

Дискретное представление функции спектрального сдвига и многоканальная S -матрица

В. И. Кукулин¹), В. Н. Померанцев¹), О. А. Рубцова

Институт ядерной физики Московского государственного университета, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 июля 2009 г.

После переработки 21 июля 2009 г.

Дано краткое описание нового метода решения многоканальной квантовой задачи рассеяния в широком диапазоне энергий на основе однократной диагонализации матрицы гамильтониана системы в конечномерном базисе. Показано, что сдвиги собственных значений матрицы свободного гамильтониана, возникающие при добавлении матрицы взаимодействия, в области непрерывного спектра непосредственно связаны с парциальными фазовыми сдвигами. В качестве иллюстрации рассматривается двухканальная задача рассеяния со сдвинутыми порогами каналов.

PACS: 03.65.Nk

1. Введение. Решение многих важных проблем квантовой физики сводится к решению многоканальной задачи рассеяния, причем часто требуется знать не частное решение при одной определенной энергии, а поведение многоканальной S -матрицы одновременно во всем или очень широком спектральном диапазоне. Для решения подобных задач мы предлагаем новый эффективный метод, основанный на однократной диагонализации гамильтониана на конечном базисе специального вида. Метод является развитием идей И.М. Лифшица в теории твердого тела и подхода Бирмана-Крейна в математической теории рассеяния.

В 1947 г. И.М. Лифшиц исследовал задачу о возмущении спектра линейного эрмитова оператора под действием вырожденного возмущения произвольной величины [1, 2]. Для рассмотрения возмущения непрерывного спектра он ввел понятие операторов с квазинепрерывным спектром [2]: это семейство операторов $H_0^{(\alpha)}$, имеющих чисто дискретный спектр $\{E_j^0(\alpha)\}_{j=1}^N$, который может быть аппроксимирован некоторой непрерывной монотонной функцией $\lambda(u)$:

$$E_j^0(\alpha) = \lambda(j\alpha) + o(\alpha), \quad (1)$$

причем

$$E_{j+1}^0(\alpha) - E_j^0(\alpha) \equiv D_j^\alpha = \alpha \frac{d\lambda}{du} + o(\alpha). \quad (2)$$

Предел при $\alpha \rightarrow 0$ дает оператор H_0 с непрерывным спектром, покрывающим область значений функции

$\lambda(u)$. В [2] было показано, что при добавлении вырожденного конечного (не малого) возмущения V квазинепрерывный спектр $\{E_j(\alpha)\}$ возмущенного оператора $H_0^{(\alpha)} + V$ может быть представлен в виде

$$E_j(\alpha) = E_j^0(\alpha) + D_j^\alpha \xi(E_j) + o(\alpha). \quad (3)$$

Здесь впервые появляется функция $\xi(E)$, определяющая локальное изменение спектра эрмитова оператора под действием возмущения, которая позднее получила названия функции спектрального сдвига (ФСС) для пары операторов H_0 и $H = H_0 + V$. Предложенный Лифшицем подход позволил решить ряд задач физики твердого тела, связанных с возмущением кристаллической решетки при внесении атомов примеси [3].

Математическая теория функции спектрального сдвига была построена в 60-х годах в работах Бирмана и Крейна [4], где было дано корректное определение $\xi(E)$ через так называемый определитель возмущения или детерминант Фредгольма $\Delta(E)$, пригодное для более широкого класса возмущений. Одним из важнейших результатов этого развития является формула Бирмана-Крейна, связывающая ФСС $\xi(E)$ в области непрерывного спектра невозмущенного гамильтониана H_0 с оператором рассеяния $S(E)$ ²:

$$\det S(E) = \exp(-2\pi i \xi(E)), \quad (4)$$

²) Заметим, что уже в первой работе И.М. Лифшица [2] можно увидеть связь между ФСС и фазой рассеяния: полученная им формула (2,5) для $\operatorname{tg} \pi \xi$ фактически совпадает с выражением для тангенса фазового сдвига, отвечающего сепарабельному потенциалу ранга 1.

¹) e-mail: kukulin@nucl-th.sinp.msu.ru, pomeran@nucl-th.sinp.msu.ru

которая означает, что ФСС с точностью до множителя $(-\pi)$ равна фазовому сдвигу рассеяния:

$$\delta(E) = -\pi\xi(E). \quad (5)$$

Благодаря явной связи с оператором рассеяния, математическая теория ФСС сыграла важную роль в развитии квантовой теории рассеяния (см. посвященный ФСС обзор [5] и книгу [6]). В дальнейшем, однако, оказалось, что гораздо удобнее изучать свойства S -матрицы, выражая ее непосредственно через детерминант Фредгольма, поэтому теория ФСС не вошла в большинство классических учебников по квантовой теории рассеяния и, как следствие, мало известна среди физиков.

В настоящей работе мы покажем, что исходное представление Лившица (3) для сдвига собственных значений (СЗ) квазинепрерывного спектра совместно с формулой Бирмана-Крейна (5) может быть напрямую использовано для вычисления фазовых сдвигов через разности собственных значений матриц свободного, H_0 , и полного (возмущенного), $H_0 + V$, гамильтонианов, диагонализированных на *одном и том же* конечном L_2 -базисе, без явного привлечения каких-либо уравнений теории рассеяния, а также обобщим эти идеи на многоканальный случай.

2. Одноканальная задача рассеяния. Хотя предлагаемый метод нахождения фазовых сдвигов, как показывают наши расчеты, применим для любого L_2 -базиса, здесь мы будем использовать специальный базис свободных стационарных волновых пакетов (СВП), в котором матрица свободного гамильтониана диагональна [7, 8]. Для этого дискретизируем непрерывный спектр свободного гамильтониана путем введения конечного числа непересекающихся интервалов (бинов) $[\mathcal{E}_{i-1}, \mathcal{E}_i]_{i=1}^N$, где подразумевается, что узловые точки \mathcal{E}_i подчиняются некоторому распределению и в пределе $N \rightarrow \infty$ покрывают всю область непрерывного спектра. В качестве такого распределения мы будем использовать в данной работе сетку Чебышева:

$$\mathcal{E}_i = a \operatorname{tg} \left[\frac{2i-1}{4N} \pi \right], \quad i = 1, \dots, N. \quad (6)$$

Стационарный волновой пакет определяется на каждом энергетическом интервале как интеграл от точной функции $|\psi_0(E)\rangle$ непрерывного спектра H_0 :

$$|x_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{D_i}} \int_{\mathcal{E}_{i-1}}^{\mathcal{E}_i} dE |\psi_0(E)\rangle, \quad (7)$$

где $D_i \equiv \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_{i-1}$ – ширина бина. Набор состояний $|x_i\rangle_{i=1}^N$ ортонормирован и может быть использован как L_2 базис для вычислений [7, 8]. Основное

удобство такого базиса состоит в том, что матрица гамильтониана H_0 диагональна³⁾, причем ее СЗ совпадают со средними точками энергетических интервалов $E_i^0 = \frac{1}{2}(\mathcal{E}_i + \mathcal{E}_{i-1})$ [7]. Таким образом, в случае СВП базиса мы имеем простое выражение для СЗ и интервалов спектра матрицы свободного гамильтониана, что позволяет использовать понятие квазинепрерывного спектра, введенное Лифшицем. Действительно, если ввести функцию распределения узловых точек для чебышевской сетки $\lambda(u) = a \operatorname{tg}(u)$ и параметр малости

$$\alpha = \pi/2N, \quad (8)$$

то легко убедиться, что СЗ E_i^0 матрицы свободного гамильтониана H_0 удовлетворяют условиям квазинепрерывности (1) и (2) Лифшица относительно параметра α . Поэтому последовательность матричных гамильтонианов $\{H_0^{(N)}\}$ с расширением базиса $N \rightarrow \infty$ образует семейство операторов с квазинепрерывным относительно α спектром, и для спектра матриц полного (возмущенного) гамильтониана $H_0^{(N)} + V^{(N)}$ в том же базисе можно использовать представление (3) с ФСС.

В результате диагонализации матрицы полного гамильтониана $H = H_0 + V$ на СВП-базисе размерности N мы получаем конечный набор собственных значений $\{E_i\}_{i=1}^N$ (упорядоченный в порядке возрастания) и соответствующий ортонормированный набор собственных функций. Если существуют связанные состояния исходного гамильтониана H (мы предполагаем, что число их N_b конечно), то первые функции из этого набора (с номерами $1 \leq i \leq N_b$) приближенно описывают эти связанные состояния, причем их СЗ отрицательны. Остальные (положительные) СЗ с $N_b < i \leq N$ лежат в области непрерывного спектра H .

В работе [1] показано, что для взаимодействия V конечного ранга⁴⁾ первые N_b СЗ спектра H “отщепляются” (так как относятся к дискретному спектру), а остальные СЗ $\{E_j\}_{j=N_b+1}^N$ относятся к квазинепрерывному спектру и образуют последовательность невозмущенных СЗ E_j^0 . Таким образом, локальный сдвиг каждого уровня при добавлении возмущения невелик по сравнению с расстоянием между соседними уровнями D_j . Это позволяет определить дискретный ана-

³⁾Также в этом базисе диагональна матрица любого оператора, функционально зависящего от H_0 , в частности матрица свободной резольвенты.

⁴⁾Любое возмущение V на конечном базисе размерности N имеет ранг не выше N .

лог функции спектрального сдвига в соответствии с представлением (3) соотношением

$$\xi_j = \frac{E_{j+N_b} - E_j^0}{D_j}; \quad j = 1, \dots, N - N_b; \quad (9)$$

$$\xi_j = \xi(E_j^0) + o(1/N).$$

Справедливость такого представления (3), показанная в [2], позволяет утверждать, что при предельном переходе $N \rightarrow \infty$, когда все $D_j \rightarrow 0$, квазинепрерывные спектры операторов H_0 и H переходят в непрерывные, а дискретные спектральные сдвиги ξ_j переходят в непрерывную ФСС $\xi(E)$.

Используя далее явную связь между ФСС и фазовыми сдвигами (5), получаем следующее дискретизованное представление для фазовых сдвигов рассеяния:

$$\delta(E_j^0) = -\pi \frac{E_{j+N_b} - E_j^0}{D_j} + o(1/N), \quad j=1, \dots, N-N_b. \quad (10)$$

Таким образом, в результате однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана на конечном базисе можно получить не только энергии и функции связанных состояний, но и фазовые сдвиги в широкой области энергий. Если с увеличением размерности базиса расстояния между соседними СЗ матрицы свободного гамильтониана уменьшаются (для базиса СВП это означает уменьшение ширины бинов), то мы будем наблюдать сходимость получающихся дискретных (10) фазовых сдвигов к точным. Это приводит к весьма удобному, практическому и универсальному способу нахождения наблюдаемых в задаче рассеяния.

В качестве примера рассмотрим рассеяние на юкавском потенциале $V(r) = V_0 \exp(-r)/r$ ($\hbar^2 = 2m = 1$) с различной глубиной: $V_0 = -1.5$ (нет связанных состояний) и $V_0 = -2.5$ (имеется одно связанное состояние). На рис.1 приведены s -волновые фазовые сдвиги рассеяния на этом потенциале, полученные из дискретной ФСС (10), в сравнении с “точными результатами”, полученными путем прямого численного решения уравнения Шредингера для исследуемой задачи. Как следует из рисунка, с увеличением размерности базиса приближенные фазовые сдвиги сходятся к их точным значениям в широком диапазоне энергий.

Мы проверяли представление (10) для фазовых сдвигов для случая самых разных потенциалов: притягивающих (с различным числом связанных состояний) и отталкивающих, локальных и нелокальных,

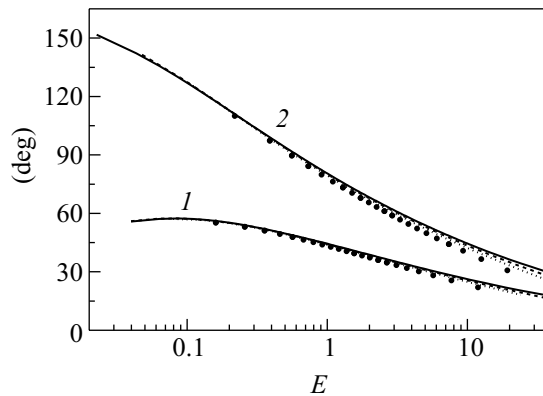


Рис.1. S -волновые частичные сдвиги δ для потенциала Юкавы с глубиной $V_0 = -1.5$ (1) и $V_0 = -2.5$ (2), полученные из дискретизованной ФСС (10) на СВП базисе разной размерности: $N = 25$ (\bullet), $N = 50$ (пунктирная кривая), $N = 100$ (штриховая кривая) в сравнении с точным результатом (сплошная кривая)

действительных и комплексных — и во всех случаях наблюдали хорошую сходимость.

3. Многоканальная задача. Рассмотрим теперь задачу с K различными каналами рассеяния. Полный гамильтониан системы $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}$ может быть записан в матричном (по индексам каналов виде)

$$H_{\mu\nu} = H_{0\mu} \delta_{\mu\nu} + V_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 1, \dots, K, \quad (11)$$

где $H_{0\mu}$ – свободный каналный гамильтониан с простым непрерывным спектром, заполняющим интервал $[\Delta_\mu, \infty)$, и $V_{\mu\nu}$ – потенциалы связи каналов. Непрерывный спектр свободного гамильтониана \mathbf{H}_0 есть прямая сумма спектров каналных гамильтонианов $H_{0\mu}$, поэтому, в отличие от одноканальной задачи, он вырожден, причем кратность вырождения k равна числу открытых каналов и зависит от энергии. Непрерывный спектр полного гамильтониана \mathbf{H} многоканальной задачи совпадает со спектром свободного гамильтониана, и при k -кратном вырождении существует k независимых решений, отвечающих различным граничным условиям задачи рассеяния.

Однако при представлении свободного гамильтониана \mathbf{H}_0 матрицей в произвольном конечном базисе вырождение, вообще говоря, снимается. Поэтому при диагонализации матрицы полного гамильтониана каждому СЗ отвечает только одно “смешанное” собственное состояние, которое нельзя сопоставить собственным функциям гамильтониана \mathbf{H} с правильными физическими граничными условиями. Чтобы преодолеть эту трудность, необходимо построить матрицу невозмущенного гамильтониана, такую, чтобы кратность вырождения ее СЗ соот-

ветствовала бы кратности вырождения непрерывного спектра \mathbf{H}_0 . В этом случае, согласно [1], возмущение (конечного ранга) хотя и снимает вырождение спектра \mathbf{H}_0 , однако возмущенные собственные значения образуют перемежающиеся последовательности с невозмущенными. То есть каждый k -кратно вырожденный уровень E_j^0 свободного спектра порождает серию из k уровней возмущенного спектра $\{E_j^{(n)}\}_{n=1}^k$, расположенных последовательно в порядке возрастания. Тогда каждую n -ю “ветвь” $\{E_j^{(n)}\}_{j=1}^{N_n}$ спектра можно сопоставить с физическими состояниями рассеяния, отвечающими граничным условиям определенного типа, и определить параметры S -матрицы по разностям возмущенных и невозмущенного собственных значений.

В практических расчетах для построения матрицы \mathbf{H}_0 с вырожденным спектром нужной кратности особенно удобно использовать СВП-базис в каждом канале, поскольку СЗ свободного гамильтониана E_j^0 можно задавать произвольным образом за счет выбора границ интервалов \mathcal{E}_j .

Таким образом, обобщая понятие операторов с квазинепрерывным спектром и представление Лифшица для возмущения (3) на случай кратного спектра, мы можем написать⁵⁾

$$E_j^{(n)} = E_j^0 + \xi_j^{(n)} D_j; \quad \xi_j^{(n)} = \xi^{(n)}(E_j^{(n)}) + o(1/N), \quad (12)$$

где вместо одной ФСС появляется k различных ФСС $\xi^{(n)}(E)$ для каждой ветви спектра.

Далее, соотношение (5) между ФСС и S -матрицей естественно обобщить как

$$\delta^{(n)}(E) = -\pi \xi^{(n)}(E), \quad n = 1, \dots, k, \quad (13)$$

где $\delta^{(n)}(E)$ – так называемые собственные фазовые сдвиги рассеяния и E принадлежит области, где непрерывный спектр k -кратно вырожден. Тогда получаем простую формулу для собственных фазовых сдвигов

$$\delta^{(n)}(E_j^0) \approx -\pi \frac{E_j^{(n)} - E_j^0}{D_j}, \quad n = 1, \dots, k. \quad (14)$$

Следует подчеркнуть здесь, что соотношение (13) между многоканальными ФСС $\xi^{(n)}(E)$ и собственными фазовыми сдвигами рассеяния не следует из формулы Бирмана-Крейна (4), а является именно ее обобщением. Нам неизвестны какие-либо прежние работы по обобщению теории ФСС на многоканальный

⁵⁾ Чтобы не усложнять обозначения, мы не указываем здесь явно число связанных состояний N_b , так что индекс j нумерует только состояния квазинепрерывного спектра.

случай (то есть на случай кратного непрерывного спектра), но мы убедились в справедливости представления (14) для собственных фазовых сдвигов на многочисленных примерах.

Однако для нахождения элементов многоканальной S -матрицы необходимы также так называемые параметры смешивания, для определения которых, кроме СЗ матриц возмущенного и невозмущенного гамильтонианов, нужно использовать элементы матрицы поворота, приводящей матрицу \mathbf{H} к диагональному виду, то есть коэффициенты разложения получившихся собственных состояний по базису. При диагонализации матрицы полного гамильтониана (11) на многоканальном СВП-базисе $[[x_i^\nu]_{i=1}^{N_\nu}]_{\nu=1}^K$ получается дискретный набор СЗ $E_j^{(n)}$ и соответствующий набор собственных состояний:

$$|z_j^{(n)}\rangle = \sum_{\nu=1}^K \sum_{i=1}^{N_\nu} C_{ji}^{n\nu} |x_i^\nu\rangle, \quad (15)$$

для каждого из которых можно ввести вес канала ν следующим образом:

$$w_j^{(n)}(\nu) \equiv \sum_{i=1}^{N_\nu} |C_{ji}^{n\nu}|^2. \quad (16)$$

Эти веса связаны с матрицей поворота, приводящей S -матрицу к диагональному виду (представлению собственных фаз), и однозначно определяют ее параметры смешивания.

В качестве примера рассмотрим двухканальную задачу с потенциалом Берка, моделирующим $e - H$ рассеяние с учетом возбуждения атома из $1S$ в $2S$ состояние и использовавшимся ранее в ряде работ (см., например, [9]):

$$V_{11} = V_{22} = -1.5 \frac{e^{-r}}{r}, \quad V_{12} = -0.25e^{-r}. \quad (17)$$

Порог второго канала сдвинут на $\Delta_2 = 0.75$ ($\Delta_1 = 0$), и при $E > \Delta_2$ непрерывный спектр двукратно вырожден. В этом случае для получения матрицы свободного гамильтониана с вырожденным спектром в СВП базисе следует использовать одинаковые узловые точки в обоих каналах выше порога второго канала Δ_2 . Для двухканального случая веса каналов наиболее просто связаны с матрицей поворота, которая диагонализует S -матрицу и тем самым непосредственно определяет единственный здесь угол смешивания ϵ :

$$w_j^{(1)}(1) = \cos^2 \epsilon(E_j^0), \quad w_j^{(2)}(1) = \sin^2 \epsilon(E_j^0). \quad (18)$$

На рис.2 приведены собственные фазы и параметр смешивания для потенциала (17), полученные из дис-

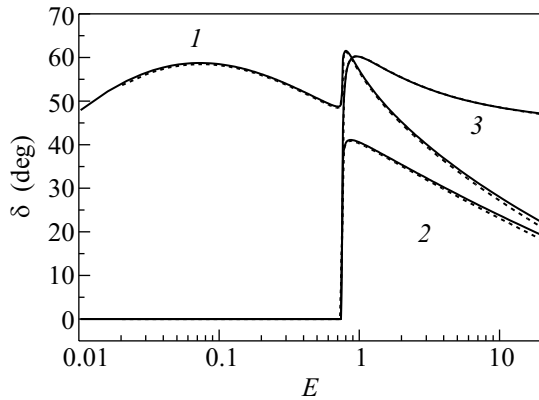


Рис.2. Собственные фазы для первого (1) и второго (2) каналов, а также угол смешивания (3), отвечающие рассеянию на потенциале (17) и полученные в СВП базисе разной размерности ($N_1 + N_2$): (100+50) – штриховая кривая и (200+100) – сплошная кривая

кретных аналогов ФСС по формулам (14) и (18). Как и в одноканальном случае, наблюдается хорошая сходимость результатов с увеличением размерности пакетного базиса. Используя формулы (14) и (18), мы нашли все элементы S -матрицы, в том числе отвечающие упругому рассеянию в канале 1 выше порога канала 2:

$$S_{11}(E_j^0) = \cos^2 \epsilon e^{2i\delta^{(1)}} + \sin^2 \epsilon e^{2i\delta^{(2)}} \approx \sum_{n=1}^2 w_j^{(n)}(1) e^{2i\delta_j^{(n)}}, \quad (19)$$

а также соответствующие сечения упругого рассеяния и реакции. На рис.3 приведены энергетические зависимости этих сечений, полученные из дискретных аналогов ФСС. Для сравнения приведены результаты работы [9] (точки), полученные путем сведения двухканальной задачи к одноканальной с нелокальным оператором взаимодействия Фешбаха.

4. Заключение. Таким образом, мы развили новый метод решения произвольной многоканальной задачи рассеяния на основе однократной диагонализации матрицы полного гамильтониана на подходе L_2 базисе. Данный метод основан на обобщении дискретного представления Лифшица для функции спектрального сдвига и обобщении формулы Бирмана-Крейна на многоканальный случай. При этом мы получаем многоканальную S -матрицу в большом энергетическом интервале (в пределе $N \rightarrow \infty$ – во всем энергетическом интервале), что вы-

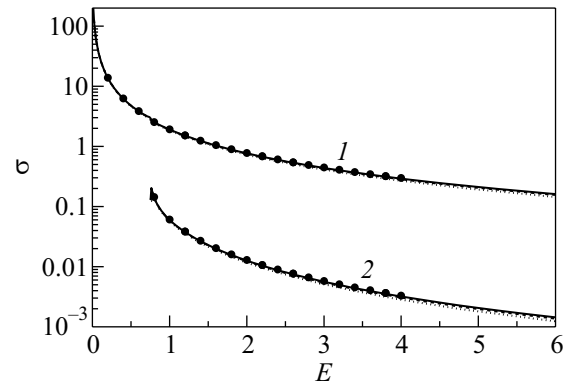


Рис.3. Сечение упругого рассеяния (1) и сечение реакции (2) в канале 1 для потенциала (17), найденные из дискретных аналогов ФСС в базисах различной размерности: (50+25) – пунктирная кривая, (100+50) – штриховая кривая, (200+100) – сплошная кривая. Точками (•) обозначены результаты работы [9]

годно отличает данный подход от известных прямых методов решения многоканальной задачи. Важным преимуществом диагонализационного подхода является также представление оператора взаимодействия матрицей в используемом базисе, что позволяет находить S -матрицу для любых, в том числе и нелокальных, взаимодействий. Метод может иметь очень широкую область применения в физике твердого тела, а также в атомной, молекулярной и ядерной физике.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 07-02-00609, совместного РФФИ-DFG гранта # 08-02-91959, а также гранта Президента РФ # МК-202.2008.2.

1. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **17**, 1017 (1947).
2. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **17**, 1076 (1947).
3. И. М. Лифшиц, УМН **7**, 171 (1952).
4. М. Ш. Бирман, М. Г. Крейн, ДАН СССР **144**, 475 (1962).
5. М. Ш. Бирман, Д. Р. Яфаев, Алгебра и анализ **4**(5), 1 (1992).
6. Д. Р. Яфаев, *Математическая теория рассеяния*, изд. С-Петербургского университета, СПб, 1994.
7. В. И. Кукулин, О. А. Рубцова, ТМФ **130**, 64 (2002); **134**, 459 (2003); **145**, 395 (2005).
8. В. И. Кукулин, В. Н. Померанцев, О. А. Рубцова, ТМФ **150**, 474 (2007).
9. В. Н. Bransdent and A. T. Stelbovics, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, 1877 (1984).