcm > 160 deg. but not enough.

Nd breakup: space-star anomaly

Prediction by CD-Bonn + Delta, courtesy of A. Deltuva



Все указанные проблемы требуют точного решения на основе уравнений теории рассеяния нескольких тел.

Необходимо создание альтернативных подходов к нахождению наблюдаемых в квантовых задачах рассеяния, позволяющих учитывать современные сложные типы взаимодействия частиц и приводящих к реализуемым численным схемам.

Альтернативные подходы в теории рассеяния

1. Lorenz Integral Transform (LIT) method.

   В.Д. Эфрос, Дж. Орландини и др.

   Расчеты для процессов фото и электро-расщепления ядер.

   Учет промежуточного континуума.

2. Complex scaling method

   Р. Лазаускас

   Развал в трехнуклонной системе.

3. Метод J-матрицы (в т.ч. метод Осцилляторного представления)

   Э. Хеллер, Х. Ямани, Г.Ф. Филлиппов, Ю.Ф. Смирнов и др.

   Истинно многочастичное рассеяние.

4. Методы редукции к системе связи каналов.

   Continuum-Discretized Coupled Channel method

   Ф. Левин, М. Камимура, И. Томпсон ….

   Упругое рассеяние и развал легких ядер на средних и тяжелых.

5. Другие подходы L2 типа.

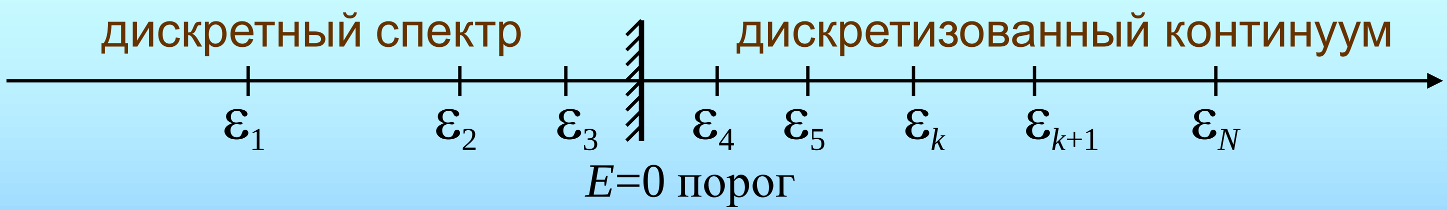
Подходы L_2 типа

$$H\,|\Psi\rangle = E\,|\Psi\rangle \longleftarrow |\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} C_n\,|\phi_n\rangle$$

$$\det\|H_{nn'} - E\| = 0 \;\Rightarrow\; \{\varepsilon_n\}_{n=1}^{N},\ |\Psi_n\rangle$$

$\mathcal{E}_n < 0$ – **связанные состояния**

$\mathcal{E}_n > 0$ – **псевдо-состояния континуума**



Разложение собственных волновых функций гамильтониана по некоторому базису конечной размерности приводит к дискретизации непрерывного спектра этого гамильтониана.

Два способа вычисления S-матрицы

«Дифференциальный» подход

$$H\left|\psi(E)\right\rangle = E\left|\psi(E)\right\rangle$$

Асимптотическое поведение в.ф.:

$$\psi(E,r) \xrightarrow[r\to\infty]{} h^{(-)}(E,r) + S(E)\cdot h^{(+)}(E,r)$$

Элементы S-матрицы находятся из сшивки волновой функции во внутренней области с асимптотикой.

Интегральный подход

$$\left|\psi^{(+)}(E)\right\rangle = \left|\phi_0(E)\right\rangle + G_0^{(+)}V\left|\psi^{(+)}(E)\right\rangle$$

Элементы S-матрицы находятся из интегральной формулы

$$S(E) = 1 + 2\pi i T(E)$$

$$T(E) = \left\langle \phi_0(E)\right| V \left|\psi^{(+)}(E)\right\rangle$$

Обоснованием для использования L2 подходов является тот факт, что для нахождения наблюдаемых достаточно знать волновую функцию во внутренней области.

Метод собственных дифференциалов Вейля

Собственный дифференциал функции непрерывного спектра:

$$\left|\Psi(E, E+\Delta)\right\rangle = \int_{E}^{E+\Delta} \left|\Psi(E')\right\rangle dE'.$$

Такие состояния являются нормируемыми, принадлежат гильбертову пространству.

Тогда, согласно методу Вейля, полная система ортогональных функций гамильтониана состоит из связанных состояний и собственных дифференциалов

$$\left\{ \left|\Psi_k\right\rangle_{k=1}^{N_b}, \left|\Psi(E, E+\Delta)\right\rangle\Big|_{E=0}^{\infty} \right\}$$

Разложение произвольной волновой функции

$$\left|\Phi\right\rangle = \sum_{k=1}^{N_b} C_k \left|\Psi_k\right\rangle + \sum C(E, \Delta)\left|\Psi(E, E+\Delta)\right\rangle$$

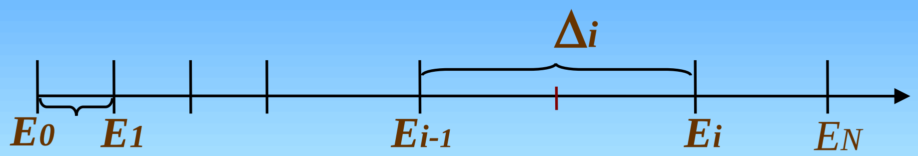
Предельный переход

$$\left|\Phi\right\rangle \underset{\Delta\to 0}{\to} \sum_{k=1}^{N_b} C_k \left|\Psi_k\right\rangle + \int_{0}^{\infty} C(E)\left|\Psi(E)\right\rangle dE$$

Формализм стационарных волновых пакетов

Стационарные волновые пакеты и их свойства

Дискретизация непрерывного спектра свободного гамильтониана H_0



$$E_i = f(i\alpha), \;\; \alpha \sim 1/N$$

Стационарный ВП:

$$\left|x_i\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \int\limits_{q_{i-1}}^{q_i} dq \left|\psi_{0q}\right\rangle, \;\; q_i = \sqrt{2mE_i}, \;\; d_i = q_i - q_{i-1}$$

Волновые пакеты образуют базис:

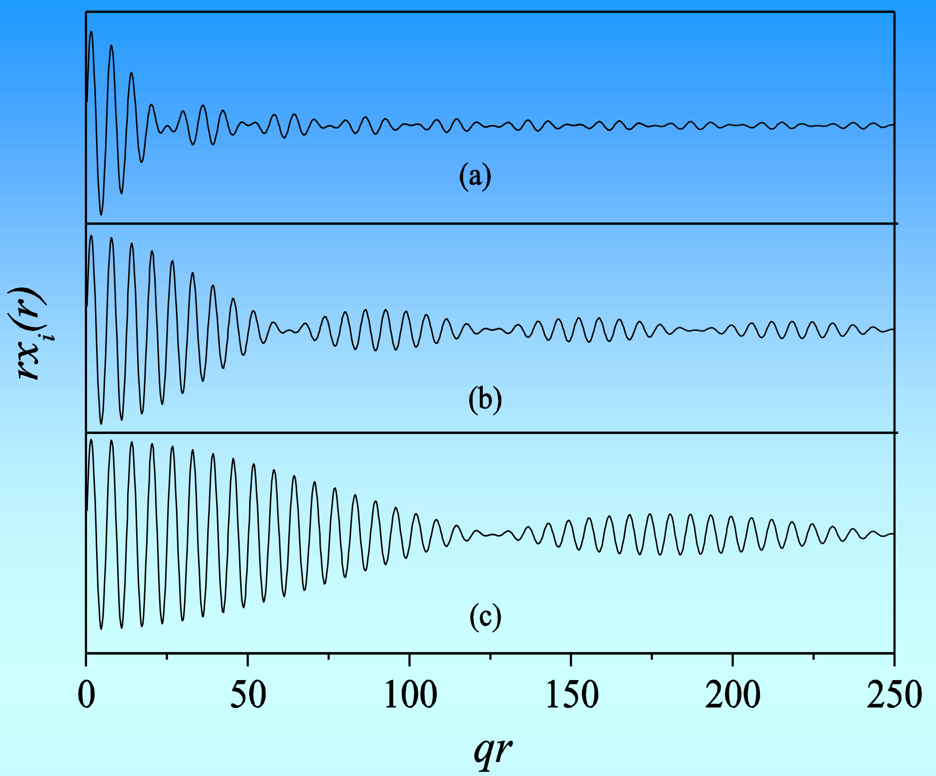
$$\left\langle x_i \middle| x_j \right\rangle = \delta_{ij}$$

Свободная резольвента имеет аналитическое представление в этом базисе:

$$G_0(E) = \left[E + i0 - H_0\right]^{-1} \;\; \rightarrow \;\; \mathrm{G}_0 = \sum_{i=1}^{N} g_i(E) \left|x_i\right\rangle \left\langle x_i\right|$$

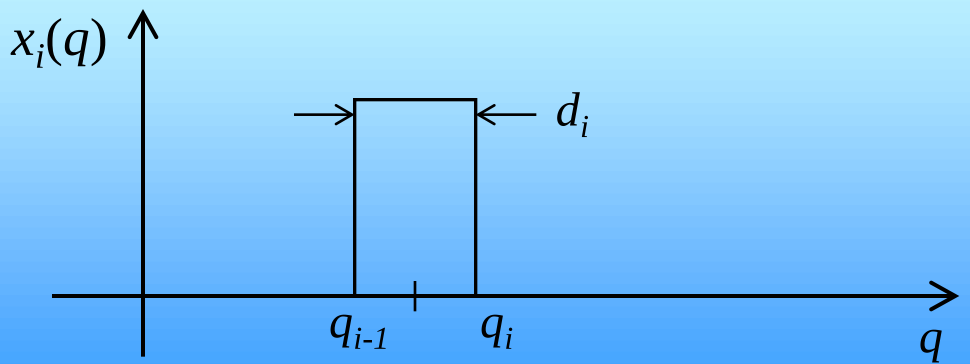
Поведение стационарных ВП в координатном представлении

$$rx_i(r) \sim \sin q_i^* r \frac{\sin(d_i r/2)}{d_i r/2}$$



Импульсное представление

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



$\boldsymbol{x_i}$ – аналог прямоугольного импульса

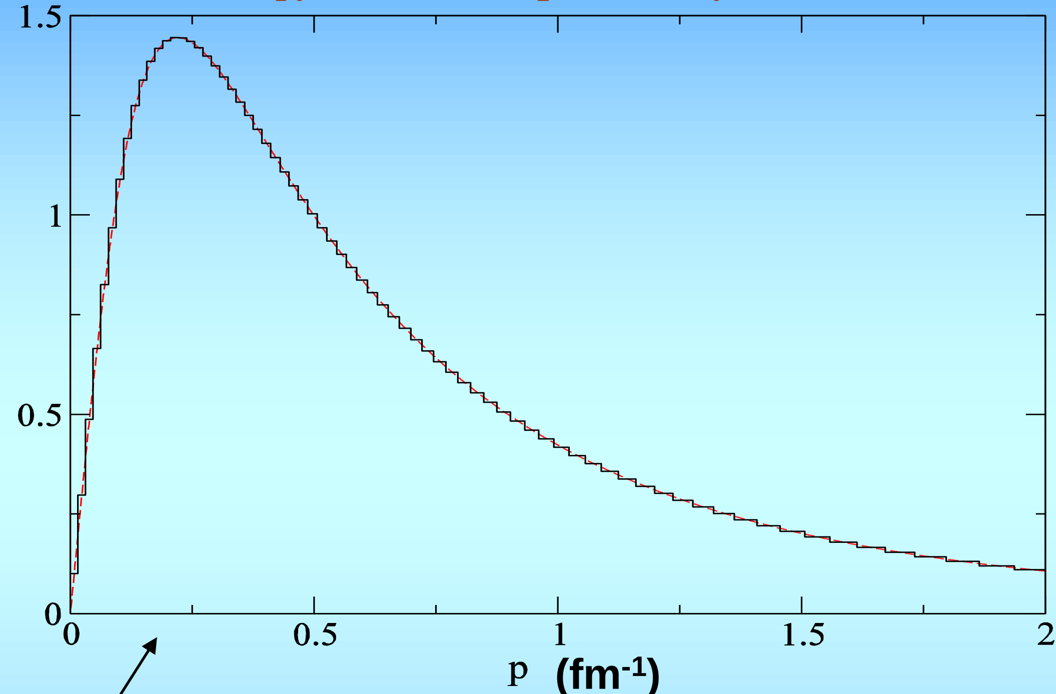
Построение базиса для двухчастичного гамильтониана h

Базис свободных волновых пакетов можно использовать для построения базиса возмущенных волновых пакетов, отвечающих некоторому полному гамильтониану

$$h = h_0 + v$$

Здесь используется соответствие между волновыми пакетами и псевдосостояниями.

Волновая функция дейтрона в ступенчатом базисе



Связанное состояние

Процедура диагонализации:

$$\det\left\| h_{ii'} - E \right\| = 0 \;\Rightarrow\; \left\{ \varepsilon_j \right\}_{j=0}^{N},\; \left| z_0 \right\rangle, \left\{ \left| \bar{z}_j \right\rangle \right\}$$

псевдосостояния

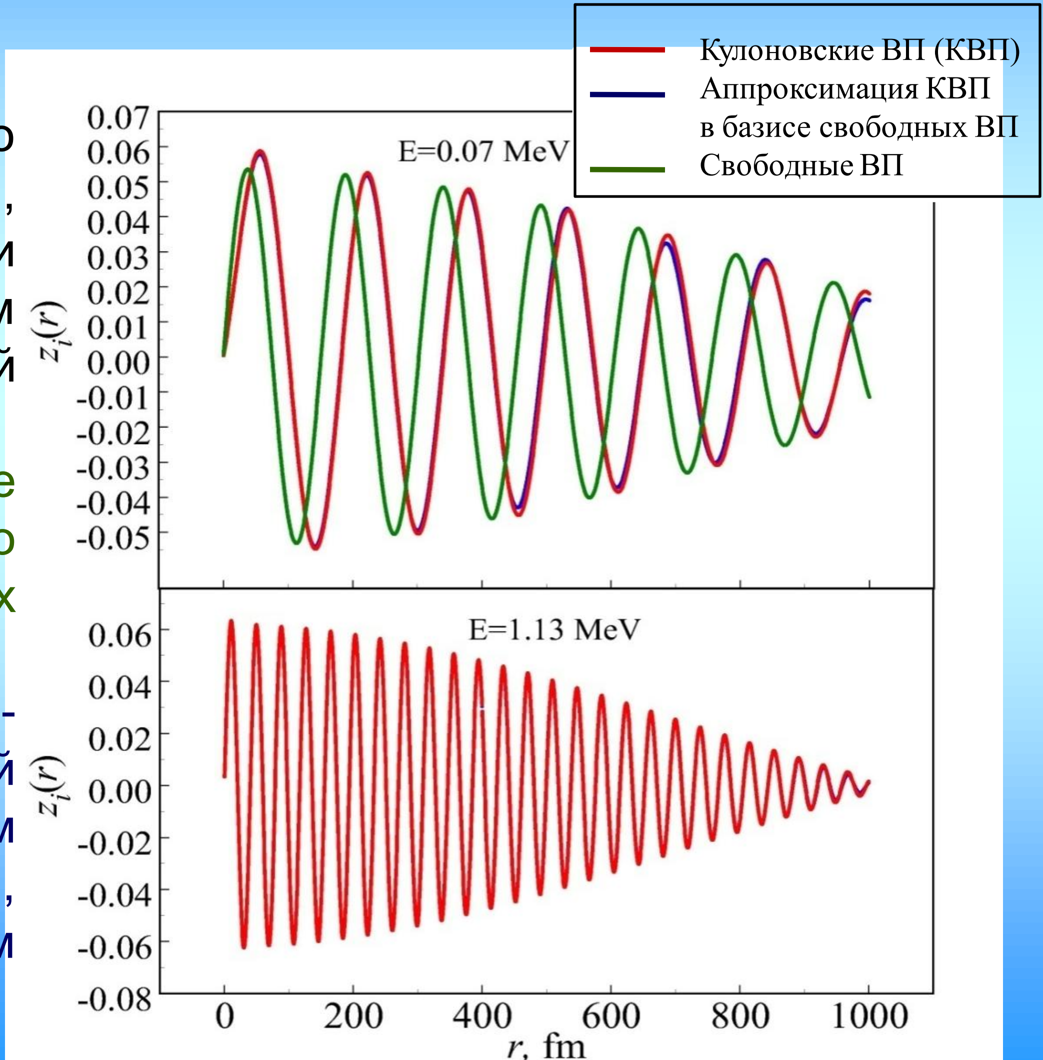
Псевдосостояния следует рассматривать как аппроксимации именно волновых пакетов, а не точных функций рассеяния.

Пакетные функции убывают очень медленно. Поэтому базис, построенный из таких функций очень удобен для аппроксимации состояний непрерывного спектра некоторого гамильтониана H. В том числе и для дальнодействующих потенциалов взаимодействия.

Из-за бесконечного радиуса действия кулоновских сил, точные кулоновские функции нельзя разложить по собственным функциям оператора кинетической энергии

Однако, кулоновские пакеты можно разложить по конечному набору свободных пакетов.

Таким образом, пакетирование волновых функций является эффективным способом регуляризации особенностей, связанных с дальнодействующим характером взаимодействий.



Дискретная версия теории рассеяния

Основные идеи дискретного подхода

1. Непрерывный спектр гамильтониана дискретизуется путем разбиения на узкие полосы – бины.

2. В каждой полосе строятся стационарные волновые пакеты (СВП) как интегралы от функций непрерывного спектра гамильтониана.

3. Набор СВП используется как основной базис системы. Операторы представляются матрицами, а волновые функции – векторами в пакетном пространстве.

4. Энергетические зависимости операторов (например, оператора резольвенты гамильтониана) усредняются путем интегрирования по энергетическим бинам.

Уравнение Липпмана-Швингера для оператора перехода

$$t(E) = v + vG_0(E)t(E)$$

В импульсном представлении имеет вид:

$$t(E;q,q') = v(q,q') + 4\pi \int dq'' \; \frac{v(q,q'')t(q'',q')}{E + i0 - (q'')^2 / 2m}$$

После проектирования в пакетное представление получается чисто матричное уравнение:

$$\mathbf{T}^k = \mathbf{V} + \mathbf{V}\mathbf{G}_0^k\mathbf{T}^k, \; E \in \left[E_{k-1}, E_k\right]$$

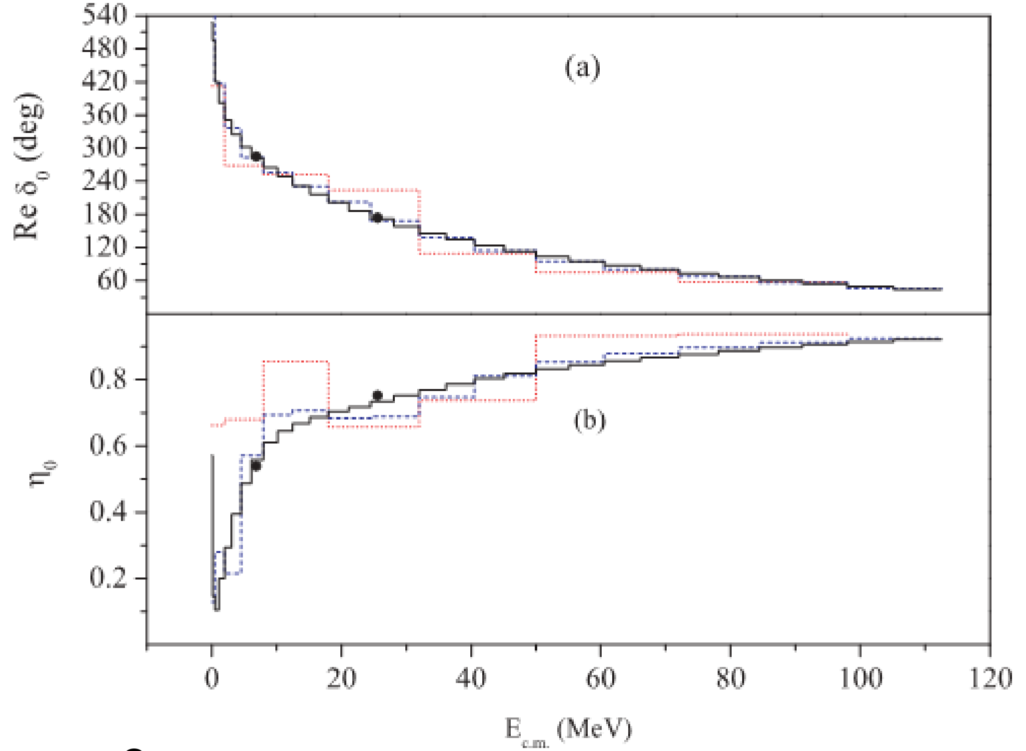
Элемент t-матрицы вне массовой поверхности:

$$t(E;q,q') \sim \mathbf{T}_{ij}^k$$

Рассеяние нейтронов на ядре ^{56}Fe

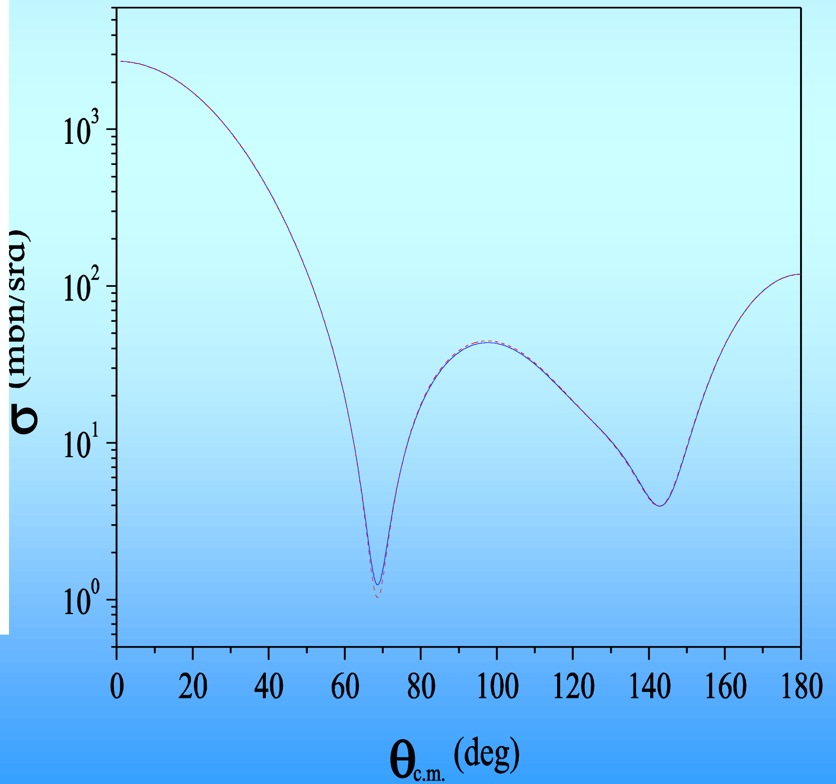
Нелокальный комплексный потенциал $V_{nA}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -U(|\mathbf{r}+\mathbf{r}'|)W(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$

S-волновые фазовые сдвиги и параметры неупругости

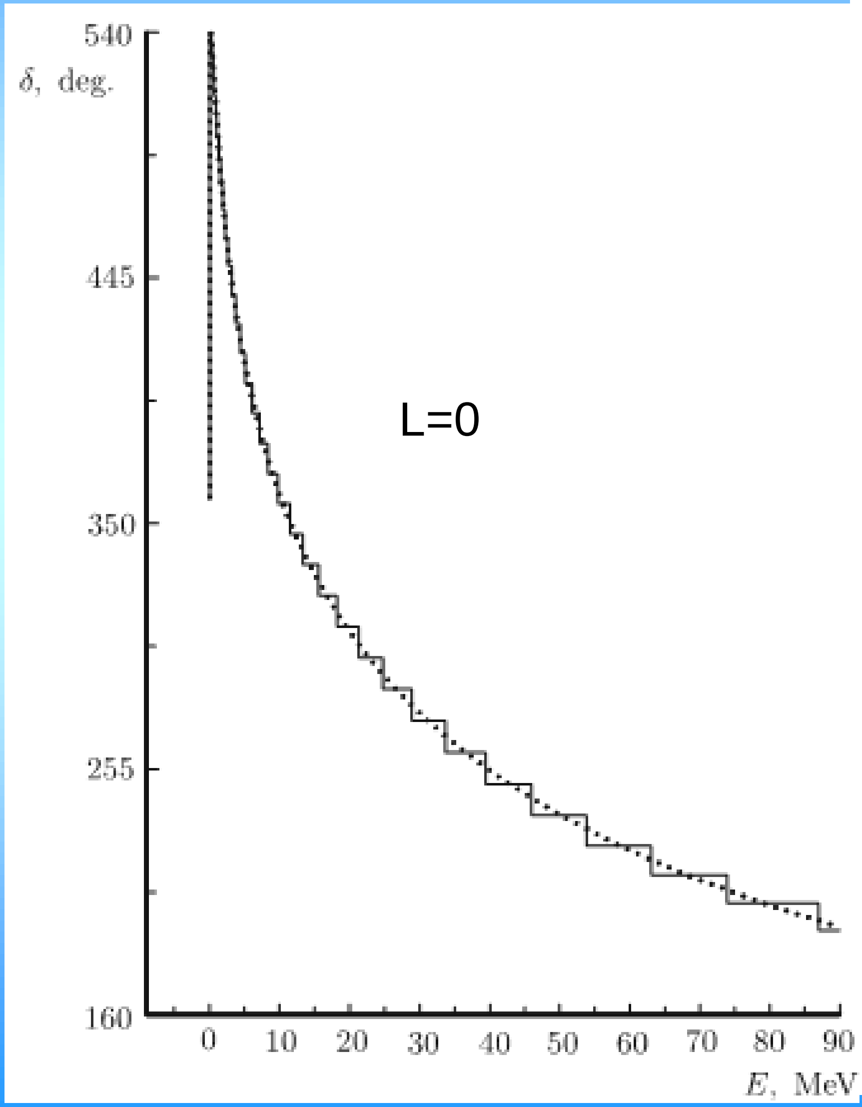


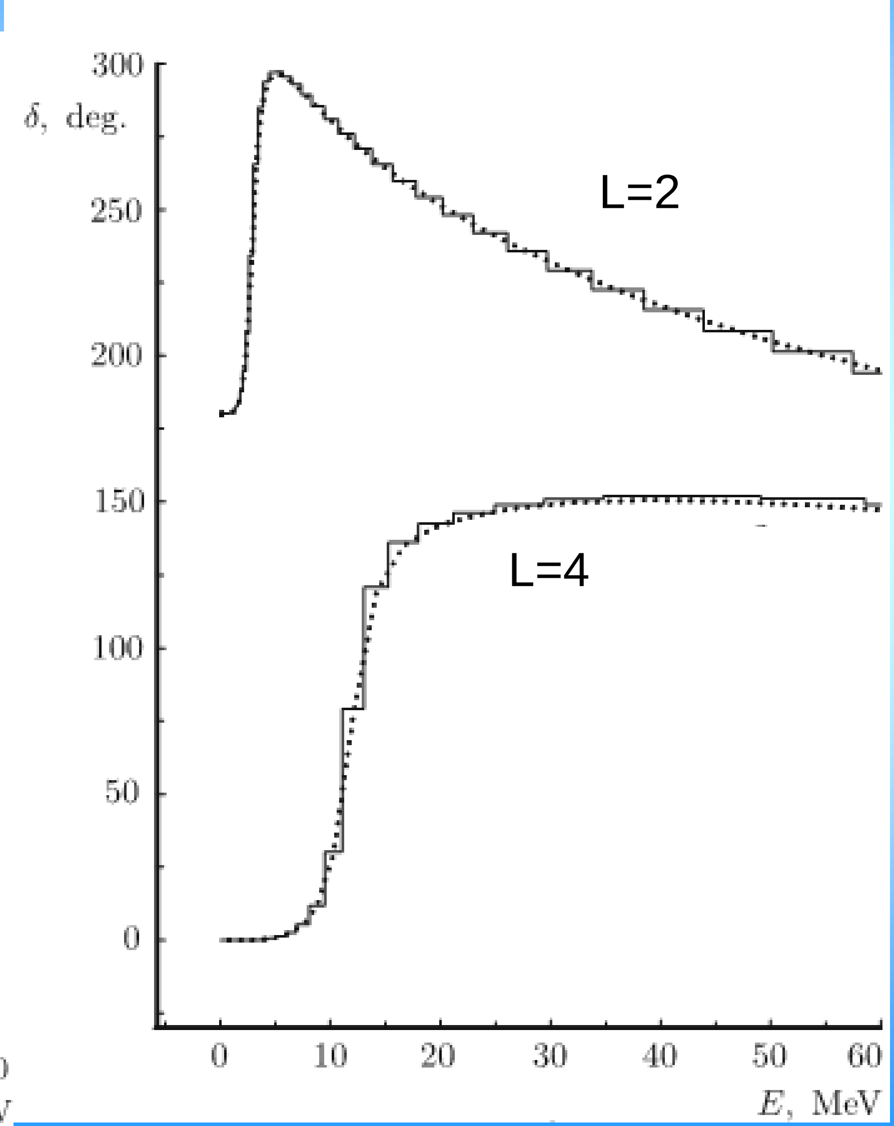
- результаты для локальных фазово-эквивалентных потенциалов при En=7 и 26 МэВ

n+Fe differential cross section at E*n*=7 MeV



Парциальные фазовые сдвиги $\alpha-\alpha$ рассеяния





Преимущества дискретного подхода

1. Благодаря явной аналитической связи между СВП и функциями рассеяния, получаются аналитические конечномерные представления для операторов, в частности, резольвент гамильтонианов. Это позволяет использовать интегральную версию квантовой теории рассеяния.

2. Вместо интегральных уравнений для волновых функций и операторов, получаются их матричные аналоги.

3. Благодаря усреднению энергетических зависимостей в ядрах уравнений, последние уже не содержат сингулярностей и могут быть решены непосредственно на вещественной энергетической оси.

4. Потенциалы взаимодействия представляются матрицами в пакетном базисе, поэтому не возникает отличий при рассмотрении нелокальных взаимодействий.

5. Схема решения аналогична используемым для нахождения связанных состояний систем (решение матричных уравнений, не нужен явный учет граничных условий).

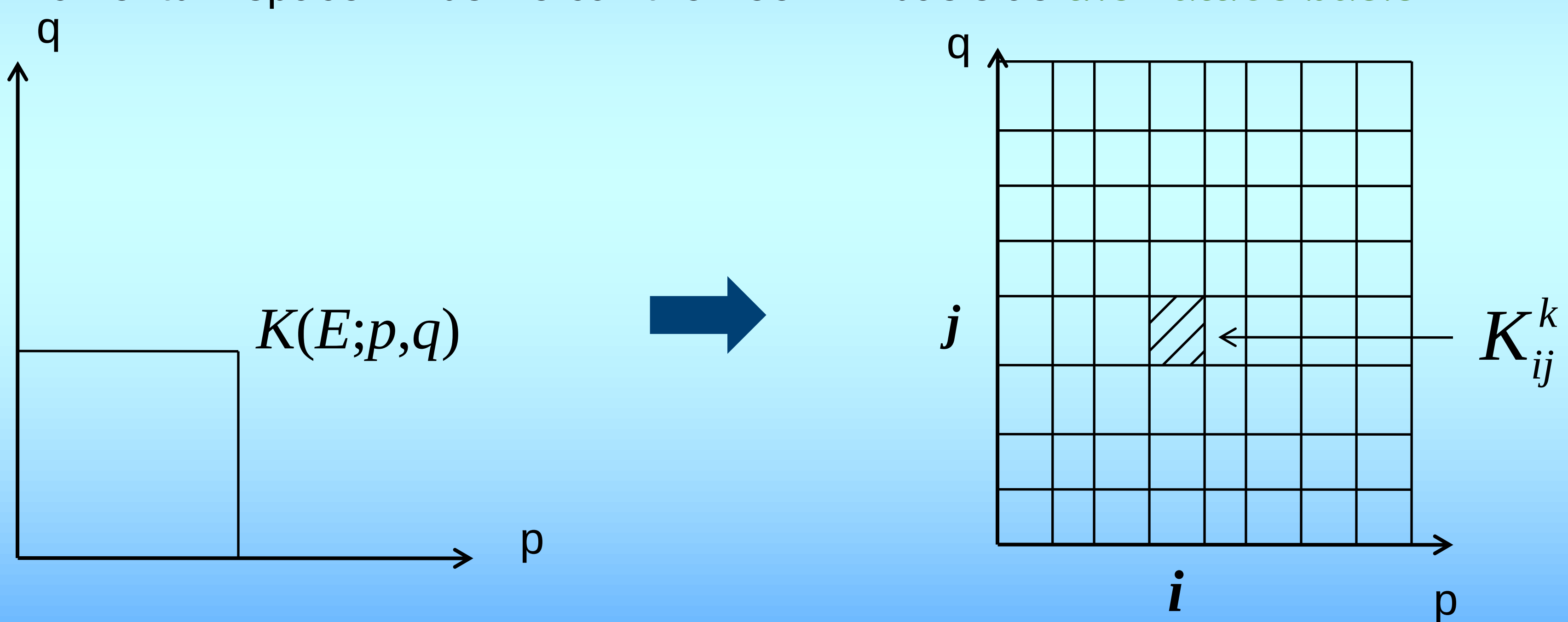
Малочастичные системы

Generalization to three-and few-body scattering

The free motion three- (and few-body) Hamiltonian is a direct sum of the binary subHamiltonians, so the few-body basis functions can be constructed as direct products of the two-body ones.

$$H_0 = h_p^0 \oplus h_q^0 \;\Rightarrow\; \left|X_{ij}\right\rangle \equiv \left|x_i\right\rangle \otimes \left|y_j\right\rangle$$

Thus, in three- and few-body cases the WP basis space corresponds to a lattice in the momentum space. Thus we call the free WP basis as **the Lattice basis**.

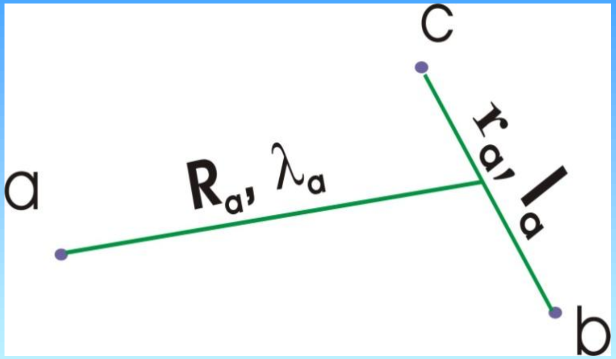


In the WP scheme, one has the discrete matrix function K^k_{ij} instead of continuous kernel of the integral equation $K(E;p,q)$. All the energy and momentum singularities are smoothed by the integration over the lattice cells.

The WP-representation for the three-body channel resolvent

The total three-body Hamiltonian

$$H = H_0 + \sum_a V_a$$



One can define three channel Hamiltonians

$$H_a = H_0 + V_a = h_0^a \oplus h_a$$

Then, the channel WP basis states are direct products of two-body WPs for h_0^a and h_a subHamiltonians $\left|Z_{ij}^a\right\rangle \equiv \left|z_i\right\rangle \otimes \left|x_j\right\rangle$

In general few-body case, the WP basis should be constructed in each Jacobi coordinate. Such a basis corresponds to three-body states from the continuous spectrum of the channel Hamiltonian.

Lattice representation leads to a complete few-body continuum discretization.

The main advantage of such WP-discretization here is finite-dimensional representation for the few-body channel resolvent:

$$\boxed{\mathbf{G}_a^{(+)}(E) = \sum [G_a]_{ij} \left|Z_{ij}^a\right\rangle\left\langle Z_{ij}^a\right|}$$

The permutation matrix in the channel basis

The permutation operator matrix in the channel WP basis can be found using the expansion of the scattering WPs over the free ones

$$\left\langle Z^{a}_{ij} \middle| Z^{b}_{i'j'} \right\rangle = \sum_{ii'} C^{*a}_{ik} C^{b}_{i'k'} \left\langle X^{a}_{kj} \middle| X^{b}_{k'j'} \right\rangle =$$

$$= \sum_{ii'} C^{*a}_{ik} C^{b}_{i'k'} \left[P^{ab}_{0} \right]_{kj,k'j'}$$

free permutation matrix

can be calculated almost in an analytical form

Thus, we have in our disposal all the required input objects to solve the scattering problem.

3N system (n-d scattering)

O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, PRC 79, 034001 (2009); PRC 79, 064602 (2009), PRC (2012)

Instead of the conventional AGS equation

$$U = PG_0^{-1} + PtG_0U$$

One uses an alternative one (half-shell equivalent)

$$U = Pv_1 + Pv_1G_1U$$

the channel resolvent

The channel resolvent G_1 has an analytical form in the WP basis after a single diagonalization of the two-body subHamiltonian h_1.
Thus, in the channel WP basis, one needs only to solve the simple matrix equation with regular matrices:

$$\mathbf{U} = \mathbf{PV}_1 + \mathbf{PV}_1\mathbf{G}_1\mathbf{U},$$

where $\mathbf{P}$ is the permutation matrix in WP basis, $\mathbf{V}_1$ is the matrix of NN interaction, $\mathbf{G}_1$ is the matrix of the three-body channel resolvent.

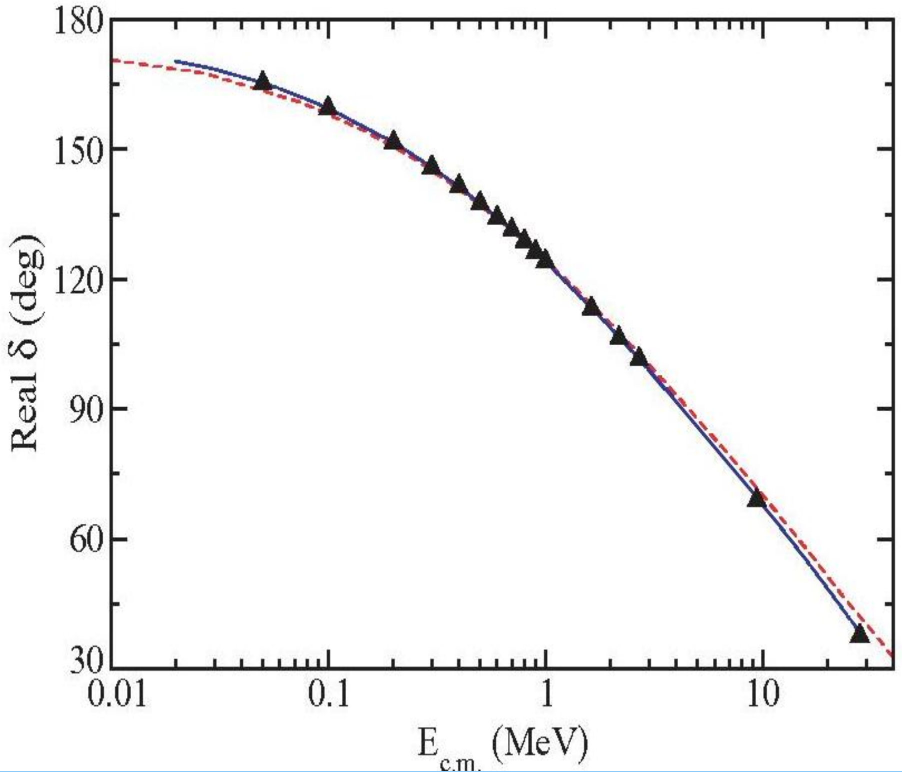
Elastic scattering amplitude can be found from the diagonal matrix element of **U**

$$e^{2i\delta(q_0)} - 1 \approx \frac{2m}{3q_0}\frac{U_{0j_0,0j_0}}{d_{j_0}},\ q_0 \in (d_{j_0})$$

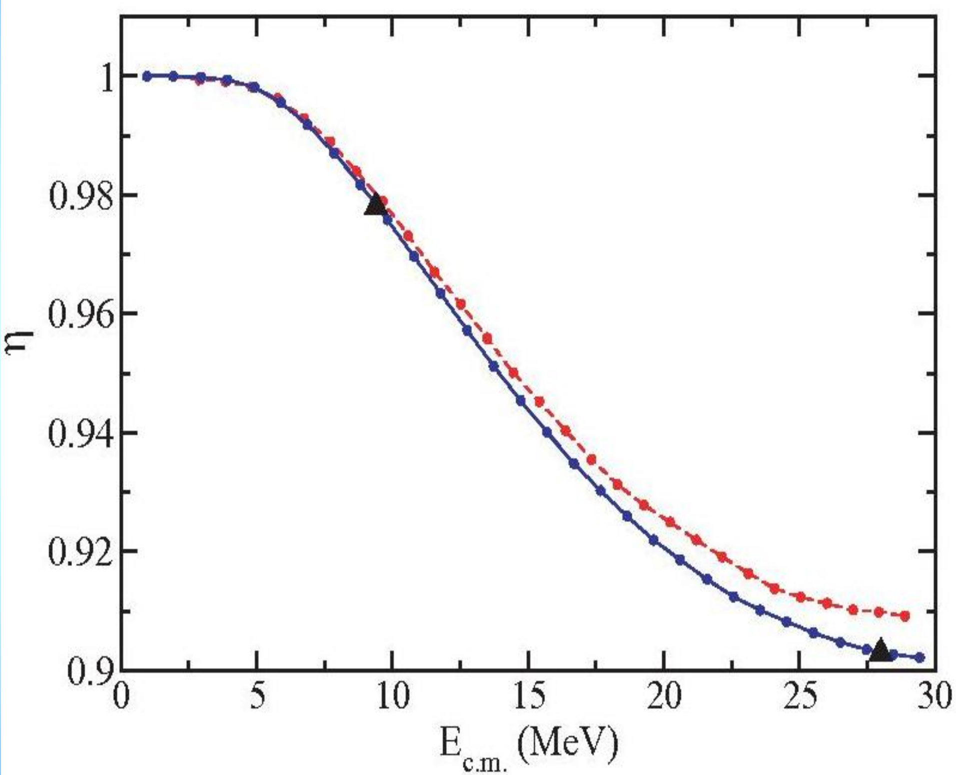
Elastic n-d scattering

(V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, PRC **79**, 034001 (2009))

Real part of the S-wave phase shift (quartet channel)



Inelasticity (quartet channel)



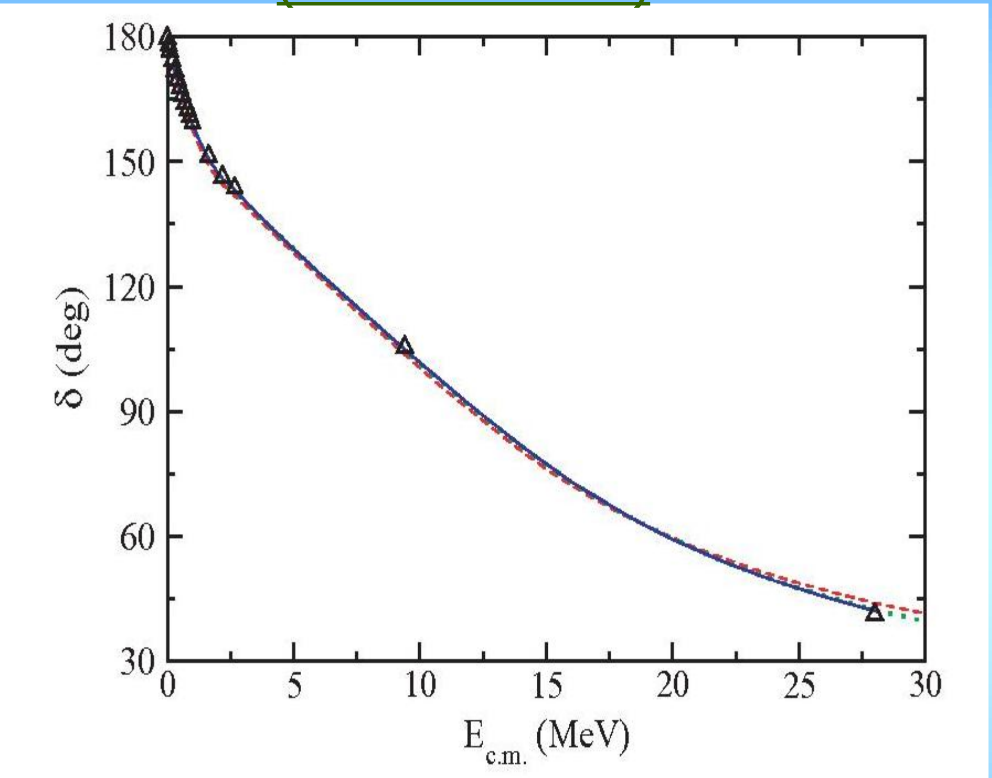
N=100x100

N=200x200

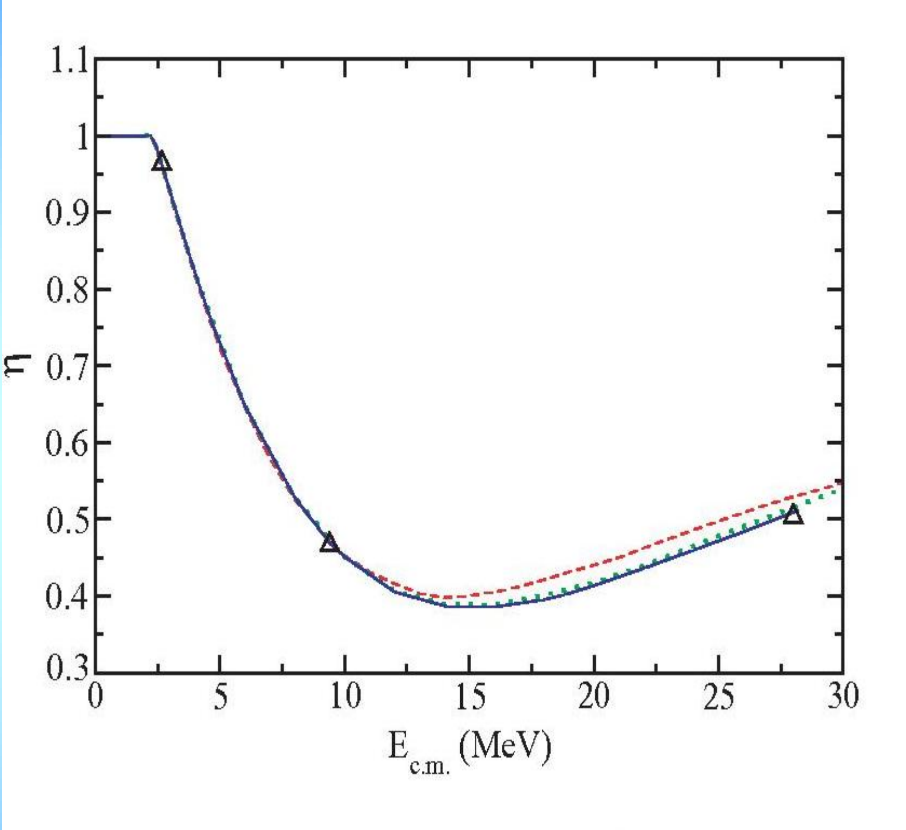
standard Faddeev calc.

Calculations with local MT NN interaction

Real part of the S-wave phase shift (doublet channel)



Inelasticity (doublet channel)

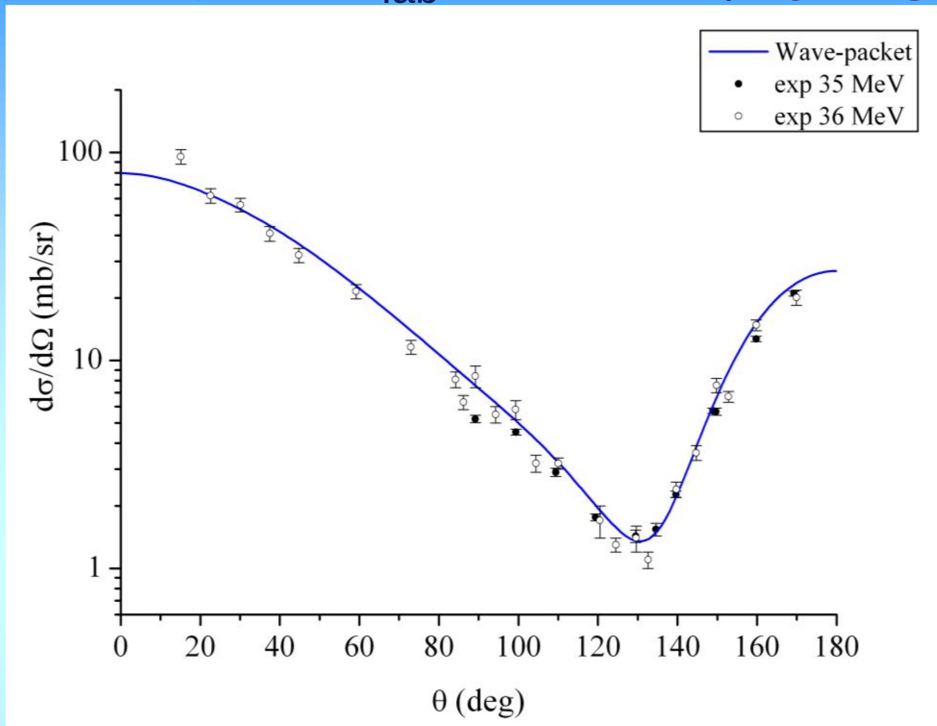


N=(50+50)x50

N=(100+100)x100

standard Faddeev calc.

Дифференциальное сечение упругого nd рассеяния при энергии E_{lab}=35 МэВ (Nijmegen I NN potential).



Новая техника дискретизации позволяет проводить фаддеевские вычисления выше порога трехчастичного развала с полностью реалистическими 2N-силами на обычном ПК.

New treatment for the three-body breakup amplitude

The conventional formula for the breakup amplitude

$$T(p,q) = \langle p,q | tG_0U | \phi_0, q_0 \rangle$$

The same amplitude can be derived as matrix element of the elastic transition operator:

$$T(p,q) = \langle \phi_0, q_0 | U | \psi_p^{(+)}, q \rangle$$

the scattering state of the NN subHamiltonian

Thus, in our approach, the elastic and breakup amplitude can be defined in terms of the same channel basis. The breakup process is treated in our approach as an excitation of the two-partical bound-state (deuteron) into discretized continuum states.

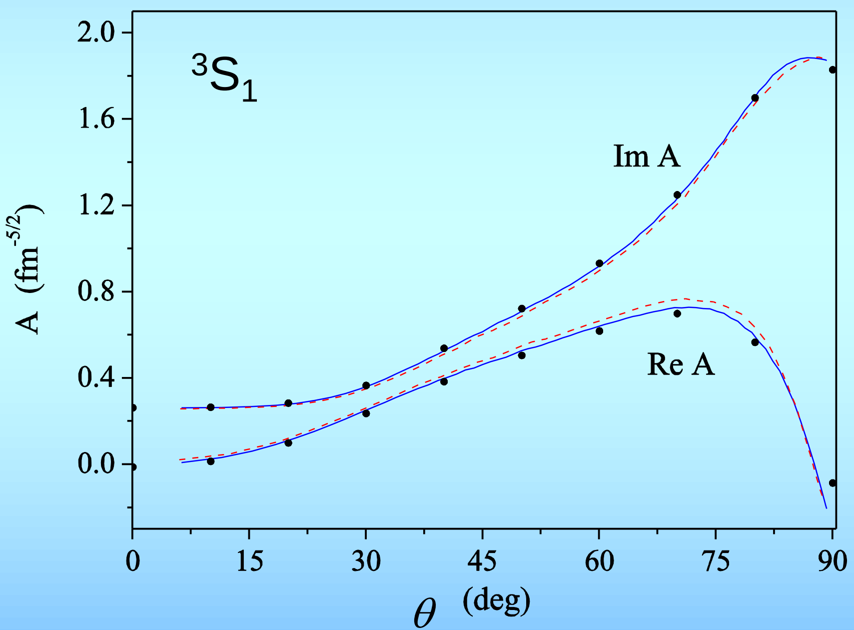
So, the breakup amplitude can be found from the non-diagonal element of the same matrix U

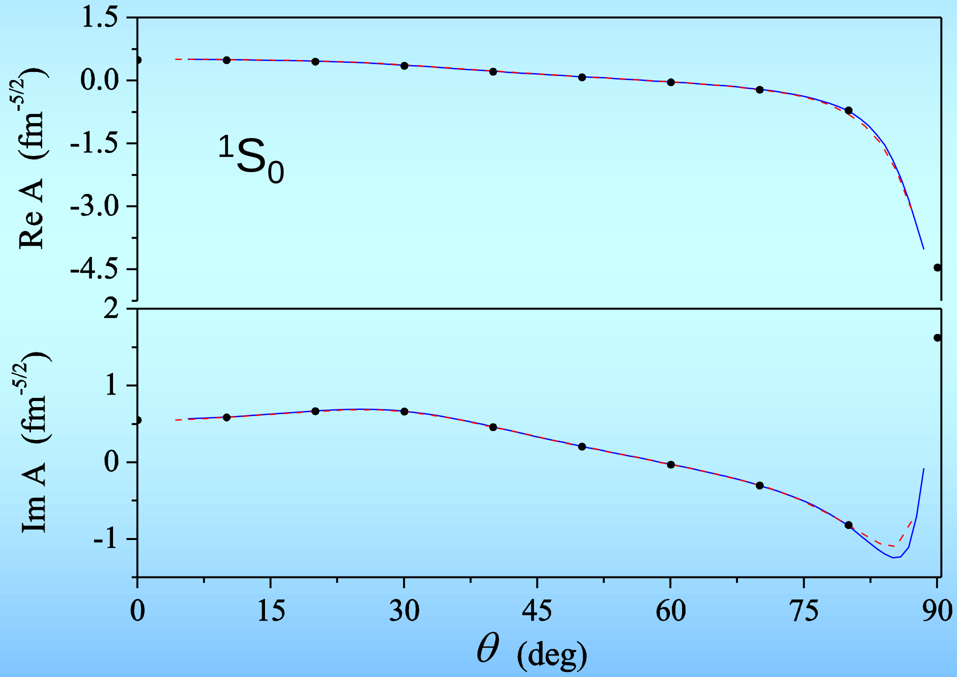
$$T(p,q) \sim e^{i\delta_{NN}(p)} \frac{U_{0j_0,ij}}{\sqrt{d_{j_0} d_i d_j}}, \quad \begin{array}{l} p \in d_i \\ q \in d_j \\ q_0 \in d_{j_0} \end{array}$$

Comparison for the three-body n+d→n+n+p breakup amplitudes

$$\psi(K,\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{A(\theta)}{(K\rho)^{5/2}} \qquad A(\theta) \sim T(p,q), \quad tg(\theta) = \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{q}{p}$$

The hyperspherical breakup amplitudes in the spin-doublet channel



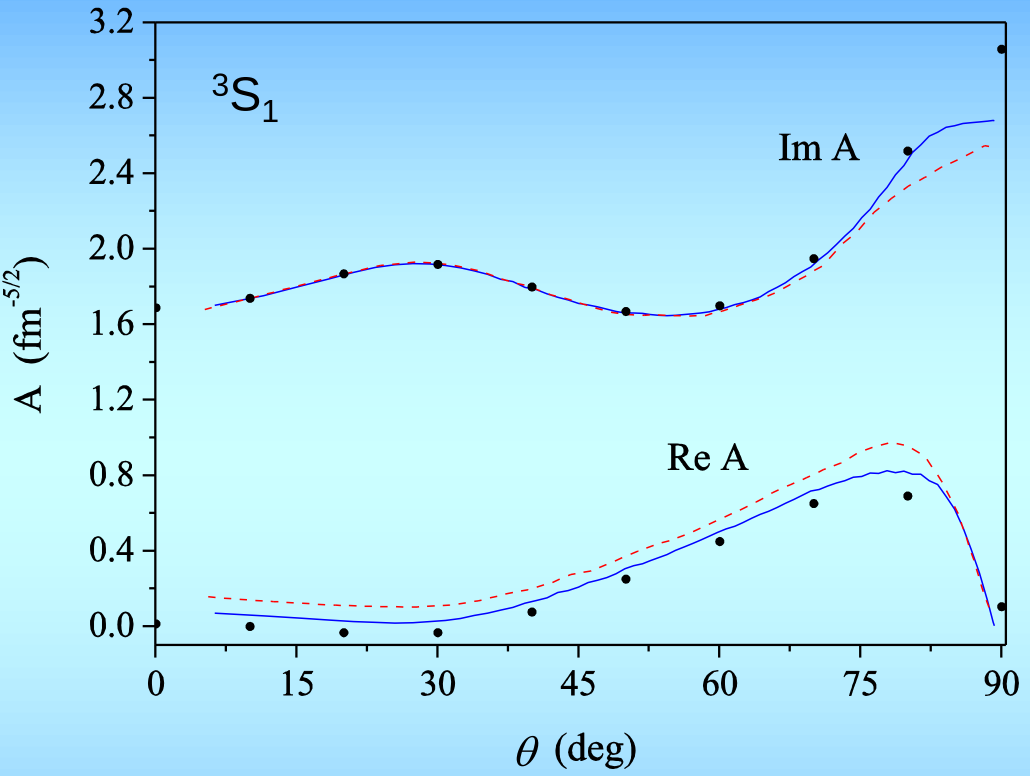


● Benchmark calculations (Friar et al., PRC 1995)

– – · Wave-packet N=100x100

—— Wave-packet N=200x200

The hyperspherical breakup amplitudes in the spin-quartet channel

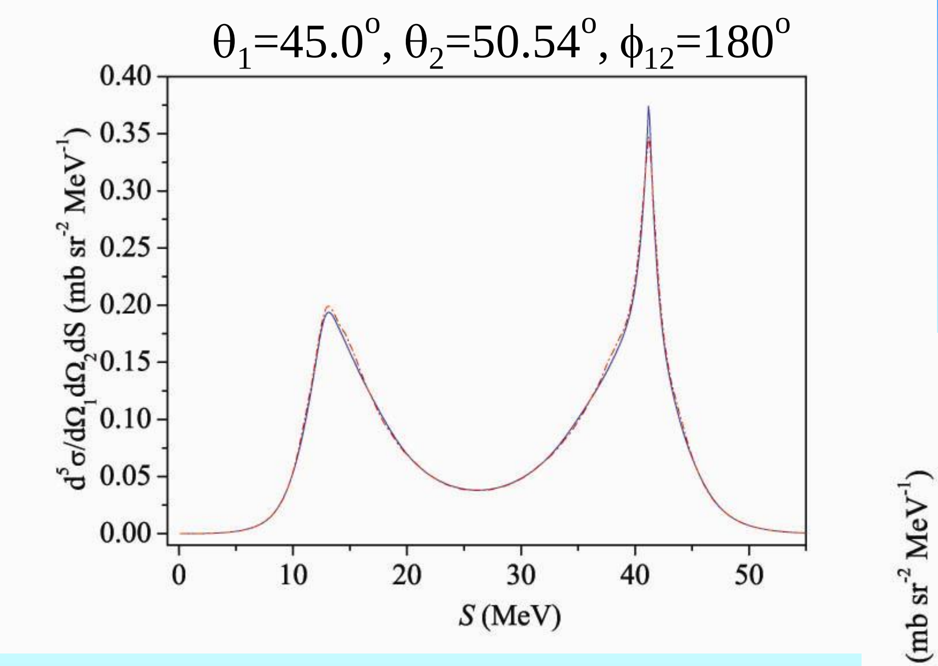


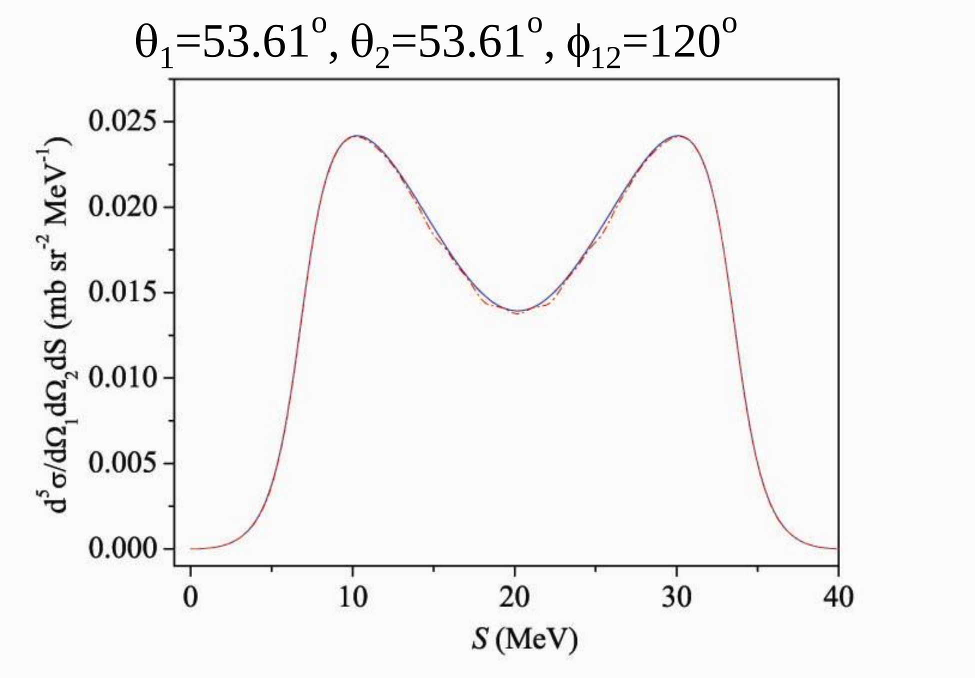
● Benchmark calculations (Friar et al., PRC 1995)

Wave-packet calculation for N=100x100

Wave-packet calculation for N=200x200

Three-body breakup cross sections n+d→n+n+p at E_{lab}=42 MeV



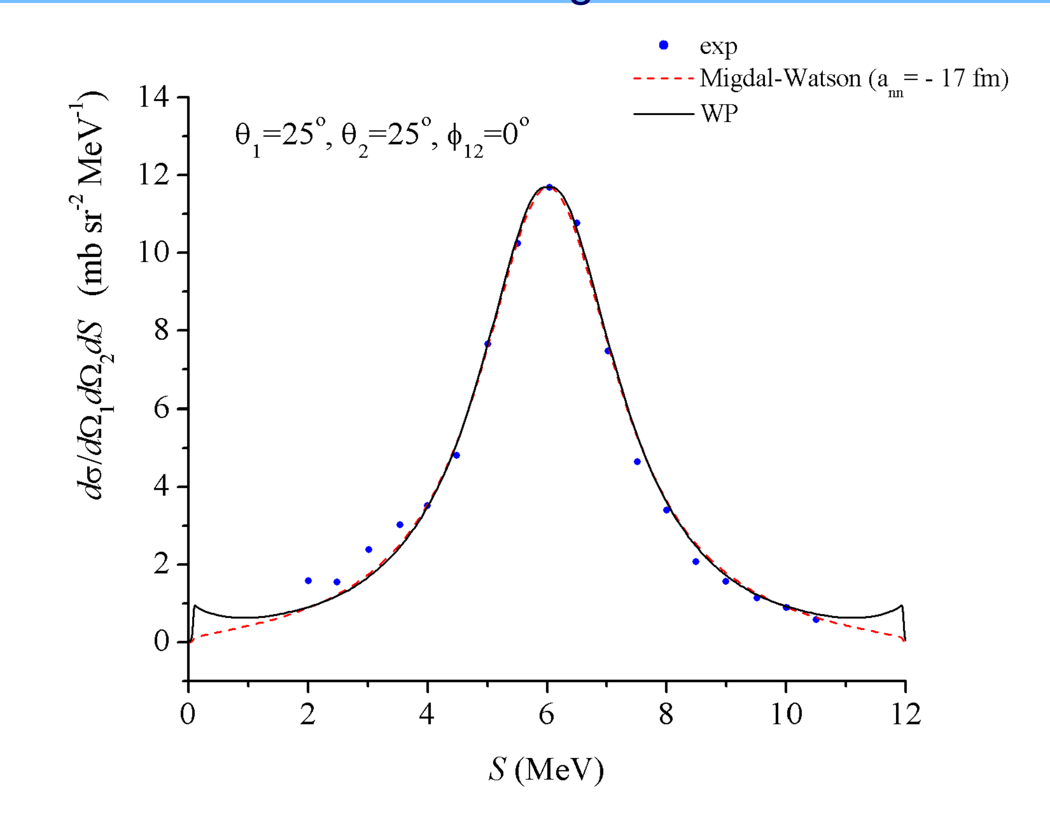


WP calculation (Rubtsova et al. PRC 2012)

Benchmark Faddeev calculation (Friar et al., PRC 1995)

Neutron-neutron scattering length problem

Two-neutron emission in final state interaction configuration



In the final state interaction kinematics, the breakup amplitude is defined by the two-body t-matrix

$$U_0(p,q) \sim t_1(p)$$

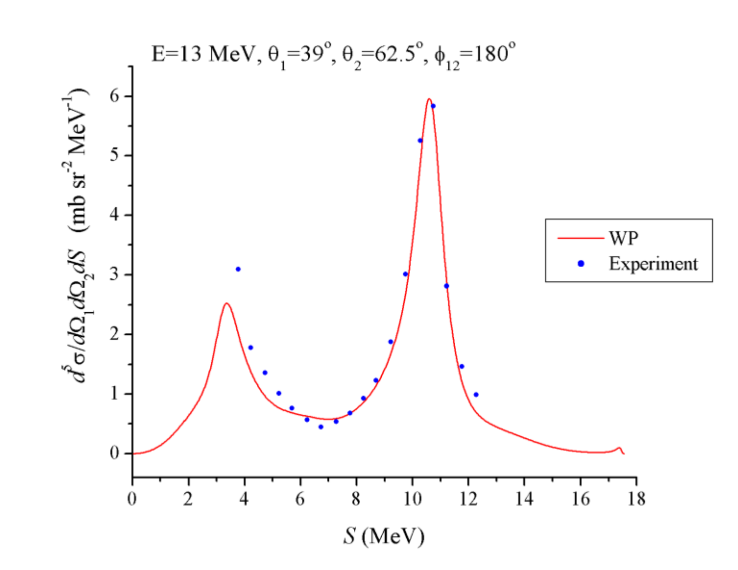
Migdal-Watson approximation

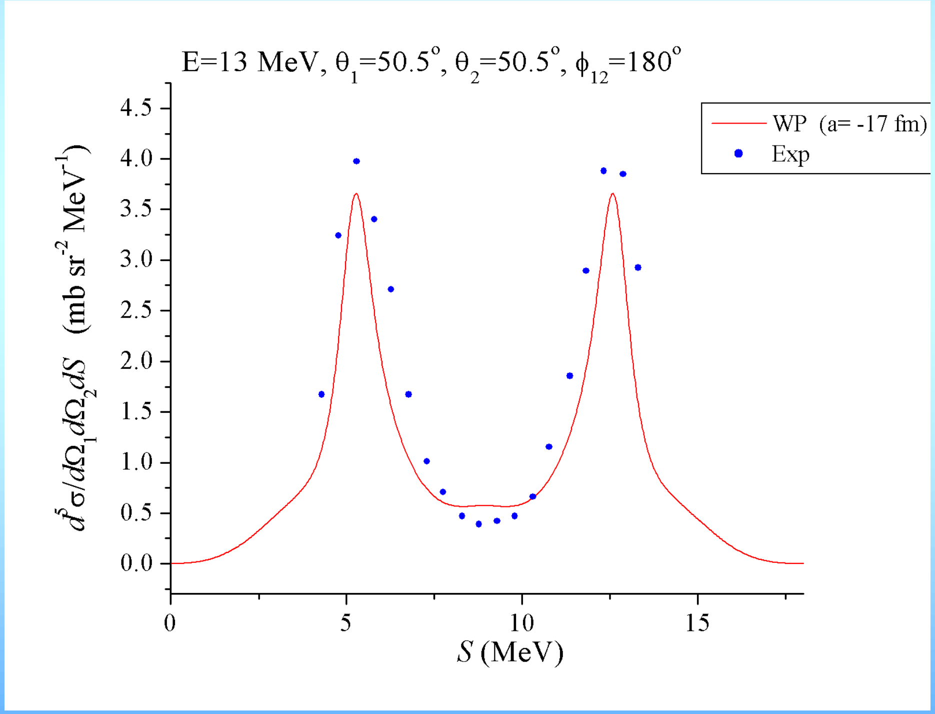
$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dS} \approx N k_s \left(\frac{1}{2} r_0\right)^2 \frac{p^2 + \left(1/r_0 + \sqrt{1/r_0^2 - 2/(r_0 a_{nn})}\right)^2}{p^2 + \left(-1/a_{nn} + r_0 p^2/2\right)^2}$$

a_{nn} the scattering length

r_0 effective range

Сечения n-d развала для сепарабельного потенциала

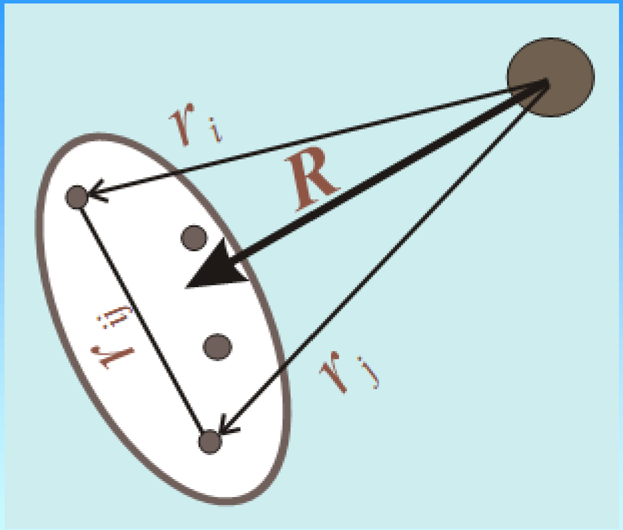




Динамическое описание прямых ядерных реакций

Рассеяние составной частицы на ядре

Гамильтониан системы имеет вид:



$$H = h_{\text{int}} + h_C(\mathbf{R}) + V_{\text{ext}}, \quad h_{\text{int}} = h_0 + \sum_{i<j} v_{ij}(r_{ij}),$$

$$V_{ext} = \sum_i v_{iA}(r_i)$$

Канальный гамильтониан $H_{ch} = h_{\text{int}} \oplus h_C(\mathbf{R})$

Пакетный базис строится из пакетных состояний для субгамильтонианов h_{int} и h_C

$$\left|Z_{p,k}\right\rangle = \left|z_p, x_k^C\right\rangle = \left|z_p\right\rangle \otimes \left|x_k\right\rangle$$

В таком базисе получается аналитическая аппроксимация для канальной резольвенты

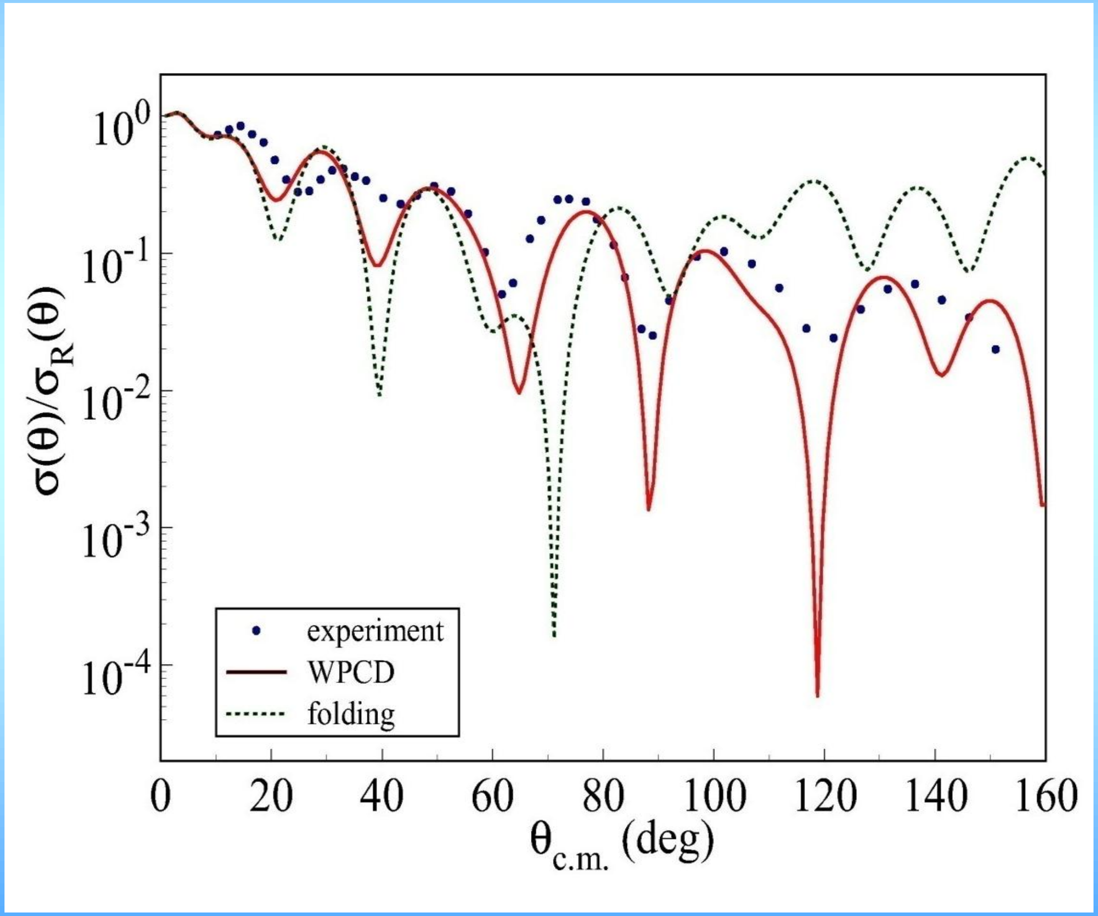
$$\mathbb{G}_{ch} \approx \sum_{p,k} G_{pk}(E) \left|Z_{pk}\right\rangle \left\langle Z_{pk}\right|$$

Амплитуда упругого рассеяния находится из матричного аналога уравнения Липпмана-Швингера

$$\mathbb{T} = \mathbb{V}_{ext} + \mathbb{V}_{ext} \mathbb{G}_{ch} \mathbb{T}$$

Elastic d+ ^{58}Ni scattering at E_d=21.6 MeV

(O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, PRC 76, 047601 (2007).)



Обоснование coupled-channel редукции

O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, PRC 84, 044002 (2011).

Метод связанных каналов

Если заменить полный набор состояний непрерывный спектр гамильтониана h_{int} на дискретный набор псевдосостояний, то разложение для полной трехчастичной волновой функции системы принимает вид:

$$\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R}) = \phi_0(\mathbf{r})\chi_0(\mathbf{R}) + \sum_{\alpha}\sum_{i}\phi_{\alpha i}(\mathbf{r})\chi_{\alpha i}(\mathbf{R}), \quad (2)$$

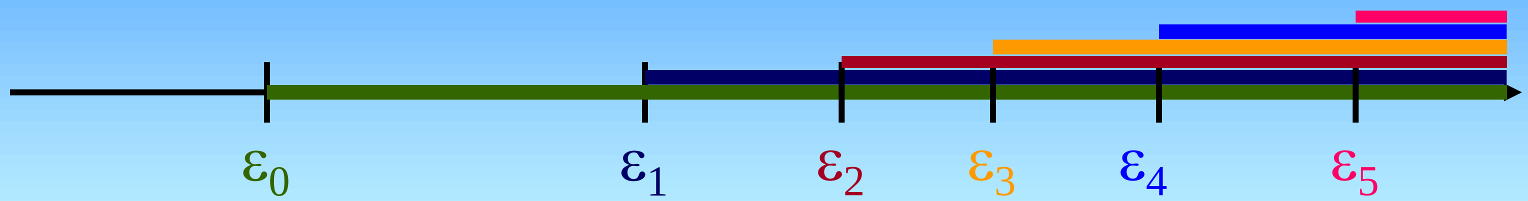
Здесь $\phi_{\alpha i}(\mathbf{r})$ состояния дискретизованного спектра с энергиями ε_i.

Уравнение Шредингера сводится к системе связи каналов:

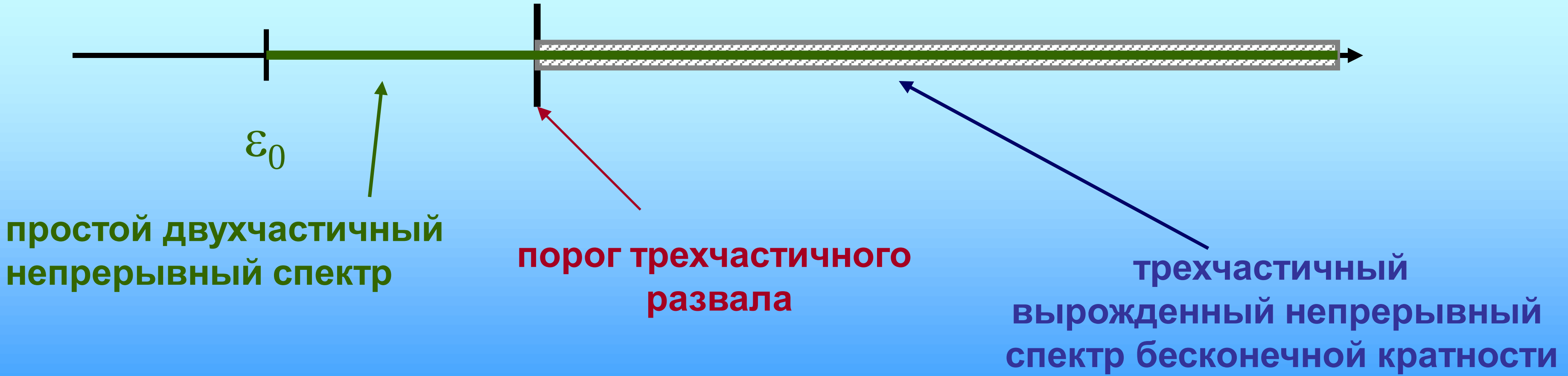
$$\left[h_0(\mathbf{R}) + V_{ii}^{\text{ext}}(\mathbf{R}) - (E-\varepsilon_i)\right]\chi_i(\mathbf{R}) = -\sum_{j\neq i} V_{ij}^{\text{ext}}(\mathbf{R})\chi_j(\mathbf{R}), \quad i = 0,..,N$$

$$\chi_i(R) \underset{R\to\infty}{\to} u^{(-)}(K_i,R)\delta_{i,0} - \sqrt{\frac{K_i}{K_0}}S_{i,0}u^{(+)}(K_i,R), \quad K_i = \sqrt{\frac{2m(E-\varepsilon_i)}{\hbar^2}}, \ i = 0,..,N$$

Спектр многоканального гамильтониана, используемого в CDCC подходе

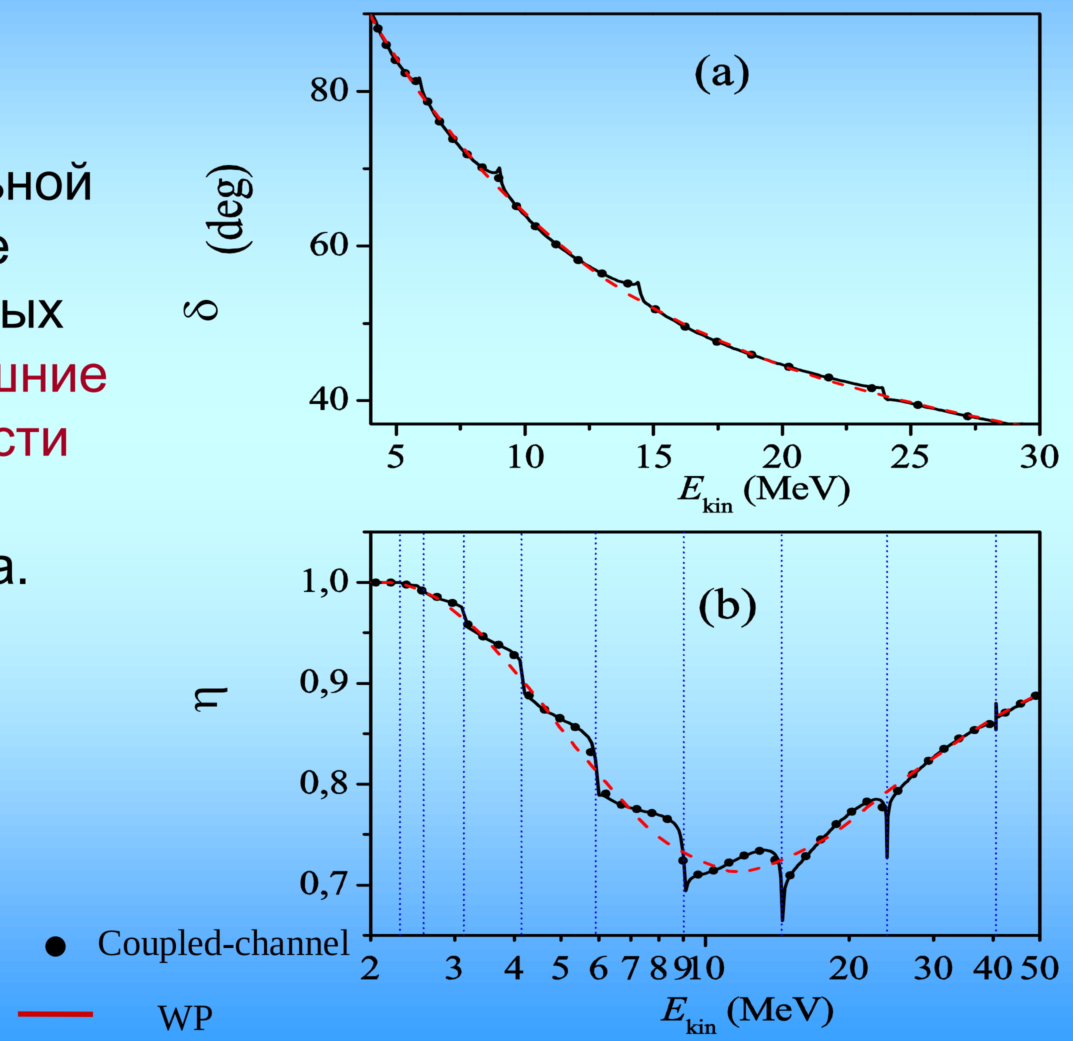


Исходный спектр трехчастичного канального гамильтониана



Парциальные фазовые сдвиги и параметры неупругости упругого рассеяния дейтронов на модельном ядре (случай вещественных потенциалов взаимодействия).

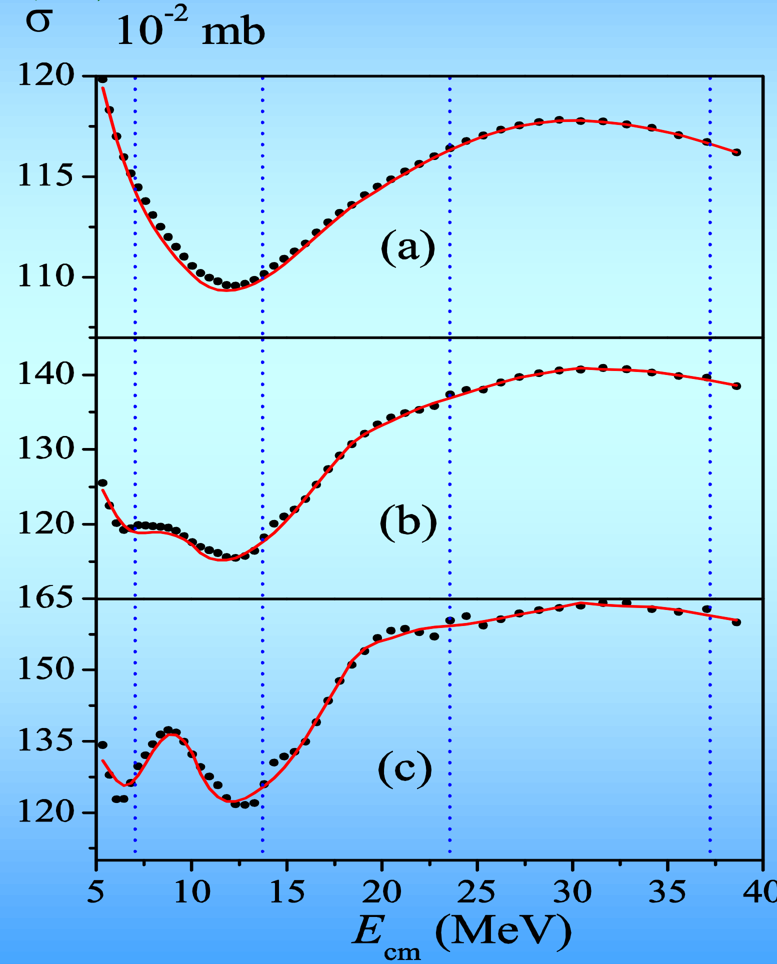
При многоканальной редукции энергетические зависимости наблюдаемых величин могут иметь лишние нефизические особенности вблизи пороговых точек многоканального спектра.



Сечения упругого d+^{16}O рассеяния с учетом полных мнимых частей нуклон ядерных потенциалов (a) и уменьшенных мнимых частей (b,c).

Однако, наличие мнимых частей потенциалов взаимодействия нуклонов с ядром значительно подавляет этот эффект.

Для реалистических систем многоканальная редукция обеспечивает практически точное решение!



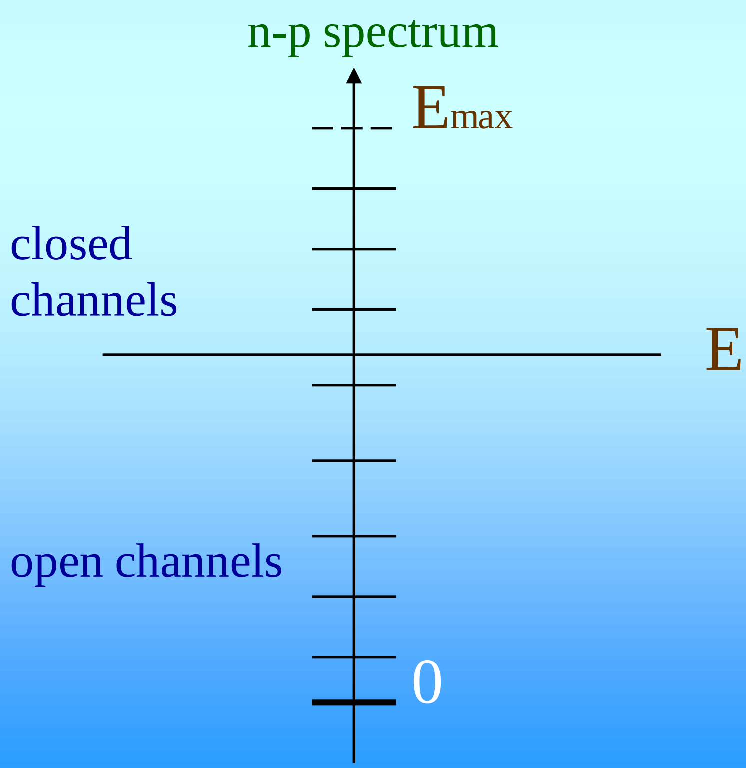
Elastic d+^{58}Ni scattering: calculations within the WPCD and CDCC methods

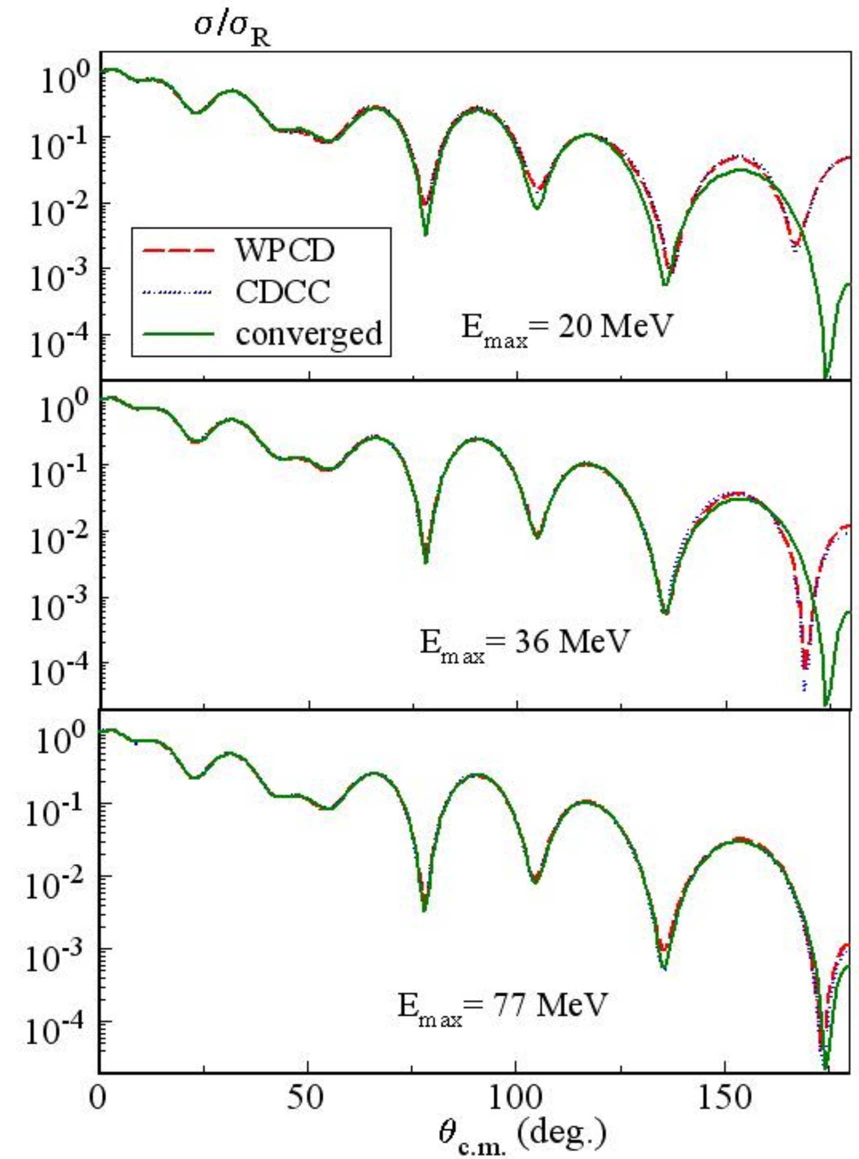
(O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, A.M.M. Moro, PRC 78, 034603 (2008))

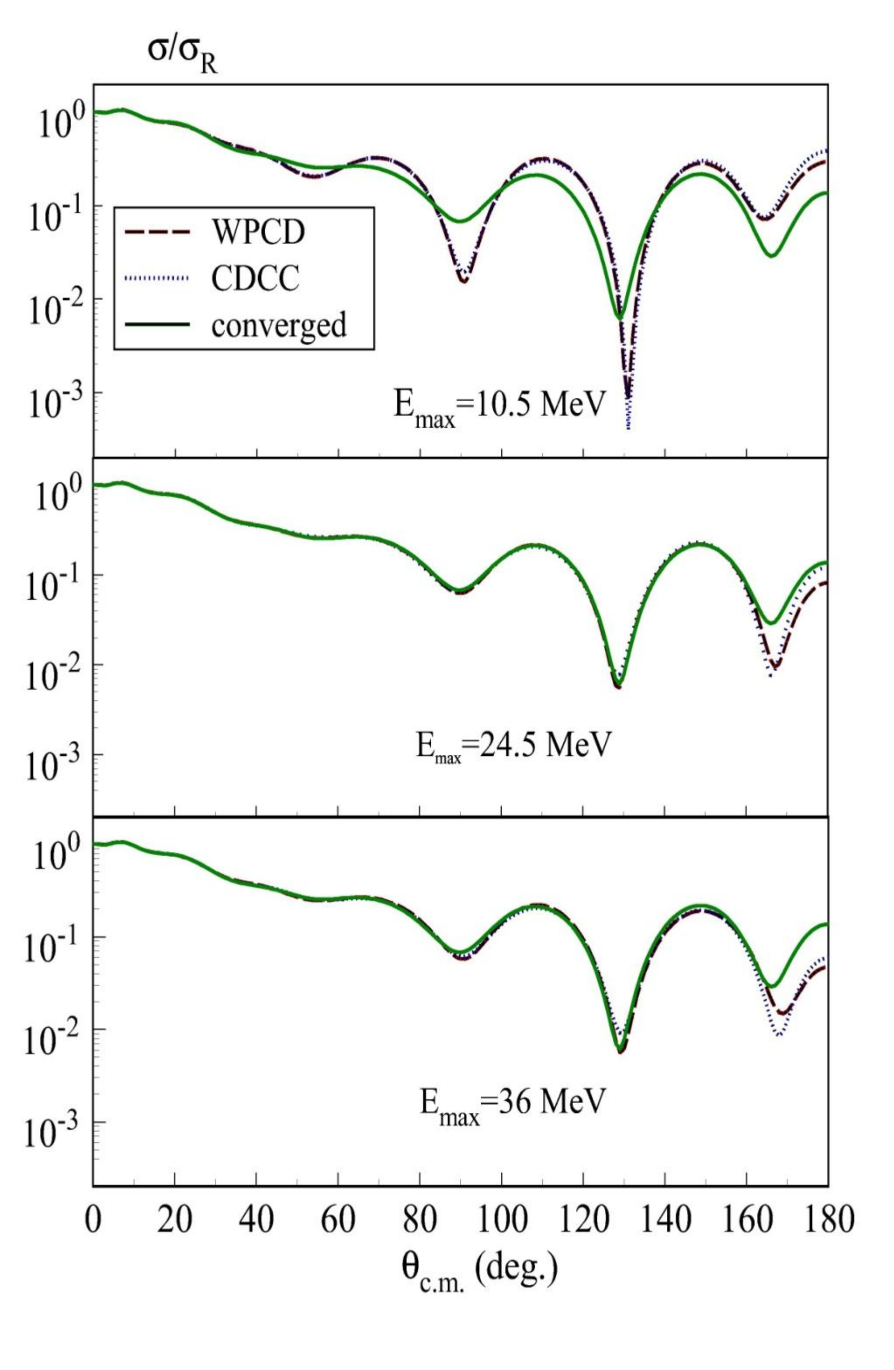
Study of a close channel influence on the elastic scattering amplitude

d+^{58}Ni elastic c.s. at E_d=21.6 MeV

(converged — Emax= 110 MeV)





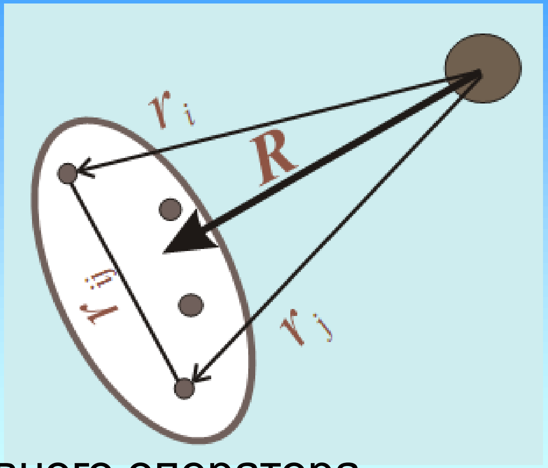


d+^{58}Ni elastic c.s. at Ed=12 MeV

converged — Emax= 77 MeV

Построение эффективных потенциалов взаимодействия составных частиц

$$H = h_{\text{int}} + h_C(\mathbf{R}) + V_{\text{ext}}, \quad h_{\text{int}} = h_0 + \sum_{i<j} v_{ij}(r_{ij}),$$



Рассматривается упругое рассеяние составной частицы в связанном состоянии $h_{\text{int}} \left| z_0 \right\rangle = \varepsilon_0 \left| z_0 \right\rangle$

$P = \left| z_0 \right\rangle \left\langle z_0 \right|, \; Q = 1 - P$ проекторы

Формально можно записать выражение для эффективного оператора взаимодействия

$$U = -PV_{ext} Q G_Q Q V_{ext} P$$

Резольвента в ортогональном подпространстве

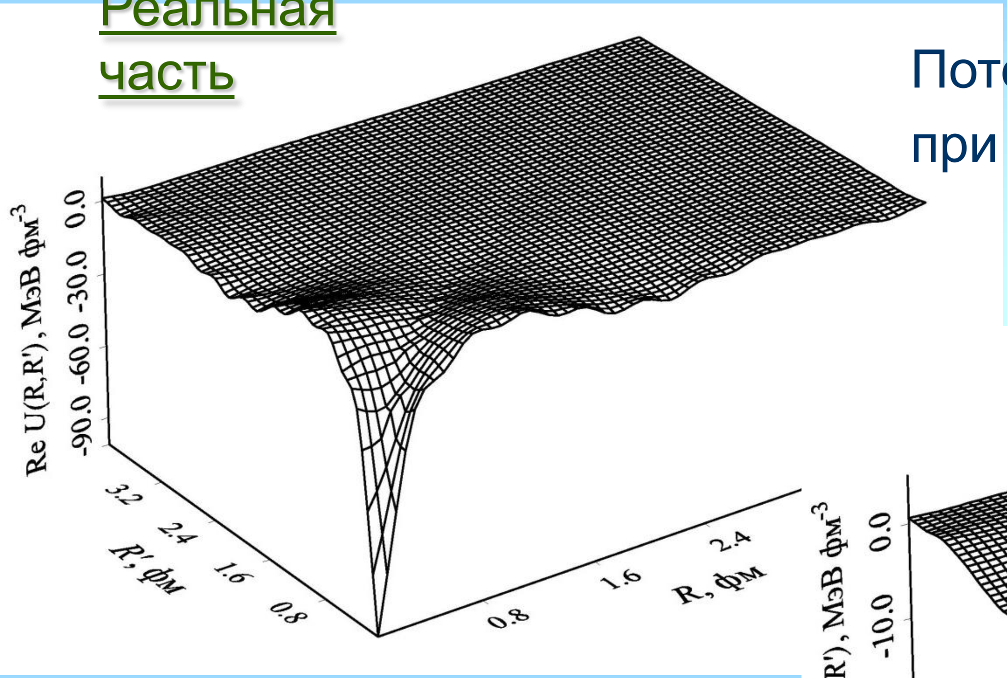
$$G_Q(E) = \left[E + i0 - QHQ \right]^{-1}$$

Проблема нахождения этого оператора еще более сложная, чем решение исходной задачи с гамильтонианом H. Однако в пакетной технике этот оператор легко находится в матричном виде.

Таким образом, полученный в пакетном представлении оператор эффективного взаимодействия составной частицы с мишенью имеет вид:

$$U^{\Lambda\mathrm{M}}(E,\mathbf{R},\mathbf{R}') = \sum_{L,l}\sum_{L',l'}\sum_{i,j}\sum_{i',j'} G_{ij,i'j'}^{lL.l'L'}(E) B_{ij}^{lL*}(R) B_{i'j'}^{l'L'}(R') Y_{\Lambda}^{\mathrm{M}*}\left(\widehat{\mathbf{R}}\right) Y_{\Lambda}^{\mathrm{M}}\left(\widehat{\mathbf{R}'}\right)$$

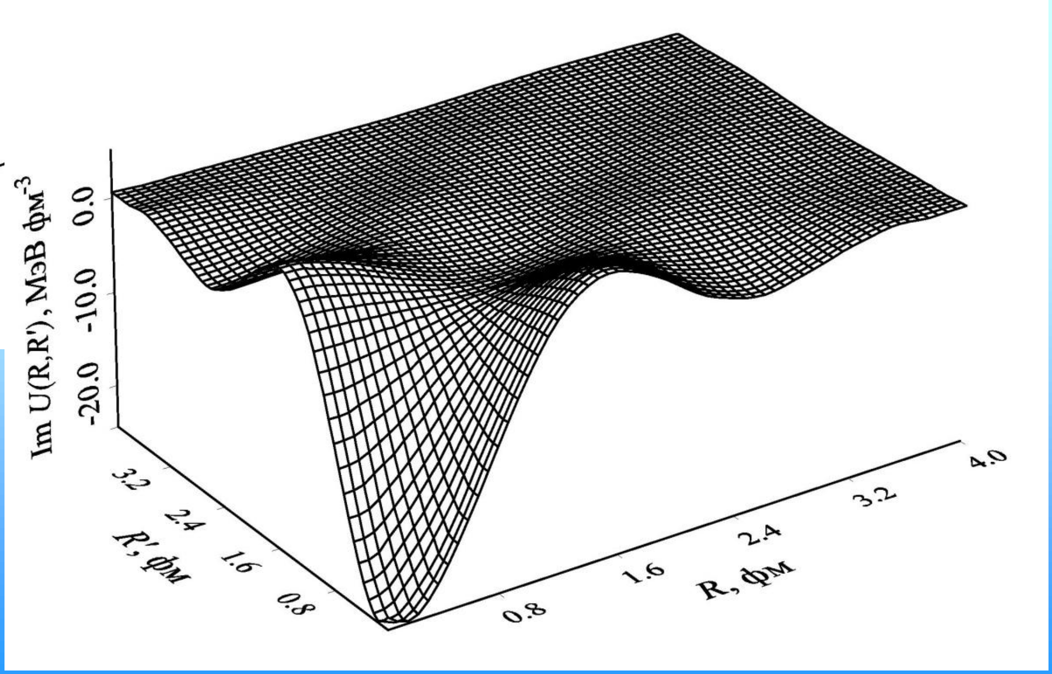
Реальная часть



Потенциал Фешбаха для d+Ni задачи при энергии дейтронов E_{d}=80 MeV

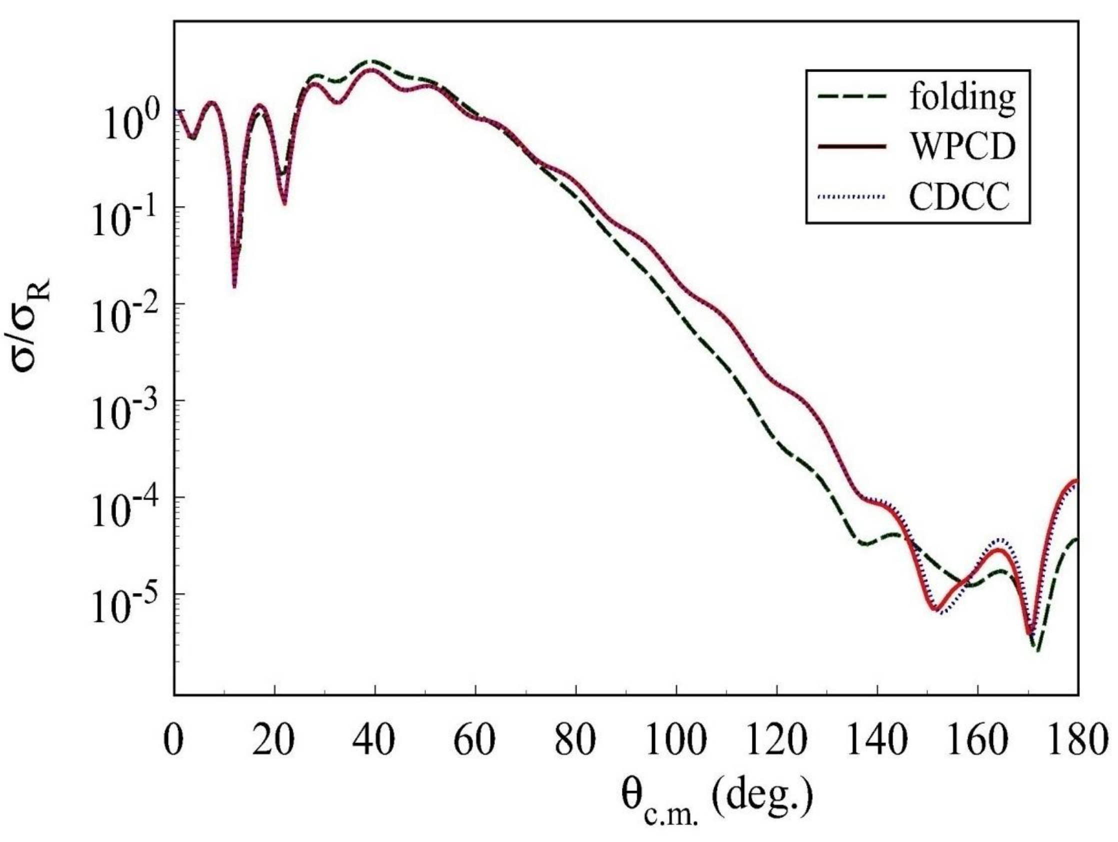
$\Lambda=0$

Мнимая часть



Application of the Feshbach approach

d+ ^{58}Ni elastic cross section at Ed=80 MeV



To approximate well an elastic amplitude for the folding potential, the wave-packet basis of a dimension N=500 is required.

To approximate well the Feshbach non-local operator, the basis of a dimension N=100 is quite enough.

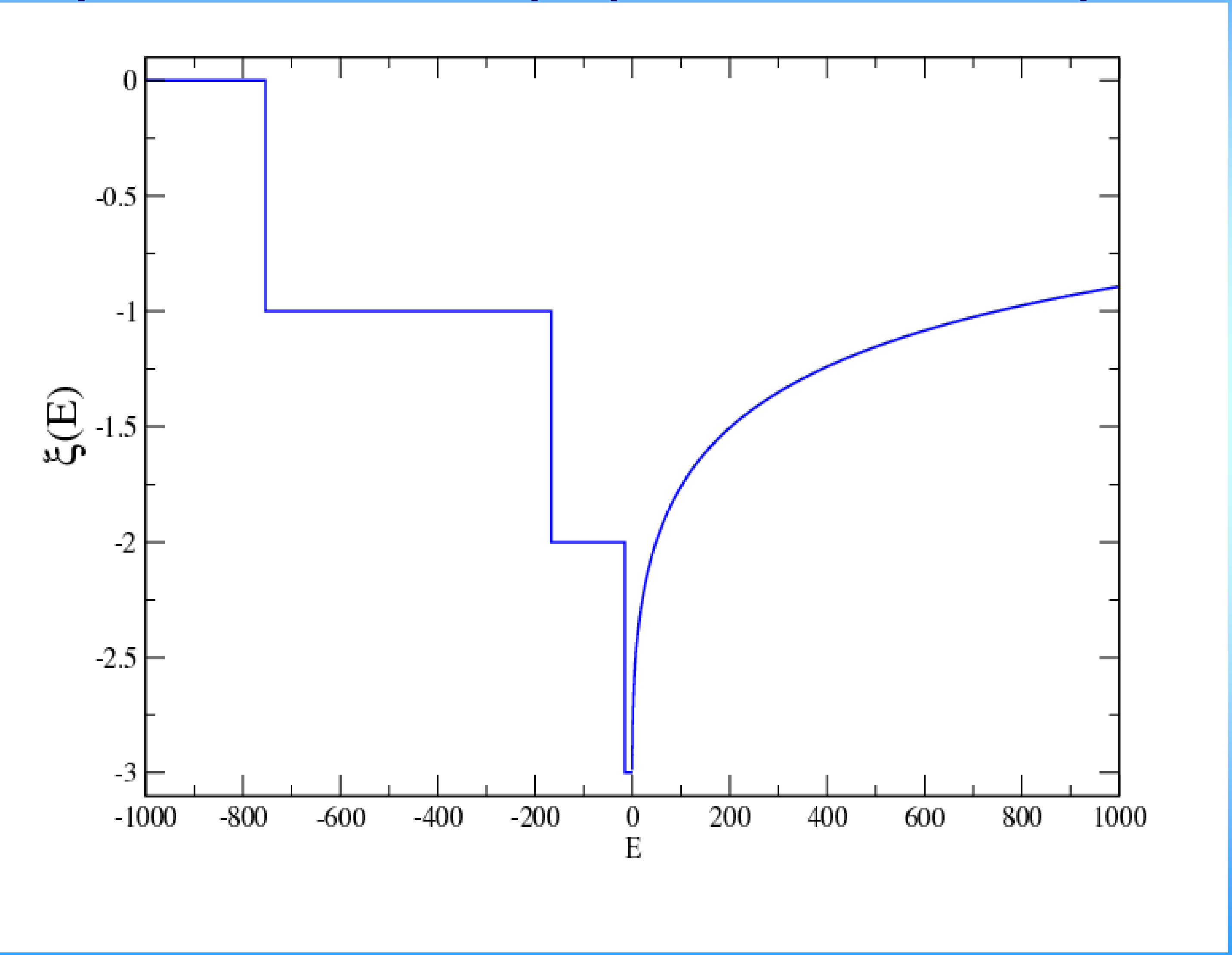
Вычисление потенциала Фешбаха требует базиса гораздо меньшей размерности, чем прямое решение исходной трехчастичной задачи рассеяния. Это позволяет учесть различные промежуточные каналы неупругого рассеяния, такие, например, как возбуждение ядра-мишени.

Кроме прецизионного описания нуклон-ядерного рассеяния, формализм потенциал Фешбаха можно использовать например для описания

- NN рассеяния с учетом рождения π, $\pi\pi$, $\pi\pi\pi$ …;
- Рассеяния электронов на атомах выше порогов двух-, трех- … электронной эмиссии.

Метод дискретных спектральных сдвигов. Решение квантовых задач рассеяния без уравнений.

Функция спектрального сдвига для дискретного и непрерывного спектров



Связь между ФСС и спектральной плотностью

Спектральная плотность в области дискретного спектра:

$$\rho_b(E) = \sum_{n=1}^{N_b} \delta(E - E_n)$$

E_n – собственные значения энергии.

Спектральная плотность в области континуума - Continuum level density (CLD):

$$\Delta(E) \equiv \rho(E) - \rho_0(E) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\left[\mathrm{Tr}\left(G(E) - G_0(E)\right)\right]$$

Связь между CLD и фазой рассеяния:

$$\Delta(E) = \frac{1}{\pi} \frac{d\delta(E)}{dE}$$

В этом смысле ФСС можно понимать как «интегральную плотность состояний»:

$$\xi(E) = -\int_{-\infty}^{E} dE'\left[\rho_B(E') + \Delta(E')\right]$$

Quasi-continuous spectrum (I.M. Lifshits, 1947)

The family of operators with quasi-continuous spectrum $H_0^{(\alpha)}$
with the small parameter α

$$E_j^0(\alpha) = f(j\alpha) + o(\alpha), \quad j = 1,\mathrm{K}$$

$$D_j^{(\alpha)} \equiv E_{j+1}^0(\alpha) - E_j^0(\alpha) = \alpha \left.\frac{df(u)}{du}\right|_{u=j\alpha} + o(\alpha), \; j = 1,\mathrm{K}$$

The eigenvalues for quasi-continuous spectrum of the total Hamiltonian

$$H = H_0 + V$$

are related to the fee ones by the general spectral function
(which is unique for initial free and total Hamiltonians with
continuous spectra, i.e. this function does not depend on the discretization
parameter α).

$$E_j(\alpha) = E_j^0(\alpha) + \xi\left(E_j^0\right) D_j^{(\alpha)} + O(\alpha), \; j = 1,\mathrm{K}$$

Вычисление многоканальной S-матрицы без решения уравнений

O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, A. Faessler, Phys. Rev. C 81, 064003 (2010).

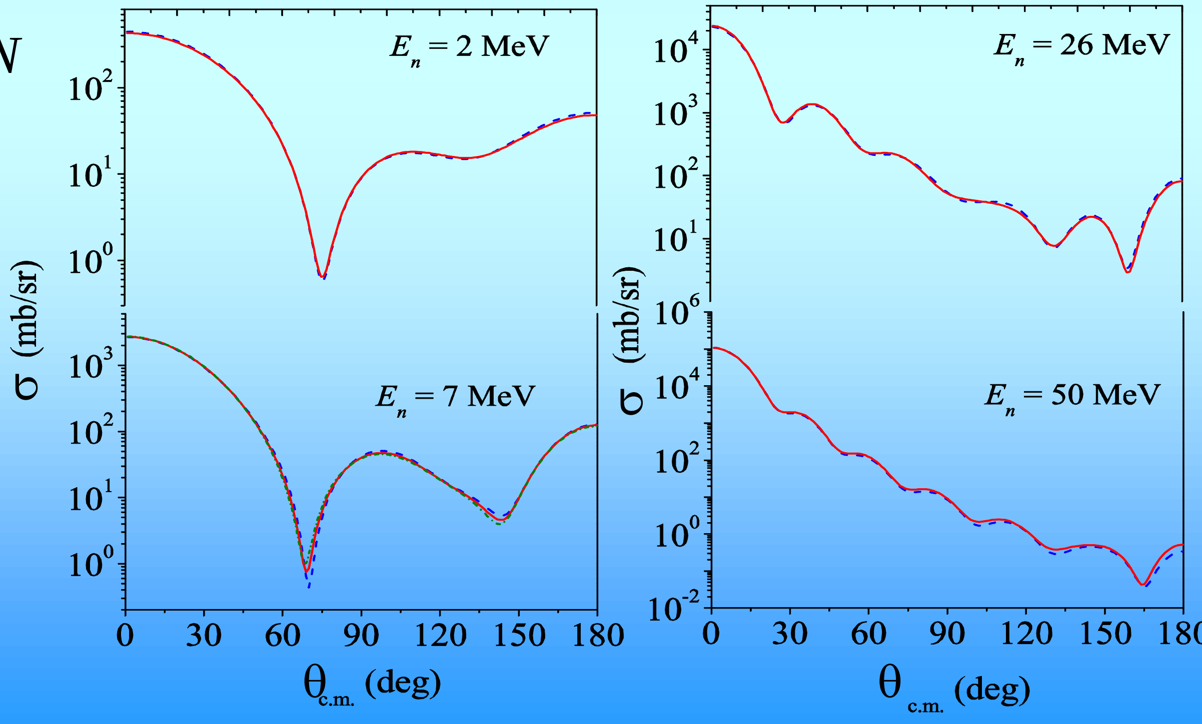
Дискретная версия теории функции спектрального сдвига, позволяет находить наблюдаемые в задачах рассеяния прямо из сравнения дискретизованных спектров свободного и полного гамильтонианов системы.

Формула для определения парциальных фазовых сдвигов

$$\delta(E_j) \approx -\pi \frac{E_j - E_j^0}{D_j}, \; j = 1, \ldots, N$$

При использовании пакетного базиса задача рассеяния для широкого диапазона энергий решается на основе однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана.

Сечения рассеяния n+Fe (нелокальный потенциал Перей-Бака)



Гамильтониан многоканальной задачи:

$$H_{\alpha\beta} = H_0^{\alpha} + V_{\alpha\beta}$$

Теория ФСС не позволяет определить отдельные элементы многоканальной S-матрицы, а только полную сумму собственных фаз

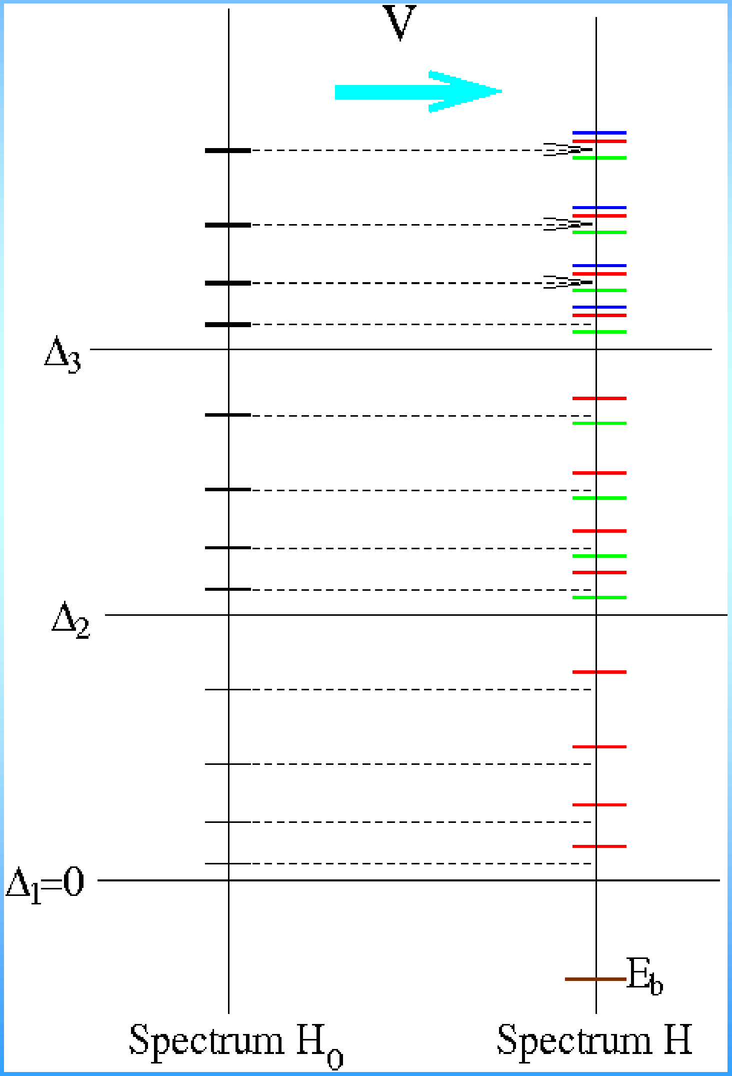
$$\det S(E) = \exp\left(2i\sum_{\kappa}\delta^{\kappa}(E)\right) \Rightarrow \xi(E) = -\frac{1}{\pi}\sum_{\kappa}\delta^{\kappa}(E)$$

Также в многоканальном случае возникают проблемы с использованием L2 представления.
Основная проблема при переходе к многоканальной задаче связана с тем, что спектр гамильтониана вырожден (при одной энергии получается несколько решений, отвечающих различным граничным условиям). В дискретизованном представлении такого вырождения нет.
Поэтому не понятно, как трактовать получающиеся псевдосостояния.

Многоканальные псевдосостояния

Многоканальный дискретизованный спектр свободного гамильтониана должен быть вырожден.

Тогда при добавлении взаимодействия происходит расщепление уровней на серии, кратность которых совпадает с кратностью спектра. Вместо единственной ФСС здесь можно определить набор ФСС для каждой ветви спектра.



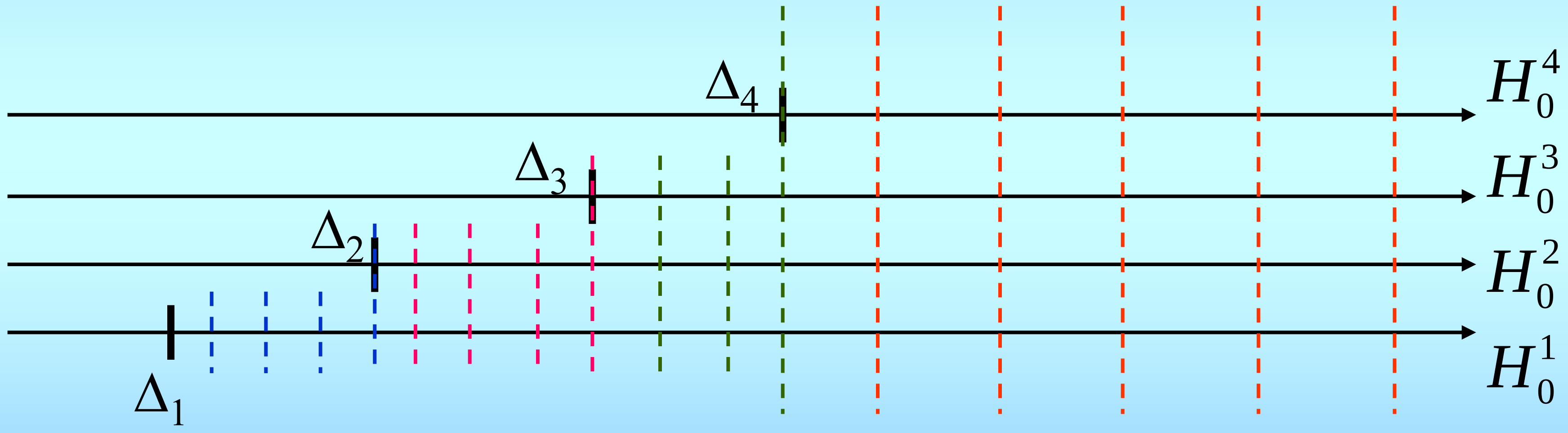
Собственные фазы многоканальной задачи

$$\delta^{(\kappa)} = -\pi\xi^{(\kappa)} \Rightarrow \delta^{(\kappa)}(E_j^0) \approx -\pi \frac{E_j^{(\kappa)} - E_j^0}{D_j}$$

Здесь используется формализм представления собственных каналов (Eigen channel reaction theory
M. Danos, W. Greiner, 1966)

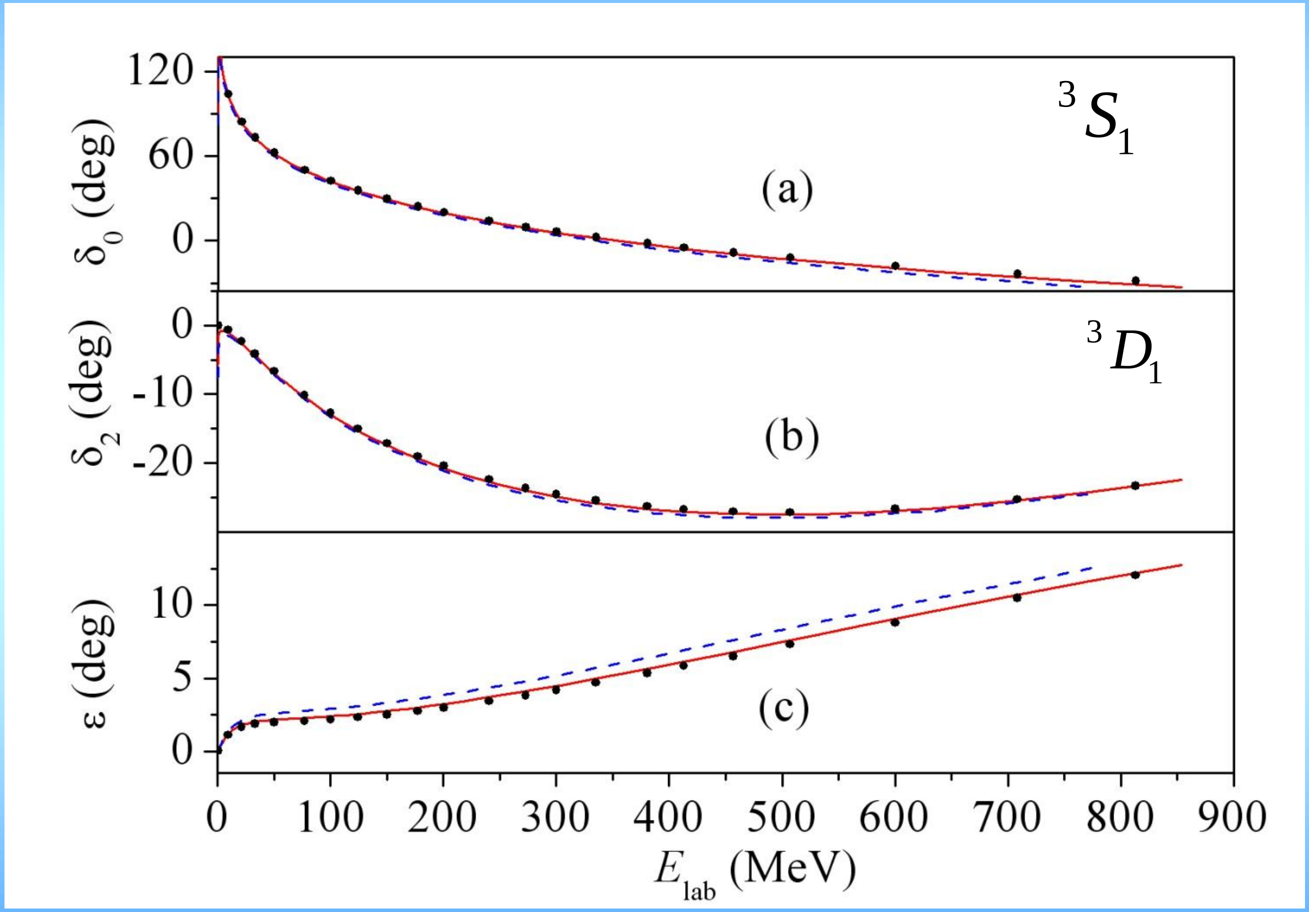
Многоканальный базис свободных волновых пакетов

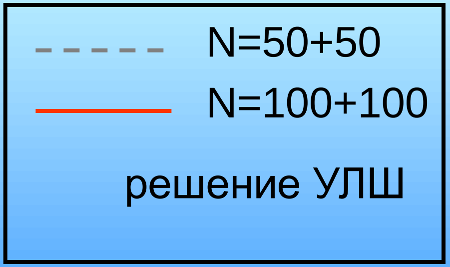
Для того, чтобы построить дискретизованный спектр многоканального свободного гамильтониана, собственные значения которого имеют нужную степень вырождения, очень удобно использовать пакетный базис, поскольку в нем параметры дискретизации можно задавать произвольно.



$$\left| x_i^{(\nu)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \int_{q_{i-1}}^{q_i} \left| \psi_0^{(\nu)} \left(q - \sqrt{2\Delta_\nu} \right) \right\rangle dq$$

NN рассеяние с Московским потенциалом взаимодействия



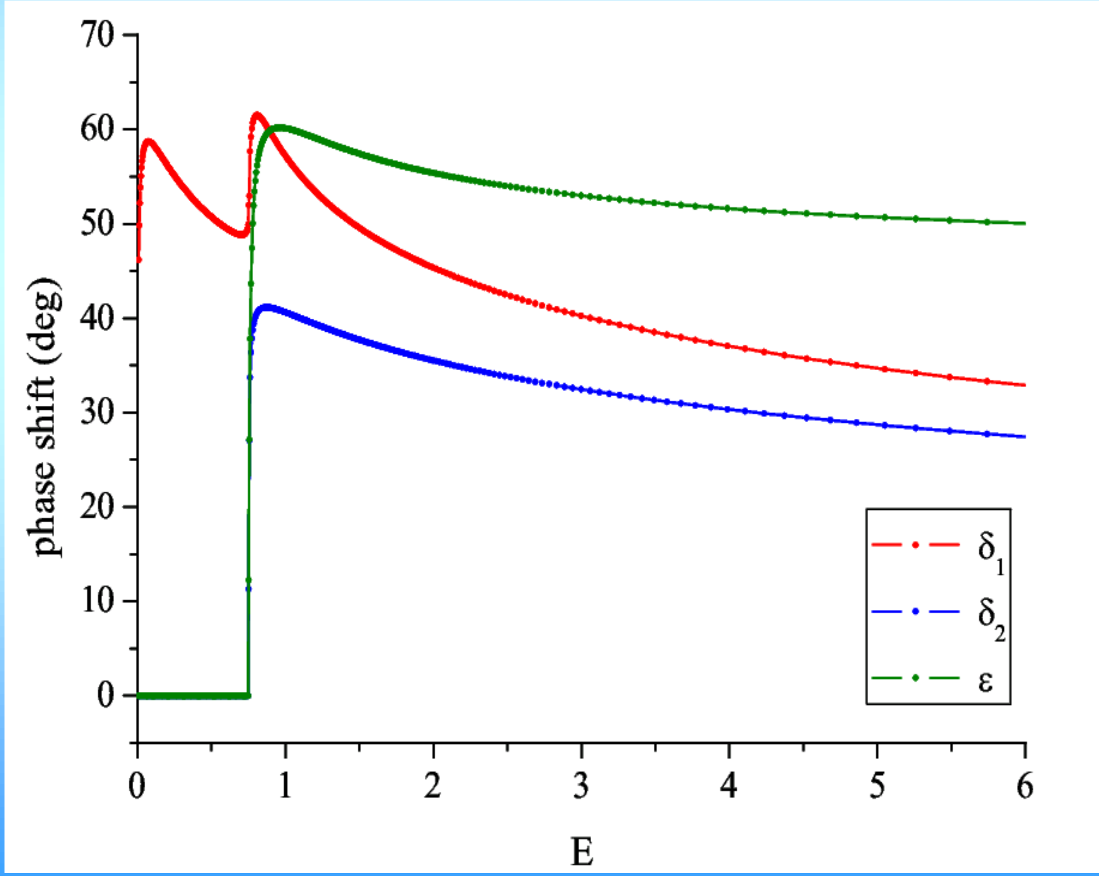


Для широкого диапазона энергий фазовые сдвиги и параметр смешивания найдены из однократной диагонализации матрицы двухканального гамильтониана

Расчеты для модельного e-H рассеяния

(Письма в ЖЭТФ, **90**, 402 (2009))

Собственные фазовые сдвиги δ_1 и δ_2и параметр смешивания ε



Модель Burke

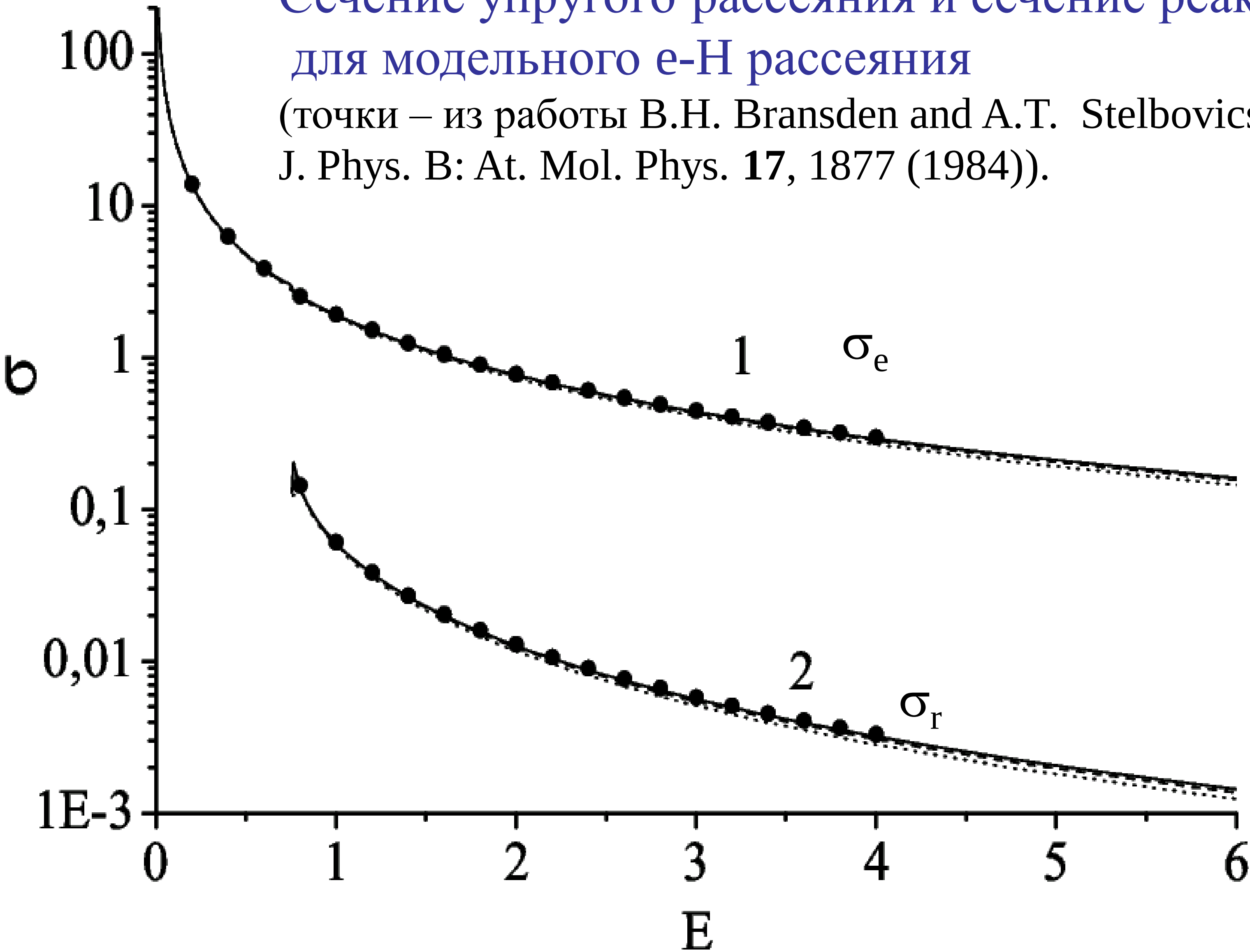
$V_{11}=V_{22}= -1.5\exp(-r)/r$

$V_{12}= -\ 0.25\exp(-r)$,

$\Delta_2=0.75$

Сечение упругого рассеяния и сечение реакции для модельного e-H рассеяния

(точки – из работы B.H. Bransden and A.T. Stelbovics, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, 1877 (1984)).

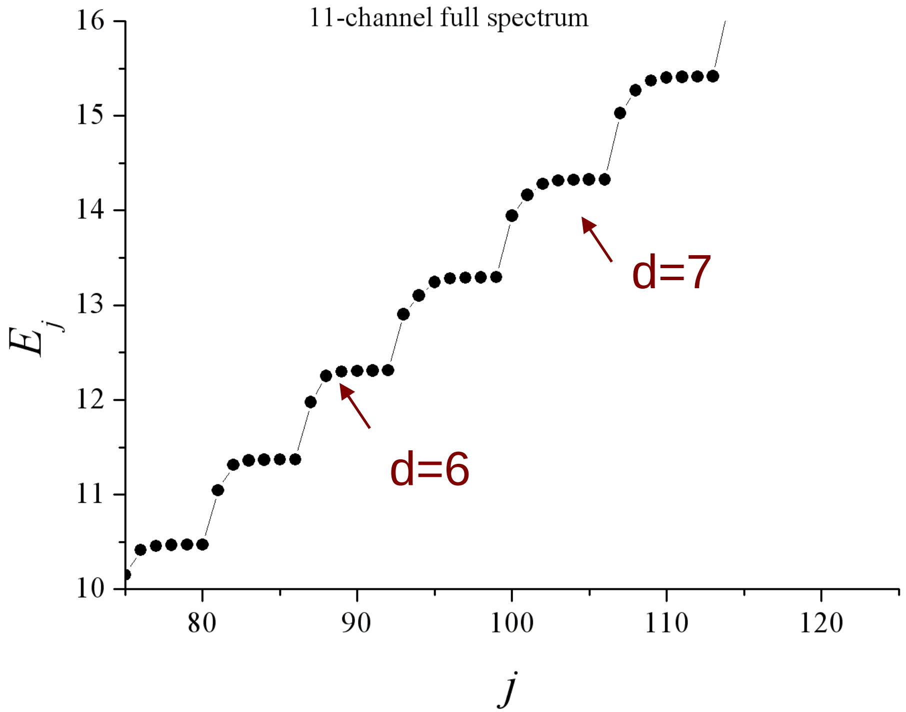


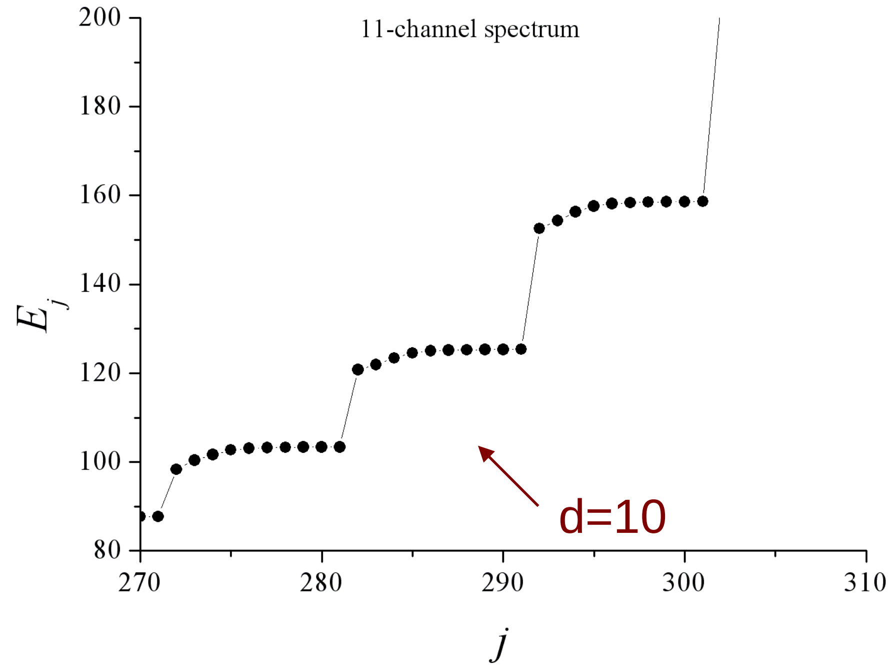
Модельная задача d+A рассеяния

Двухчастичный гамильтониан h_{np} дискретизуется в гауссовом базисе размерности K=11.

$$V_{nA}(r) = V_{pA}(r) = -V_0 \exp(-\gamma r^2),$$
$$V_0 = 15\,\mathrm{MeV},\ \gamma = 0.44\,\mathrm{fm}^{-2}$$

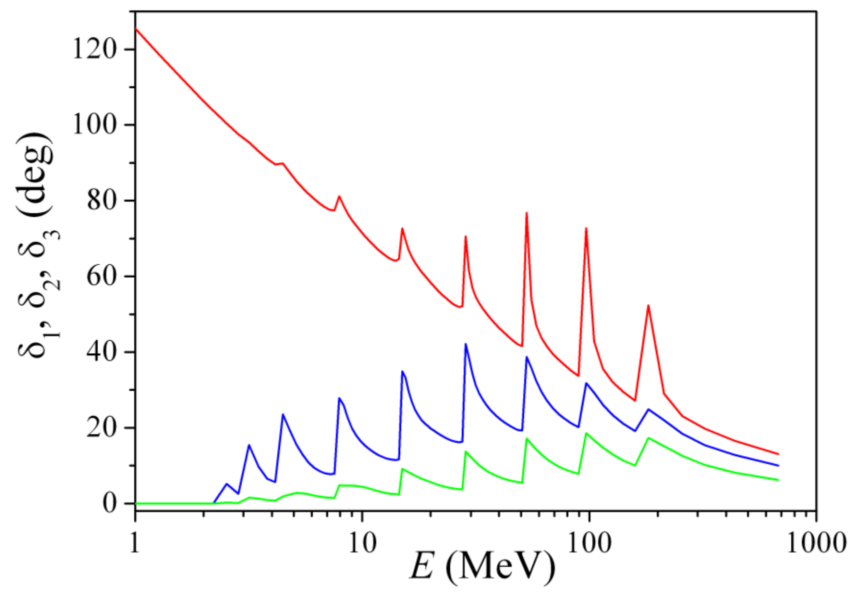
Спектр собственных состояний полного трехчастичного гамильтониана

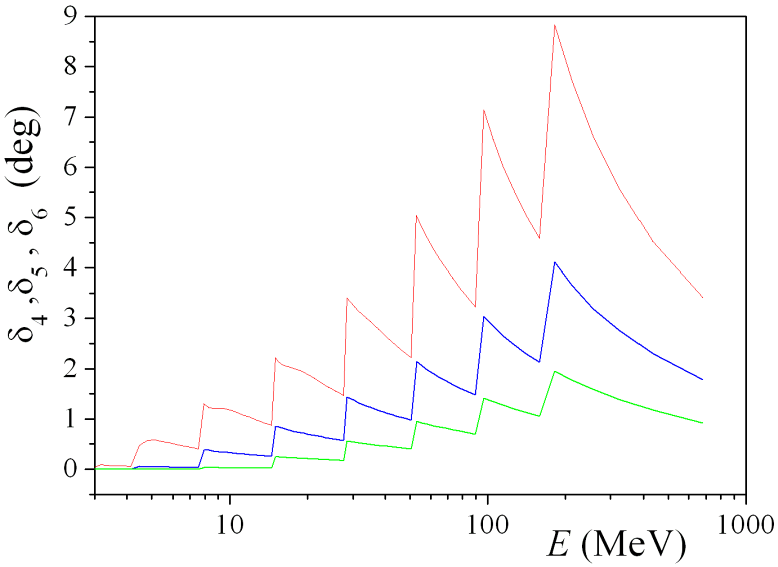




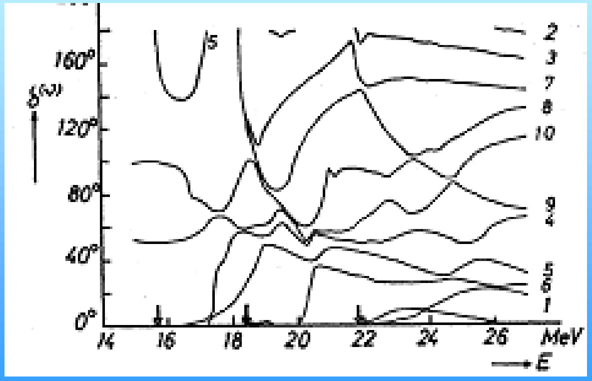
В зависимости от степени вырождения исходного непрерывного спектра в различных областях энергий в спектре полного гамильтониана содержатся серии состояний разной размерности

Собственные фазовые сдвиги рассматриваемой 11-канальной задачи



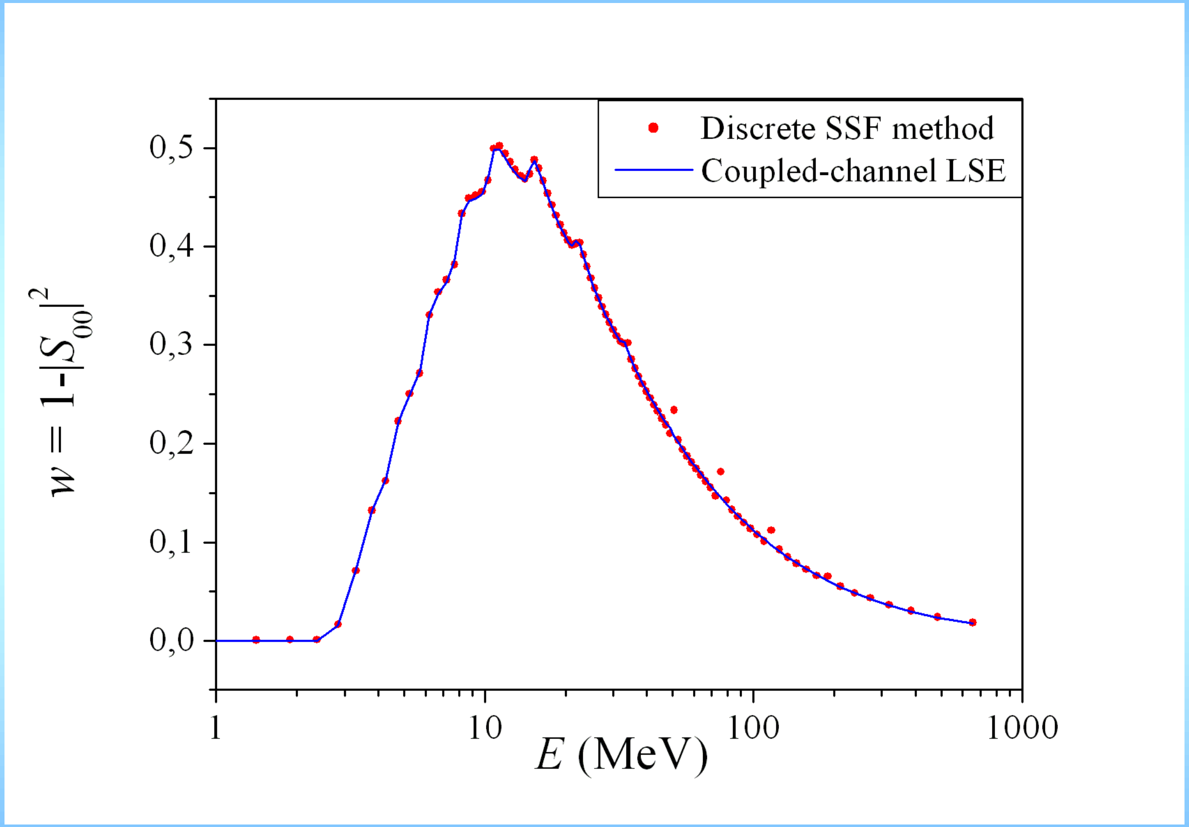


Собственные фазы из работы
Даноса и Грайнера



Модельная задача рассеяния дейтрона на ядре

Вероятность развала при упругом S-волновом рассеянии дейтрона на модельном ядре.



Результаты получены на основе однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана и на основе решения уравнения Липпмана-Швингера в схеме связи каналов (для каждой энергии отдельно).

Основные результаты.

1. Разработан формализм стационарных волновых пакетов, позволяющий формулировать задачи стационарной квантовой теории рассеяния в терминах нормируемых состояний. Получены конечномерные аппроксимации операторов теории рассеяния, в том числе резольвент полного и свободного гамильтонианов, а также волновых операторов.
2. На основе развитого формализма разработан метод пакетной дискретизации континуума, позволяющий находить наблюдаемые в задачах рассеяния из матричных аналогов интегральных уравнений. Метод успешно опробован для разных типов взаимодействия между частицами: локальных и нелокальных, комплексных оптических, кулоновского взаимодействия.
3. Создан 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 и развала в трехнуклонной системе.
4. На основе развитого метода создан общий микроскопический подход к описанию прямых ядерных реакций. Подход успешно применен для описания упругого рассеяния и развала составных двухфрагментных частиц на ядрах.

Основные результаты

5. На основе проекционного формализма Фешбаха развита техника построения эффективных нелокальных потенциалов взаимодействия между составными частицами.
6. Изучена применимость многоканальной редукции при решении задач рассеяния с оптическими потенциалами взаимодействия.
7. Развит метод дискретных спектральных сдвигов, позволяющий находить наблюдаемые в многоканальных задачах рассеяния при многих энергиях одновременно на основе однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана системы. Впервые предложена корректная трактовка многоканальных псевдосостояний.

Возможные направления обобщения пакетной техники

Описание резонансов в многоканальных и малочастичных системах.

Дискретная версия нестационарной теории рассеяния.

Дискретизация релятивистских уравнений Бете-Солпитера.

Квантовая статистика.

Применение техники дискретизации к фейнмановскому формализму континуальных интегралов.

Список публикаций

1. O.A. Rubtsova, V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, A. Faessler, *Three-body breakup within the fully discretized Faddeev equations*, Phys. Rev. C **86**, 034003 (2012).

2. 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).

3. O.A. Rubtsova, V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, 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).

4. O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Quantum scattering theory on the momentum lattice*, Phys. Rev. C **79**, 064602 (2009).

5. V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, *Solving three-body scattering problem in the momentum lattice approximation*, Phys. Rev. C **79**, 034001 (2009).

6. O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, A.M. Moro, *Continuum discretization methods in a composite particle scattering off a nucleus: Benchmark calculations*, Phys. Rev. C **78**, 034603 (2008).

7. V.I. Kukulin, 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).

8. В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Современные методы теоретического описания многочастичного рассеяния и ядерных реакций*, ЯФ **75**, 1447 (2012).

9. В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, О.А. Рубцова, *Дискретное представление функции спектрального сдвига и многоканальная S-матрица*, Письма в ЖЭТФ **90**, 443-447 (2009).

10. О.А. Рубцова, В.И. Кукулин, *Пакетная дискретизация континуума - путь к практическому решению многочастичных задач рассеяния*, ЯФ **70**, 2077 (2007).

Список публикаций

11. В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, О.А. Рубцова, *Метод пакетной дискретизации континуума для решения трехчастичной задачи рассеяния*, ТМФ **150**, 474 (2007).
12. О.А. Рубцова, В.И. Кукулин, *Новый подход к решению задачи рассеяния составной частицы в поле ядра*, ЯФ **64**, 1769 (2001).
13. О.А. Рубцова, В.И. Кукулин, *Функция Грина и матрица рассеяния в дискретном осцилляторном базисе*, ЯФ **64**, 1882 (2001).
14. В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Формулировка квантовой теории рассеяния в терминах собственных дифференциалов (стационарных волновых пакетов),* ТМФ **130**, 64 (2002).
15. В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Дискретная квантовая теория рассеяния*, ТМФ **134**, 459 (2003).
16. V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, *Efficient technique for solving few-body scattering problems by wave-packet continuum discretisation*, Few-body Systems Supplement **14**, 211 (2003).
17. В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Конечномерные аппроксимации операторов теории рассеяния в представлении волновых пакетов*, ТМФ **139**, 291 (2004).
18. В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, *Решение задачи рассеяния заряженных частиц с помощью пакетной дискретизации континуума*, ТМФ **145**, 395 (2005) .
19. О.А. Рубцова и др., *Микроскопическая теория ядерных реакций на основе техники волновых пакетов*, Известия РАН (сер. физич.) **73**, 798-801 (2009)
20. O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, *Quantum scattering theory on the momentum lattice*, Physics of Particles and Nuclei **41**, 1123 (2010).

Доклады на конференциях

- **II Всероссийская конференция ФЭЧАЯ (МИФИ, 2001).**
- **XVIII European Conference on Few-Body Problems in Physics (Ljubliana, 2002).**
- **Workshop on Computational Physics Dedicated to the Memory of Stanislav Mercuriev (St. Petersburg, 2003).**
- **Ядро-2008 (Москва, 2008).**
- **19th International Conference on Few-Body Problems in Physics (Bonn, 2009).**
- **Bogolybov Conference on Problems in Theoretical and Mathematical Physics (Dubna, 2009).**
- **Ядро-2010 (С.-Петербург, 2010).**
- **Ядро-2011 (Саров, 2011).**
- **Ядро-2012 (Воронеж, 2012)**
- **20th International Conference on Few-Body Problems in Physics (Fukuoka, 2012)**
- **Few-Body Systems, International Workshop (Dubna, 2012)**

Гранты и стипендии

2006, 2008, 2009, 2011 – стипендия МГУ для талантливых молодых ученых.
2001-2011 – участие в проектах РФФИ, в том числе международных.
2008-2009 – грант Президента РФ для молодых кандидатов наук.
2012 конкурс научных работ НИИЯФ МГУ (I место)

Спасибо за внимание!