

Дискретное представление функции спектрального сдвига и многоканальная S-матрица

О.А. Рубцова

Лаборатория теории атомного ядра

НИИЯФ МГУ

*XII Зимняя школа по теоретической физике
Малочастичные системы: теория и приложения
ОИЯИ, 4 февраля 2014 г.*

Определение элементов S-матрицы в теории рассеяния

«Дифференциальный» подход

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

Асимптотика волновой функции

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

Элемент S-матрицы находится из сшивки решения во внутренней области с асимптотикой.

Интегральный подход

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

S-матрица определяется из матричного элемента

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

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

Оператор рассеяния связан с волновыми операторами

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = \Omega^{(\pm)} |\phi_0\rangle, \quad \Omega^{(\pm)} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt} e^{-iH_0t}$$

$$S = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)}$$

Теория функции спектрального сдвига

Развитие формализма ФСС

Функция спектрального сдвига определяется для пары эрмитовых операторов H_0 и $H=H_0+V$.

1. Формула следов (И.М. Лифшиц, 1952.) для возмущенного и невозмущенного гамильтонианов

$$\text{Tr}[f(H) - f(H_0)] = \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\lambda) f'(\lambda) d\lambda$$

Это соотношение можно формально доказать, используя спектральные разложения

$$H_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\mathbf{E}_0, \quad H = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\mathbf{E}$$

← спектральные меры

«Наивное» определение ФСС :

$$\xi(\lambda) = \text{Tr}[\mathbf{E}_0(\lambda) - \mathbf{E}(\lambda)]$$

Возмущение V должно быть ядерным, т.е. быть компактным оператором с конечным следом.

2. В работах М.Ш. Бирмана и М.Г. Крейна (1953, 1962) был введен сам термин функция спектрального сдвига и установлена связь с оператором рассеяния.

$$\det S(\lambda) = \exp(-2\pi i \xi(\lambda))$$

В одноканальном случае $\delta(E) = -\pi \xi(E)$

Вместо «наивного» определения через разность спектральных мер было дано более корректное определение ФСС через аргумент детерминанта возмущения

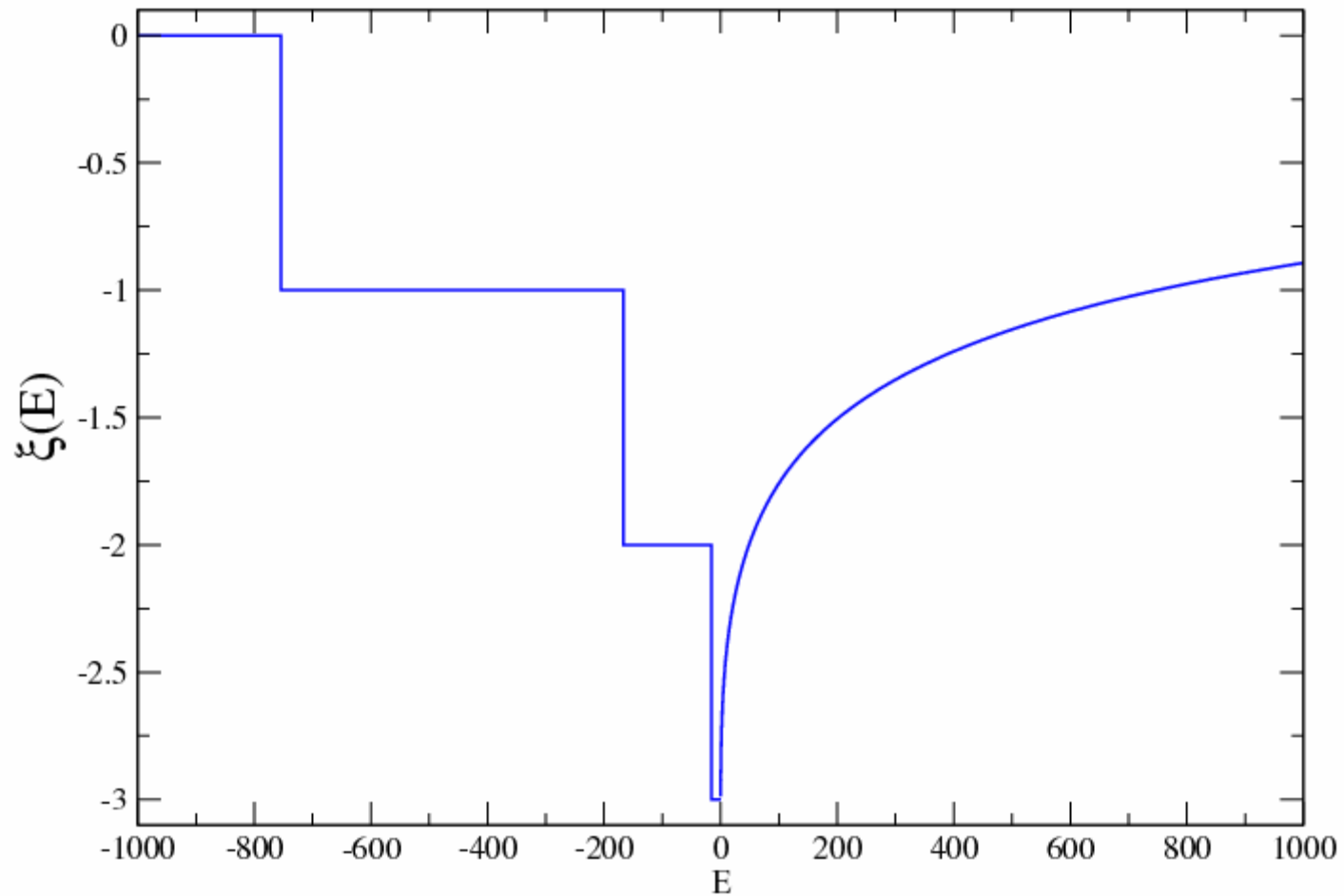
$$\xi(\lambda) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \arg D(\lambda + i\varepsilon) \quad D(z) = \det \left[(H - zI)(H_0 - zI)^{-1} \right]$$

Формула Бирмана-Крейна приводит к известной связи между S-оператором и детерминантом возмущения.

$$S(E) = D(E - i0) / D(E + i0), \quad D(E + i0) = |D(E + i0)| e^{-i\delta}$$

ФСС используется в квантовой статистике.

Функция спектрального сдвига для дискретного и непрерывного спектров



Связь между ФСС и спектральной плотностью

Спектральная плотность в области дискретного спектра:

$$\rho_b(E) = \sum_{n=1}^{N_b} \delta(E - E_n) \quad E_n - \text{собственные значения энергии.}$$

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

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

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»:

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

Спектральная плотность

Плотность состояний для дискретного спектра

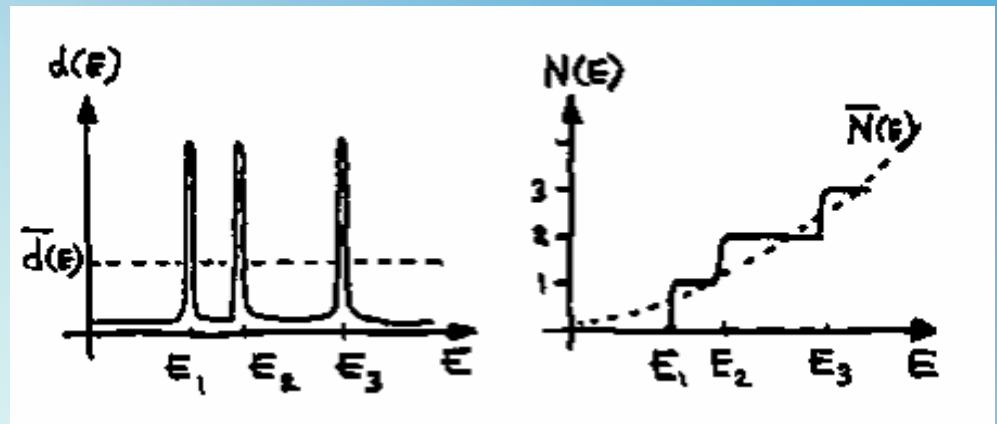
$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

Можно записать формальное равенство

$$\delta(E - E_n) = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{E - E_n + i\varepsilon} \Rightarrow \rho(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} \operatorname{Tr} (G(E + i\varepsilon))$$

Спектральная плотность может быть представлена как производная от счетной функции

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE}, \quad N(E) = \sum_n \theta(E - E_n)$$



Спектральная плотность в полуклассике

Число квантовых клеток в фазовом пространстве, отвечающем энергиям меньшим или равным E , определяется как отношение этого фазового объема к размеру одной клетки

$$N_{sc}(E) = \frac{1}{h} \int dpdq \theta(E - H(p, q))$$

← размер «клетки»

В полуклассике плотность состояний определяется как интеграл по конфигурационному пространству

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \int dq \operatorname{Im} G(q, q, E)$$

Переход от дискретного к непрерывному спектру

Один из способов перехода от дискретного спектра к непрерывному при определении спектральной плотности – решение задачи рассеяния в ящике.

Система помещается в сферическую полость радиуса R , а затем берется предел $R \rightarrow \infty$

$$\rho(E + i\eta, R) \equiv \frac{1}{2\pi i} \sum_n \left\{ \frac{1}{E - E_n(R) - i\eta} - \frac{1}{E - E_n(R) + i\eta} \right\}$$

Сама спектральная плотность в пределе расходится, однако разность плотностей возмущенного и свободного спектров является регулярной.

Формула Крейна-Фриделя-Ллойда

$$\rho(E) - \rho_0(E) = \frac{1}{2\pi i} \text{Tr} \left[S^\dagger(E) \frac{d}{dE} S(E) \right] = \frac{1}{2\pi i} \frac{d}{dE} \ln \det S(E)$$

Можно также определить разность числа состояний возмущенного и свободного гамильтонианов

$$N(E) - N_0(E) = \frac{1}{2\pi i} \ln \det S(E)$$

Это аналог формулы Бирмана-Крейна для ФСС

$$\xi(E, H_0, H) = -[N(E) - N_0(E)]$$

Практическое использование дискретного представления для спектральной плотности (K. Arai, A.T. Kruppa, PRC 1999)

Дискретное представление для CLD

$$\Delta^N(E) = \sum_{i=1}^N \delta(E - e_i) - \sum_{i=1}^N \delta(E - e_i^0),$$

сглаживается

$$\bar{\Delta}^N(E) = \frac{1}{\Gamma} \int_0^\infty w\left(\frac{E' - E}{\Gamma}\right) \Delta^N(E') dE',$$

Связь CLD с фазой рассеяния

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

Вблизи резонанса

$$\Delta(E, E_r, \Gamma_r) = \Delta^r(E, E_r, \Gamma_r) + \Delta^{\text{bg}}(E).$$

Резонансная часть CLD

$$\Delta^r(E, E_r, \Gamma_r) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_r/2}{(E - E_r)^2 + \Gamma_r^2/4},$$

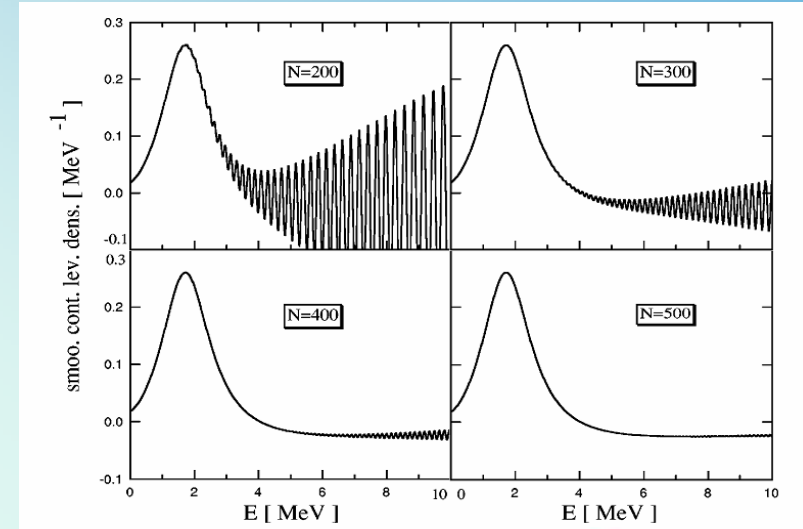
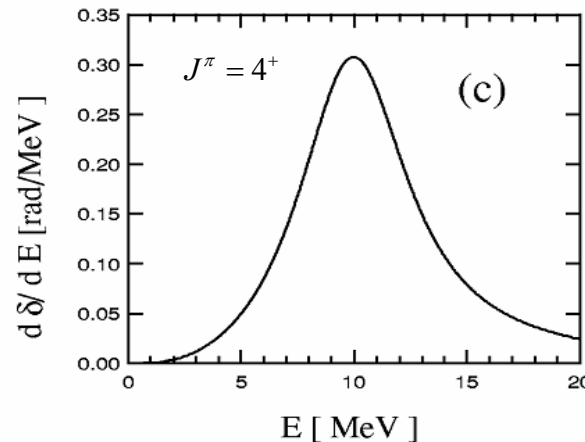


FIG. 3. The smoothed approximate continuum level density for basis dimensions $N=200, 300, 400, 500$ with smoothing $\Gamma=0.4$



Результаты для α - α рассеяния

ФСС в дискретном представлении

Более ранние работы И.М. Лифшица

И.М.Лифшиц. *О вырожденных регулярных возмущениях. I. Дискретный спектр.* ЖЭТФ, **17**, 1017 (1947).

И.М.Лифшиц. *О вырожденных регулярных возмущениях. II. Квазинепрерывный и непрерывный спектры.* ЖЭТФ, **17**, 1076 (1947).

Задача:

Как меняется спектр невозмущенного гамильтониана H_0 при добавлении возмущения (немалого) V

Квазинепрерывный спектр

(И.М. Лифшиц, ЖЭТФ, 1947)

Операторы с квазинепрерывным спектром это семейство операторов $H_0^{(\alpha)}$ с чисто дискретным спектром $\{E_j^0(\alpha)\}$, который может быть аппроксимирован непрерывной монотонной функцией $\lambda(u)$:

$$E_j^0(\alpha) = \lambda(j\alpha) + o(\alpha), \quad (6)$$

причем

$$E_{j+1}^0(\alpha) - E_j^0(\alpha) \equiv D_j^\alpha = \alpha \left. \frac{d\lambda}{du} \right|_{u=j\alpha} + o(\alpha). \quad (7)$$

Предел при $\alpha \rightarrow 0$ дает оператор H_0 с непрерывным спектром, покрывающим область значений функции $\lambda(u)$.

Лифшиц показал, что спектр $\{E_j(\alpha)\}$ возмущенного оператора $H_0^{(\alpha)} + V$ может быть представлен как

$$E_j(\alpha) = E_j^0(\alpha) + D_j^\alpha \xi(E_j) + o(\alpha). \quad (8)$$

Здесь впервые появляется функция $\xi(E)$, определяющая **локальное** изменение спектра эрмитова оператора под действием возмущения – **функция спектрального сдвига (ФСС)** для пары предельных операторов H_0 и $H = H_0 + V$.

Для квазинепрерывного спектра получается следующее выражение для ФСС:

$$\xi(E_n^0) = \frac{E_n - E_n^0}{D_n} + O(\alpha)$$

Используя формулу Бирмана-Крейна

$$\det S(E) = \exp(-2\pi i \xi(E)) \Rightarrow \delta(E) = -\pi \xi(E)$$

получаем дискретное представление для фазовых сдвигов

$$\delta(E_n^0) = -\pi \frac{E_n - E_n^0}{D_n} + O(\alpha)$$

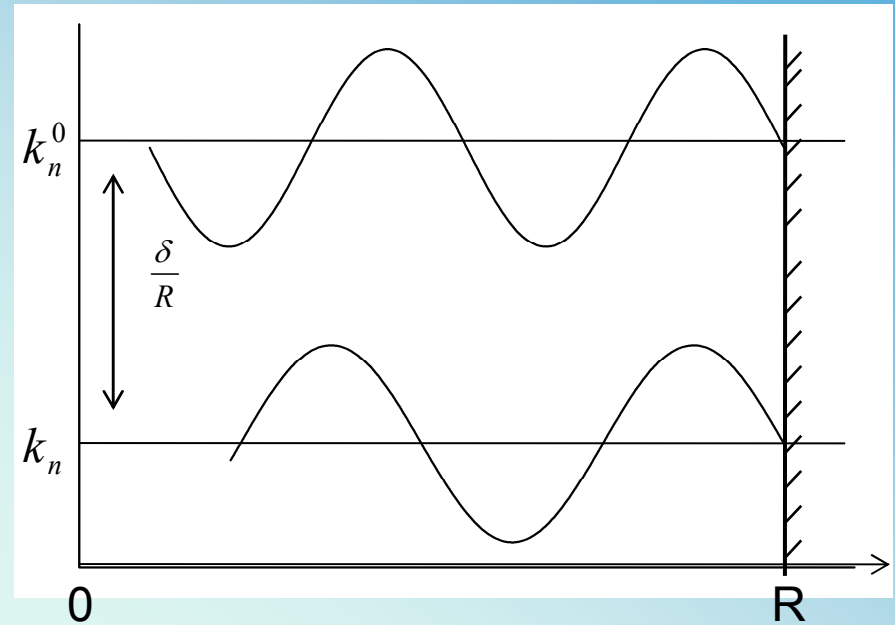
Пример: задача рассеяния в сферической полости

Граничное условие для собственных функций свободного гамильтониана:

$$\sin(k_n^0 R) = 0 \Rightarrow k_n^0 = \frac{\pi n}{R}, \quad d_n = \frac{\pi}{R}$$

Граничное условие для собственных функций полного гамильтониана:

$$\sin(k_n R + \delta_n^{(R)}) = 0 \Rightarrow k_n = \frac{\pi n - \delta_n^{(R)}}{R}$$



Легко видеть, что фазовый сдвиг удовлетворяет соотношению:

$$\delta_n^{(R)} = -\pi \frac{k_n - k_n^0}{d_n}$$

Фактически это было использовано Персивалем:

$$\delta \sim \sqrt{2E_n} - \sqrt{2E_n^0}$$

Подходы L_2 типа

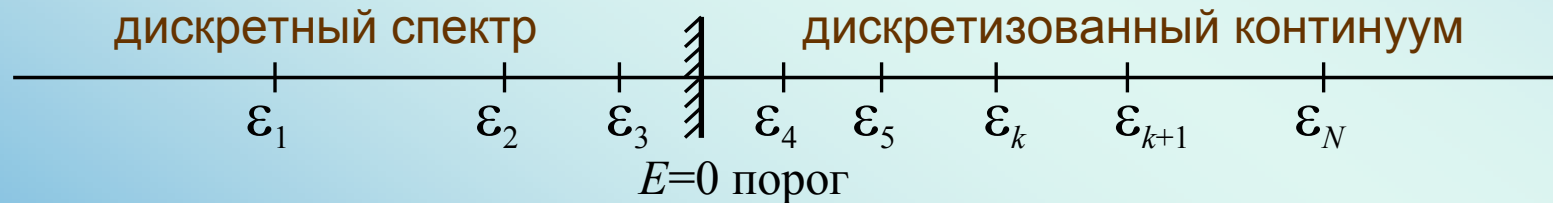
$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad \leftarrow$$

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^N C_n |\phi_n\rangle$$

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

$\varepsilon_n < 0$ – **связанные состояния**

$\varepsilon_n > 0$ – **псевдо-состояния континуума**



Как правило, дискретизованный спектр, полученный из диагонализации матрицы гамильтониана в некотором L_2 базисе удовлетворяет условию квазинепрерывности

$$\alpha \sim \frac{1}{N}$$

Функция спектрального сдвига в дискретизованном представлении

На основе формулы Бирмана-Крейна и определения И.М. Лифшица для ФСС в квази-непрерывном спектре возникает новый способ вычисления парциальных фазовых сдвигов в дискретном базисе.

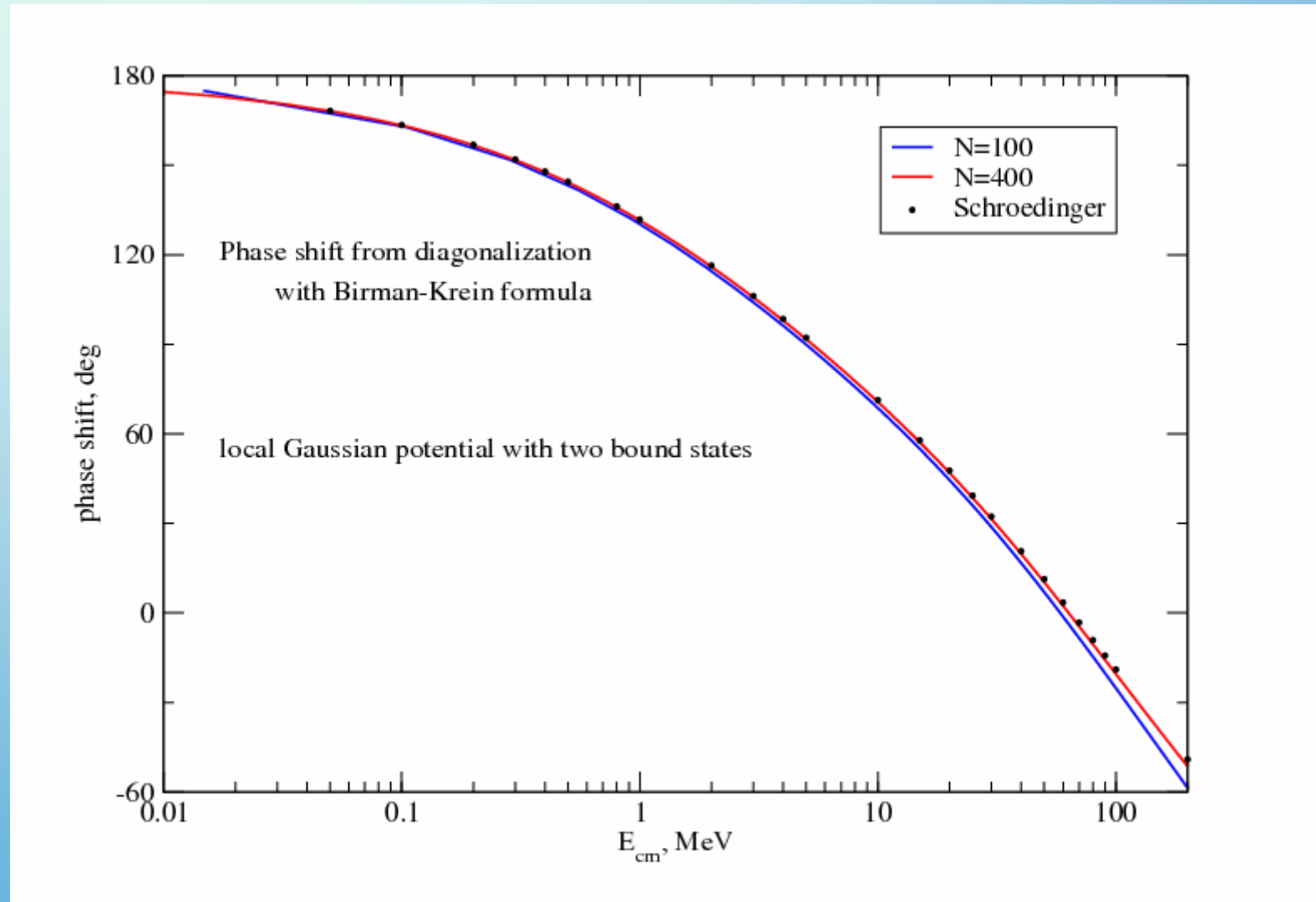
Выберем некоторый L_2 базис конечной размерности, в котором последовательно диагонализуем матрицы свободного и полного гамильтонианов

$$\det \left\| [H_0]_{nn'} - E \delta_{nn'} \right\| = 0 \rightarrow \{E_j^0, D_j\} \quad \det \left\| [H]_{nn'} - E \delta_{nn'} \right\| = 0 \rightarrow \{E_j\}$$

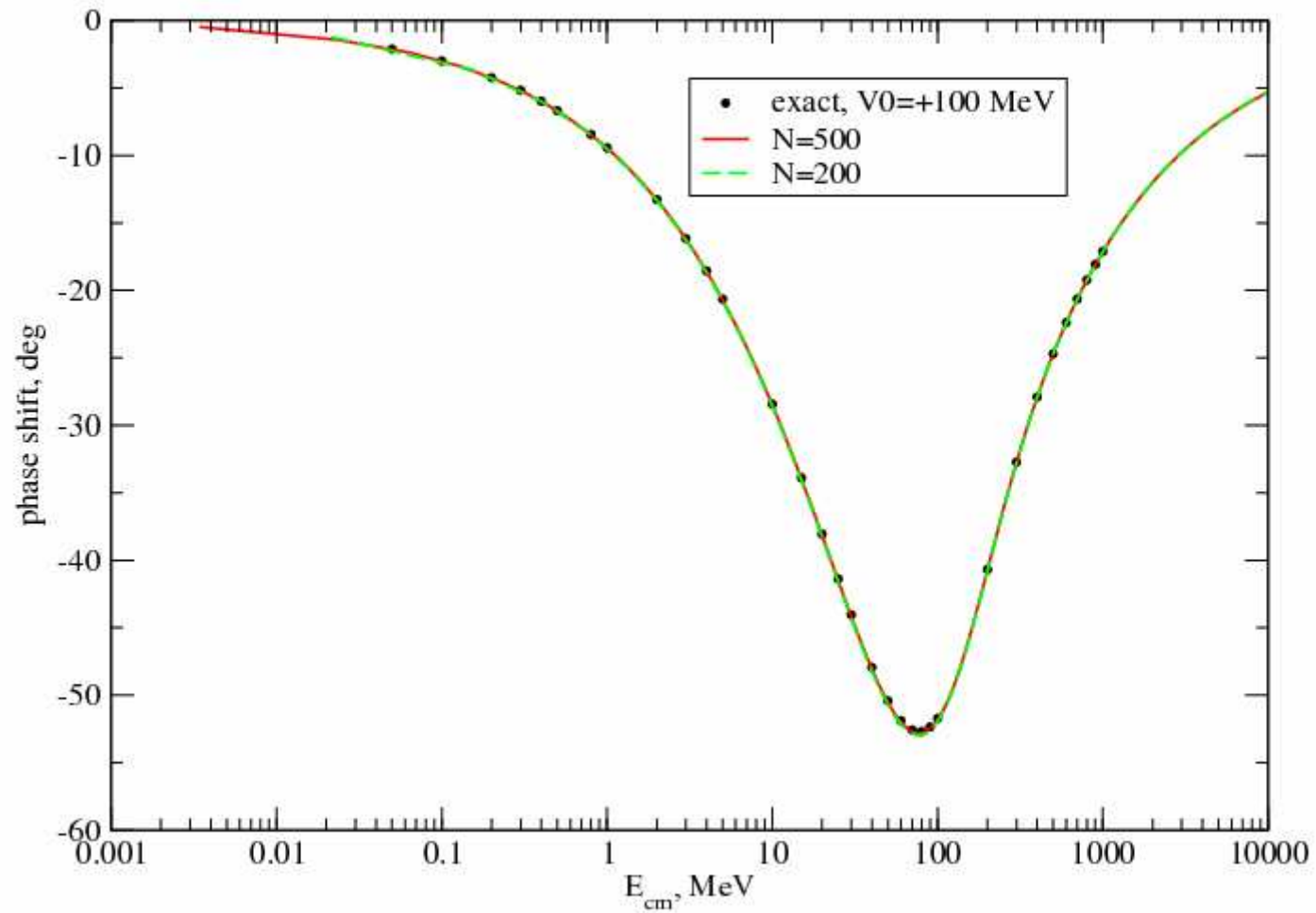
Парциальные фазовые сдвиги находятся из формулы:

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

Фазовые сдвиги для потенциала гауссовского типа

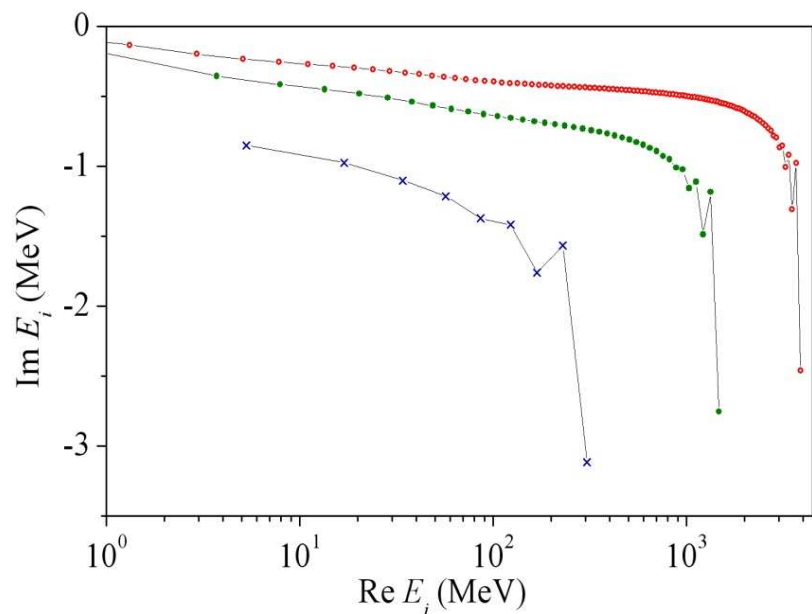


Отталкивающий потенциал



Комплексный потенциал

Собственные значения энергии полного гамильтониана

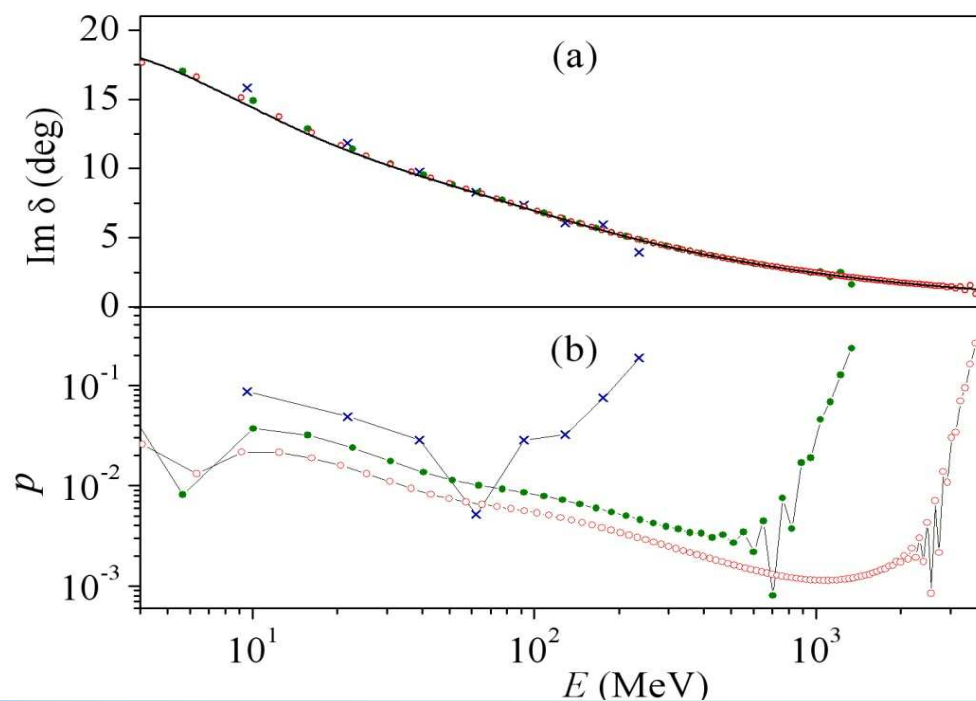


расчет в осцилляторном базисе

Собственные значения оператора кинетической энергии всегда вещественные.

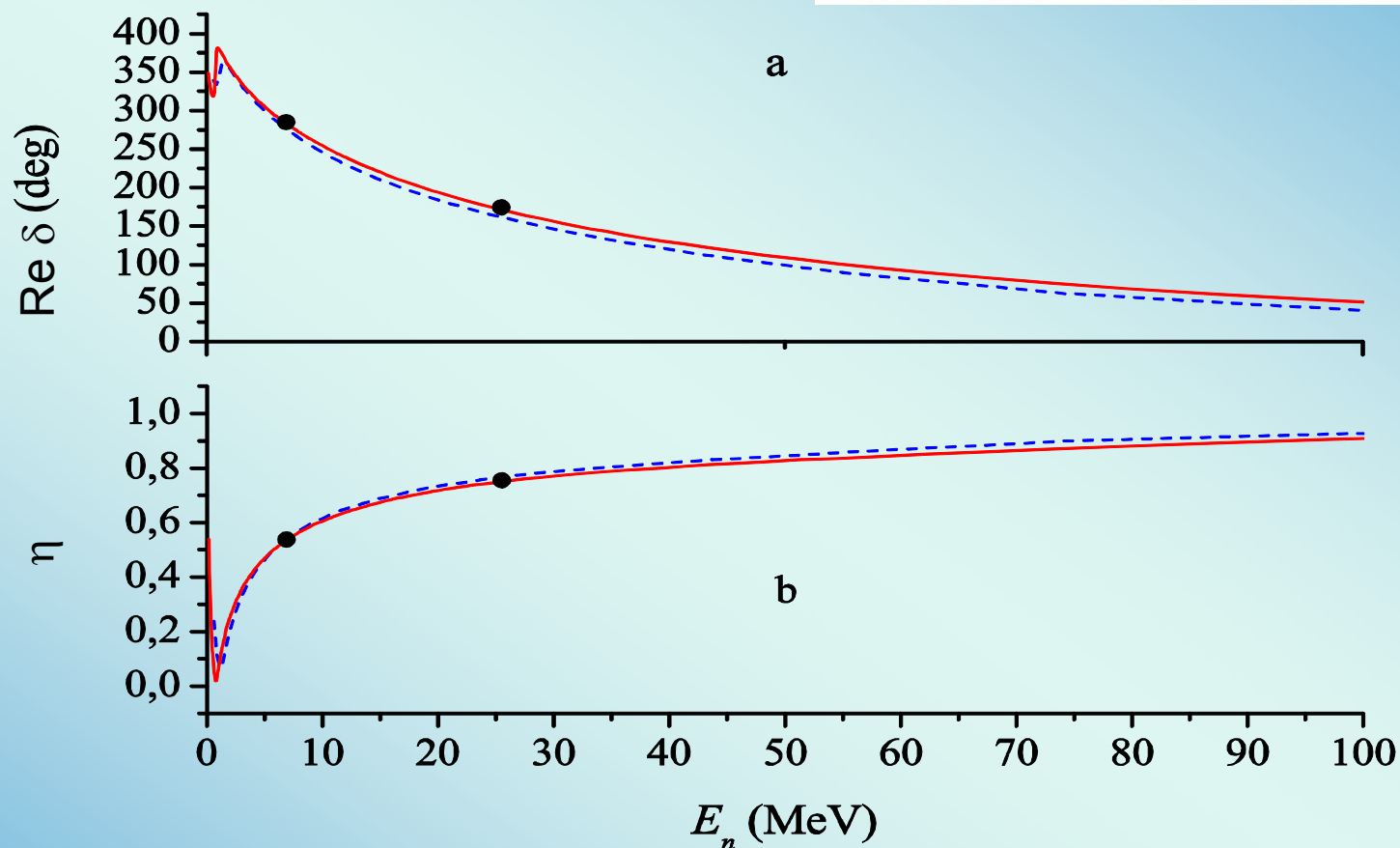
Мнимые части собственных значений энергии непосредственно пропорциональны мнимым частям фаз

$$\delta(E_j^0) \approx -\pi \frac{E_j - E_j^0}{D_j} \Rightarrow \text{Im } \delta(E_j^0) \approx -\pi \frac{\text{Im } E_j}{D_j}$$



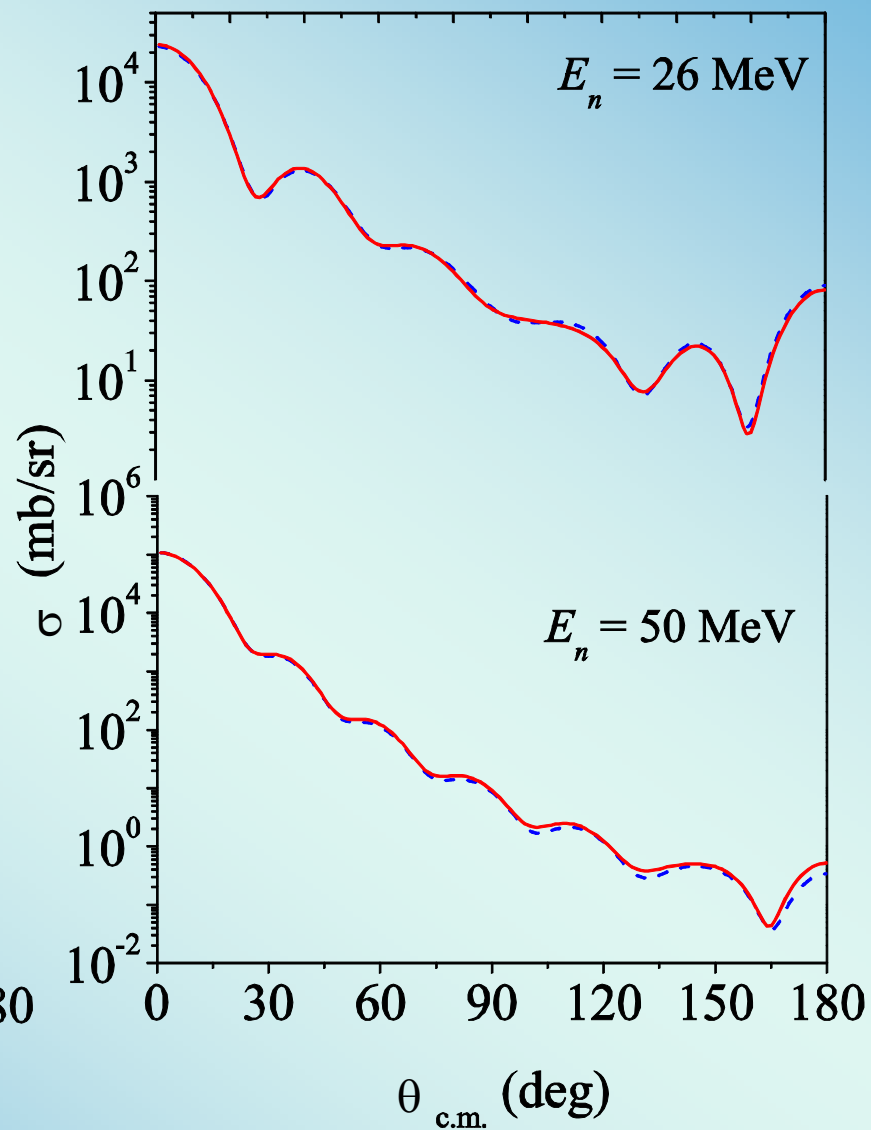
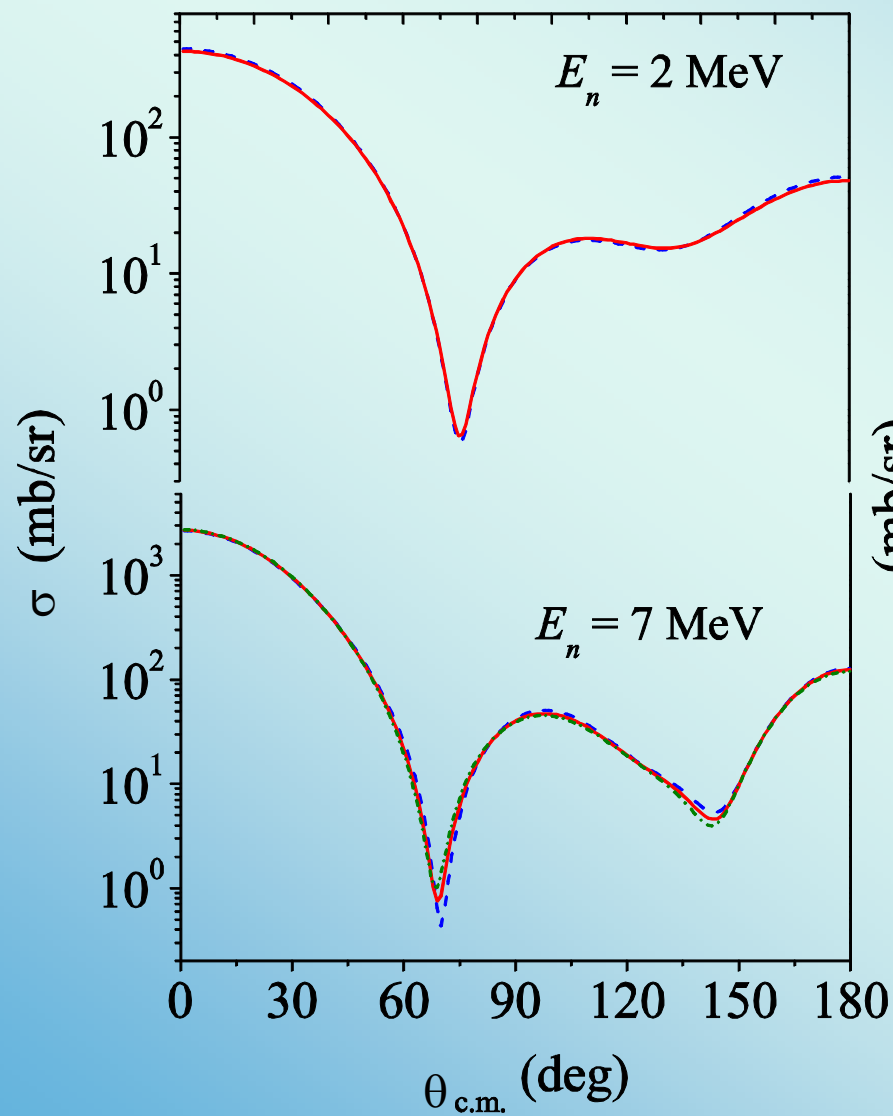
Комплексный нелокальный потенциал Перей-Бака

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



Действительная часть S-волнового фазового сдвига для нейтрон-ядерного рассеяния (a) и параметр неупругости (b), вычисленные через ФСС на базисе с размерностью $N=100$ (штриховые линии) и $N=200$ (сплошные).

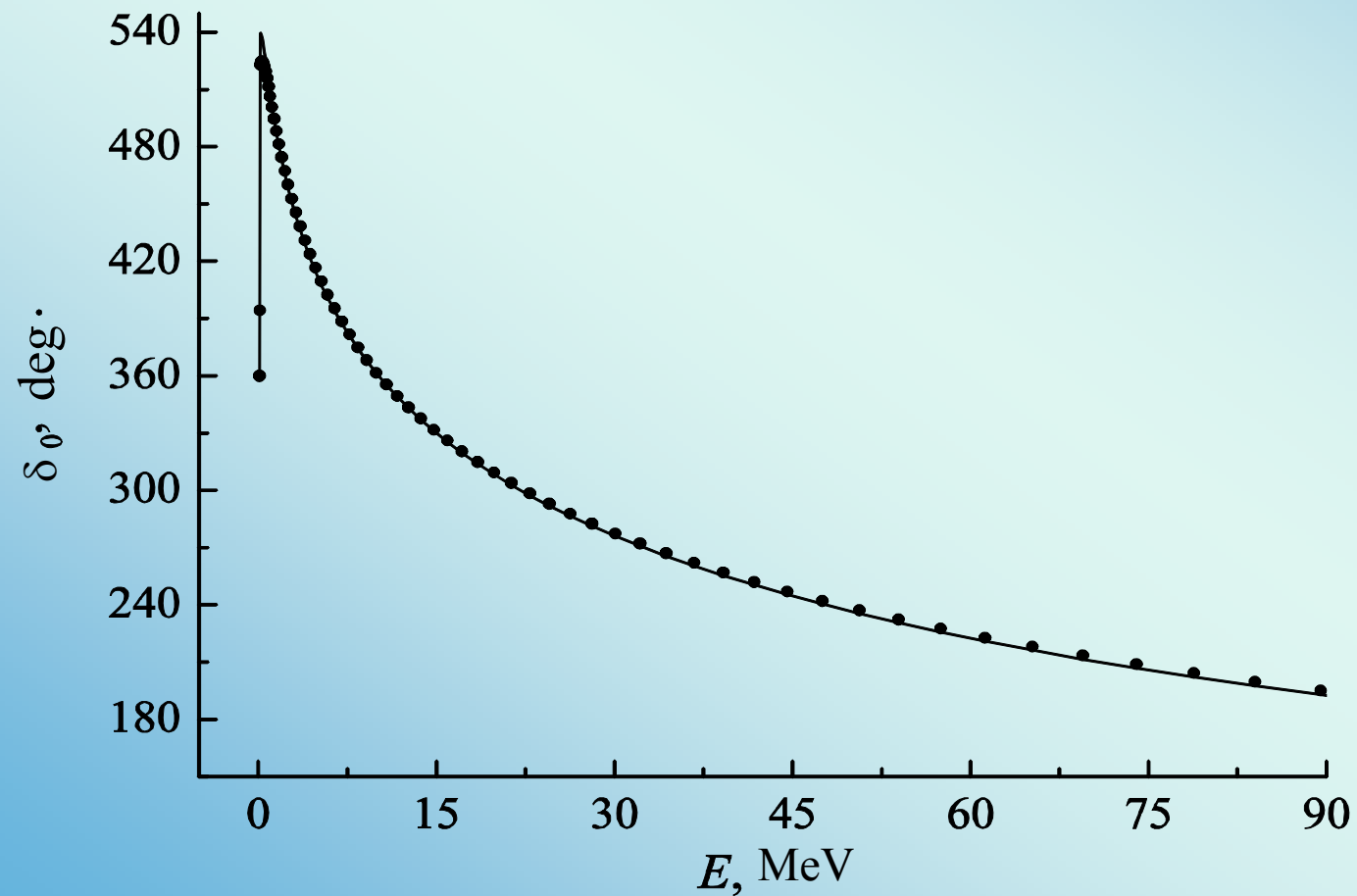
Сечения рассеяния для потенциала Перей-Бака



Рассеяние заряженных частиц

$$H_0 = H_C, \quad H = H_C + V$$

Кулоновско-ядерные S-волновые фазы α - α рассеяния



Многоканальная задача

Гамильтониан многоканальной задачи:

$$H_{\nu\nu'} = H_0^\nu \delta_{\nu\nu'} + V_{\nu\nu'}, \quad \nu = 1, \dots, K$$

Оператор рассеяния представляется матрицей, размерность которой равна числу открытых при рассматриваемой энергии каналов.

$$S = US'U^\dagger \quad S' = \begin{pmatrix} e^{2i\delta^{(1)}} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & e^{2i\delta^{(d)}} \end{pmatrix}$$

← S-матрица в представлении собственных каналов

Теория ФСС не позволяет определить отдельные элементы многоканальной S-матрицы.

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

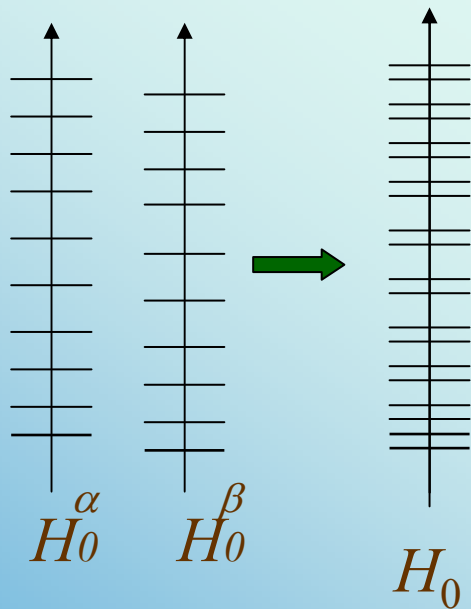
Также в многоканальном случае возникают проблемы с использованием L2 представления.

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 возникают трудности с трактовкой получающихся псевдосостояний.

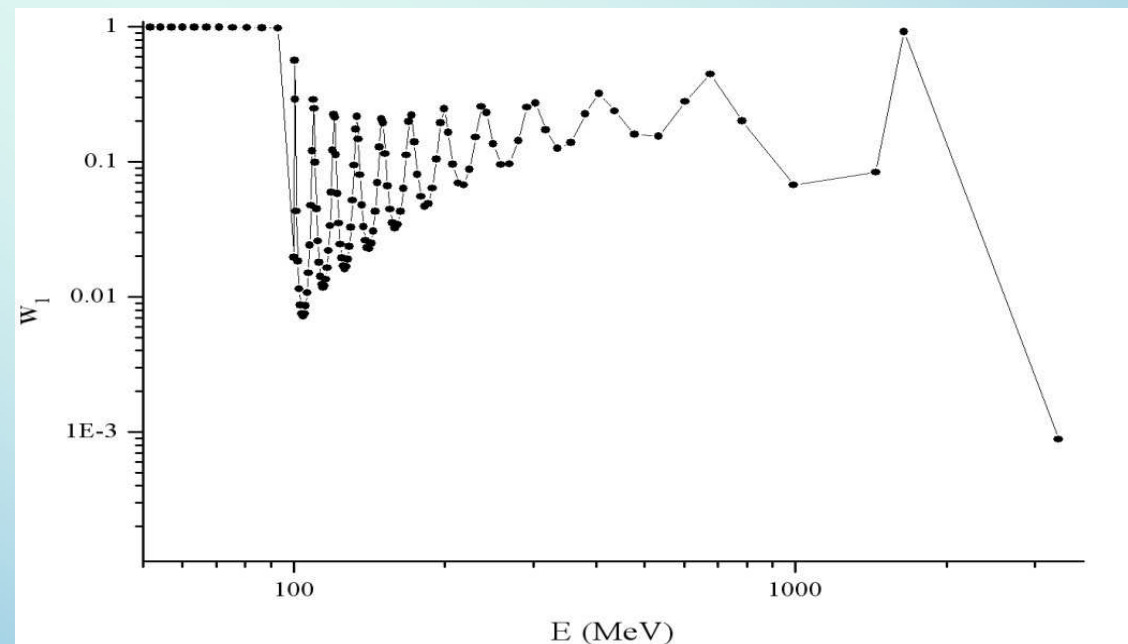
Например, рассмотрим двухканальную задачу в гауссовом базисе.
Определим базисные наборы для каждого из каналов:

$$|\phi_n^\alpha\rangle, n = 1, \dots, N_\alpha, \alpha = 1, 2$$

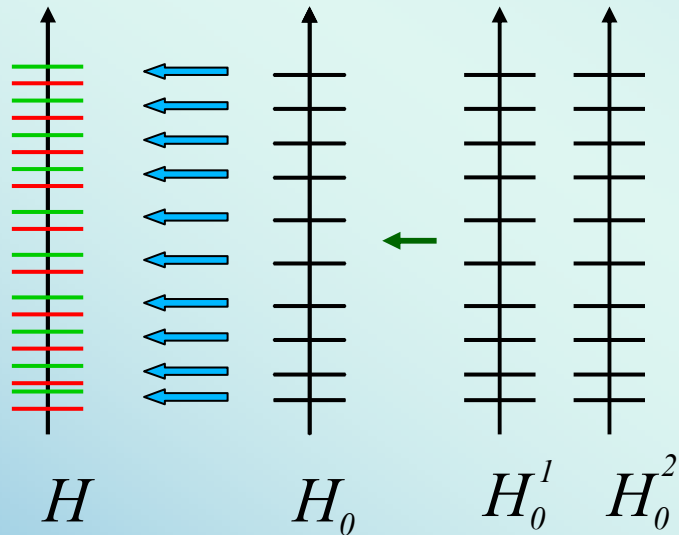
Диагонализуем в таком представлении матрицу полного гамильтониана и рассмотрим получившиеся псевдосостояния.



Вес компоненты 1 канала в функциях псевдосостояний модельной двухканальной задачи



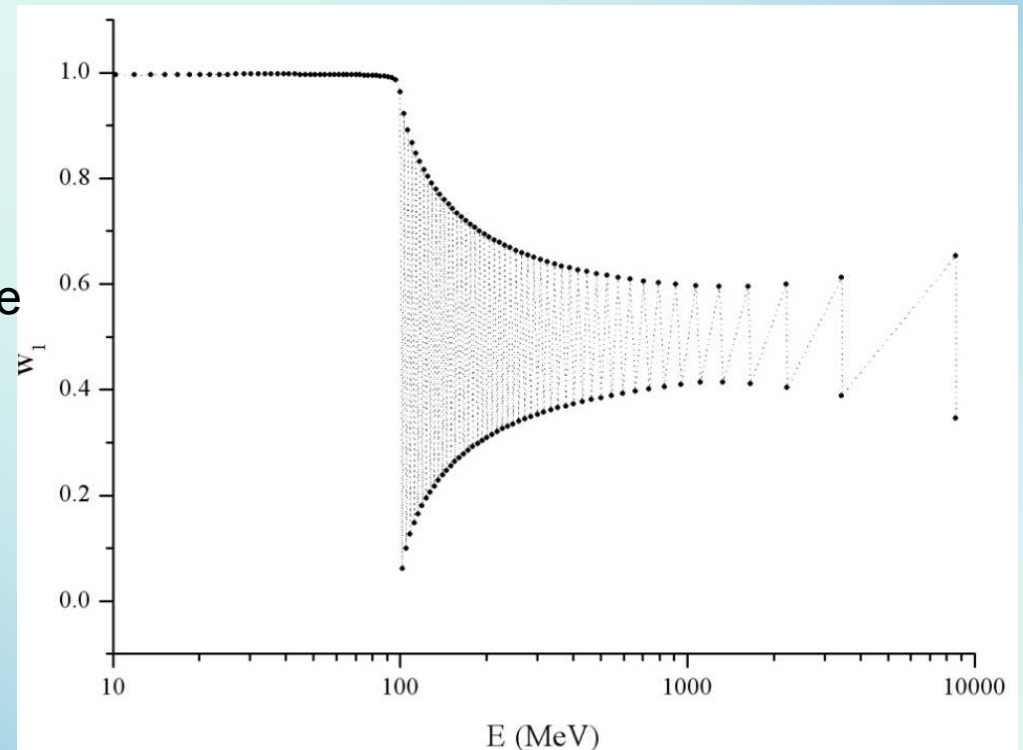
Для того, чтобы «сортировать» многоканальные псевдосостояния, нужно использовать базисные состояния, в которых дискретизованный спектр свободного гамильтониана **вырожден**.



В этом случае добавление взаимодействия снимает вырождение, и в спектре полного гамильтониана можно выделить перемежающиеся последовательности псевдосостояний.

В случае двухканальной задачи полный спектр состояний делится на две ветви. При этом наблюдается простое чередование состояний «четной» и «нечетной» ветвей.

$$w_1^{\text{even}} + w_1^{\text{odd}} = 1$$

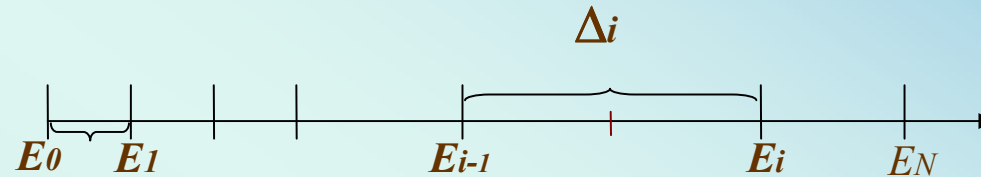


Построение вырожденного
дискретизованного спектра.

Stationary wave packets and their properties

PRC 79, 064602 (2009).

Discretization of the free Hamiltonian H_0 continuum



Discretization of momentum: $q_i = \sqrt{2mE_i}$.

Stationary wave packets:

$$|x_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{B_i}} \int_{q_{i-1}}^{q_i} f_i(q) |\psi_{0q}\rangle dq, \quad i = 1, \dots, N.$$

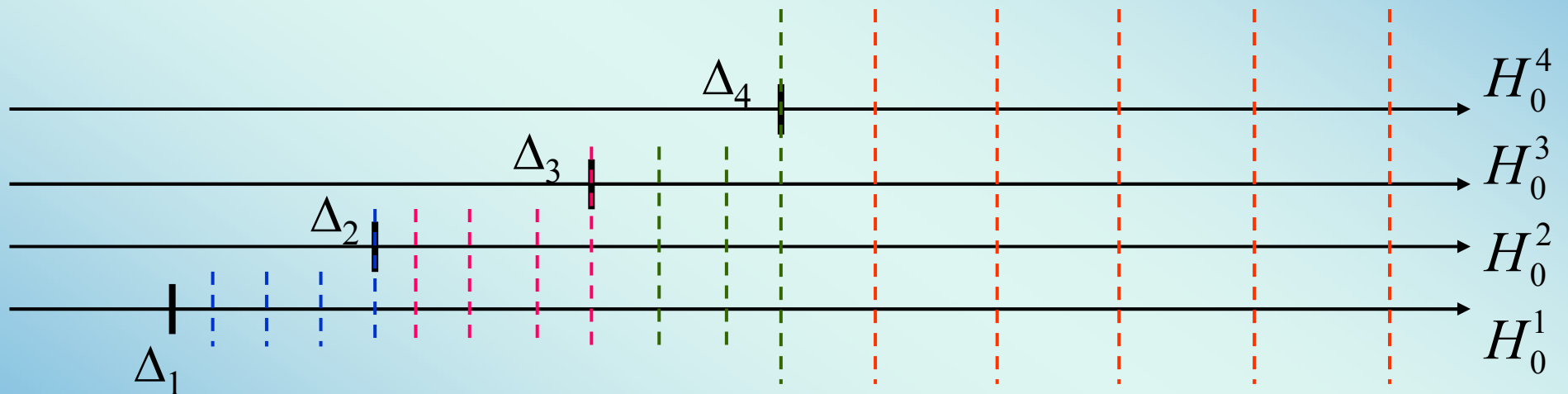
$f_i(q)$ — weight functions. $B_i = \int_{q_{i-1}}^{q_i} |f_i(q)|^2 dq$.

Wave packets form an orthonormalized set:

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \hat{P} = \sum_{i=1}^N |x_i\rangle \langle x_i| \text{ — the projector.}$$

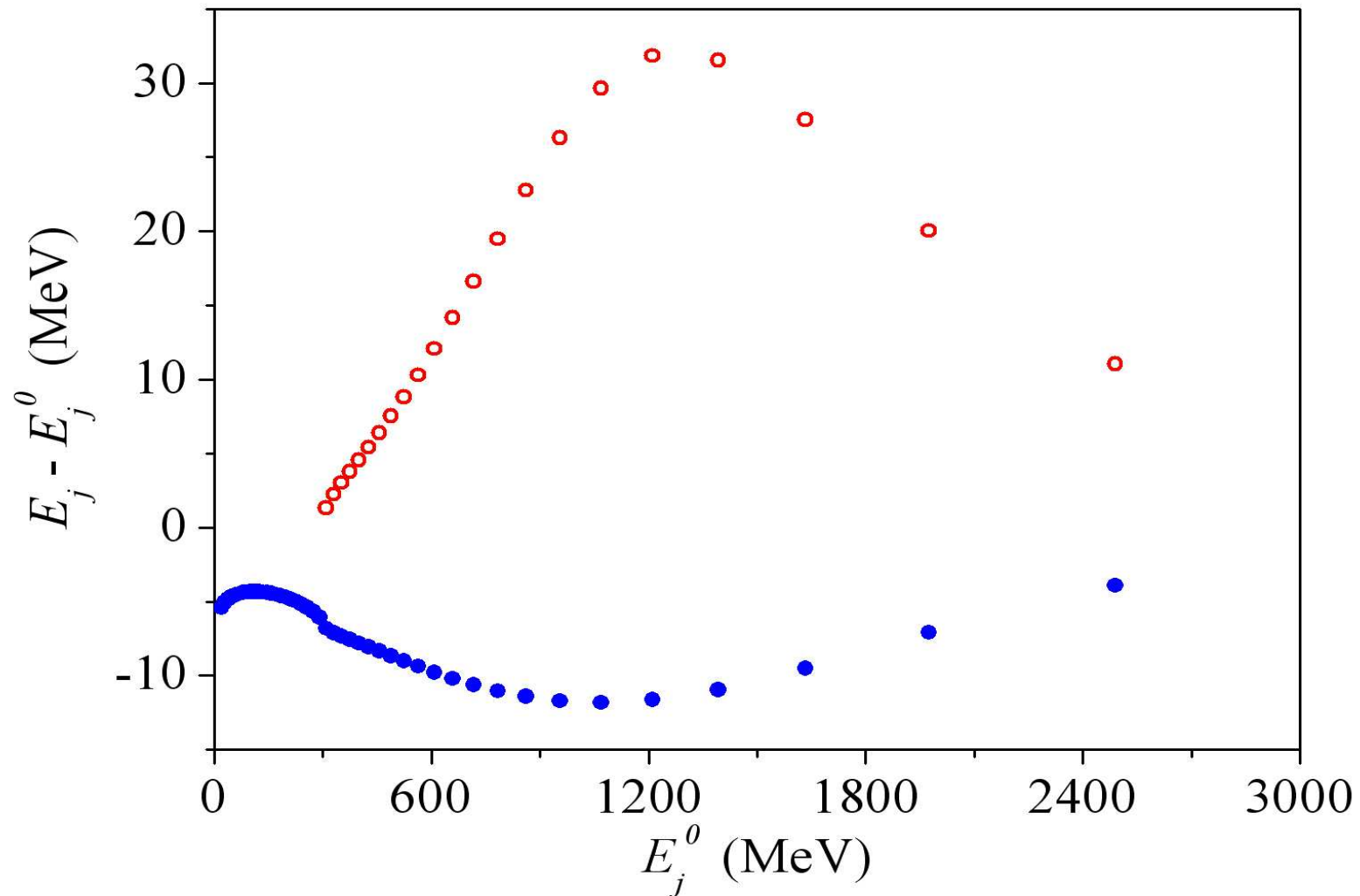
Многоканальный базис свободных волновых пакетов

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.

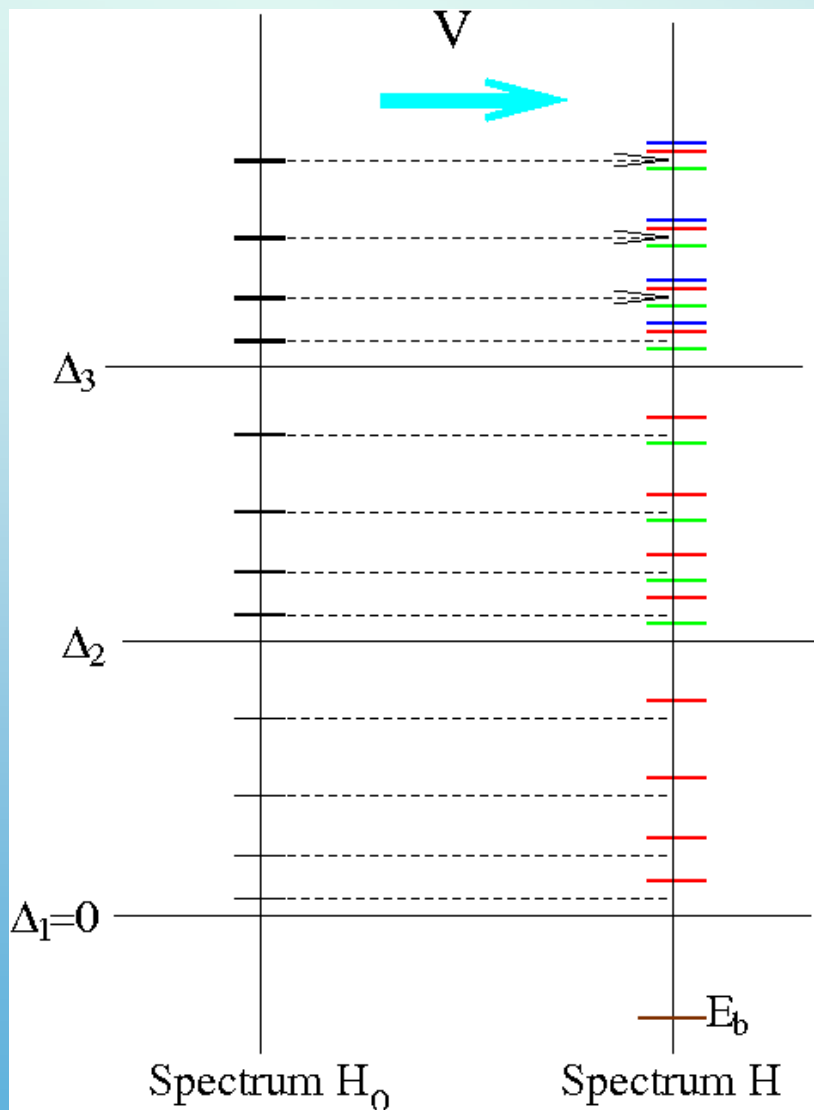


$$|x_i^{(v)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \int_{q_{i-1}}^{q_i} |\psi_0^{(v)}(q - \sqrt{2\Delta_v})\rangle dq$$

Сдвиги энергии для «четных» и «нечетных» уровней двухканальной задачи



Обобщение формализма ФСС на многоканальный случай



В многоканальной задаче с дискретным **вырожденным** спектром свободного гамильтониана каждому собственному значению этого спектра можно сопоставить набор собственных значений матрицы полного гамильтониана. Возникает прямое обобщение формулы И.М. Лифшица для энергий

$$E_j^{(\kappa)} = E_j^0 + \xi_j^{(\kappa)} D_j, \kappa = 1, \dots, d$$

d – кратность вырождения спектра

В отличие от одноканального случая здесь вместо одной ФСС возникает набор спектральных функций (для каждой ветви спектра):

$$\xi_j^{(\kappa)} = \frac{E_j^{(\kappa)} - E_j^0}{D_j}, \kappa = 1, \dots, d$$

Многоканальная S-матрица. Представление собственных каналов

Получающиеся псевдосостояния можно трактовать как псевдосостояния полного гамильтониана в представлении **собственных каналов**.

В представлении собственных каналов (**eigenchannel representation**) S-матрица диагональна.

$$S' = \begin{pmatrix} e^{2i\delta^{(1)}} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & e^{2i\delta^{(d)}} \end{pmatrix} \quad \det S = \exp\left(2i \sum_{\kappa=1}^d \delta^{(\kappa)}\right)$$

Обобщение формулы Бирмана-Крейна:

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

Таким образом, однократная диагонализация матрицы полного гамильтониана позволяет получить собственные фазовые сдвиги при многих энергиях одновременно. Этой информации достаточно, чтобы, например, построить полные сечения рассеяния.

Матрица поворота от представления исходных («наблюдаемых») каналов к представлению собственных каналов

При каждой энергии исходная S-матрица связана с диагональной поворотом

$$S_{\mu\nu}(E) = \sum_{\kappa=1}^d U_{\kappa\mu}(E) S^{\kappa}(E) U_{\kappa\nu}^*(E), \quad S^{\kappa} = \exp(2i\delta^{(\kappa)})$$

Элементы матриц поворота связаны с коэффициентами разложения возмущенных псевдосостояний по свободным

$$\left| z_j^{(\kappa)} \right\rangle = \sum_{\nu=1}^K \sum_{i=1}^{N_{\nu}} C_{ji}^{(\kappa\nu)} \left| x_i^{(\nu)} \right\rangle$$

Эти коэффициенты получаются наряду с собственными значениями энергии при диагонализации матрицы полного гамильтониана в пакетном базисе.

Для полной S-матрицы можно записать приближенное выражение

$$S_{\mu\nu}(E_i^0) \approx \sum_{\kappa=1}^d e^{2i\delta_i^{(\kappa)}} \sum_{j=1}^{N_{\kappa}} C_{ji}^{(\kappa\mu)} C_{ji}^{*(\kappa\nu)}$$

Например, в двухканальной задаче

$$S(E) = \begin{pmatrix} \cos \varepsilon & \sin \varepsilon \\ -\sin \varepsilon & \cos \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{2i\delta^{(1)}} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta^{(2)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varepsilon & -\sin \varepsilon \\ \sin \varepsilon & \cos \varepsilon \end{pmatrix}$$

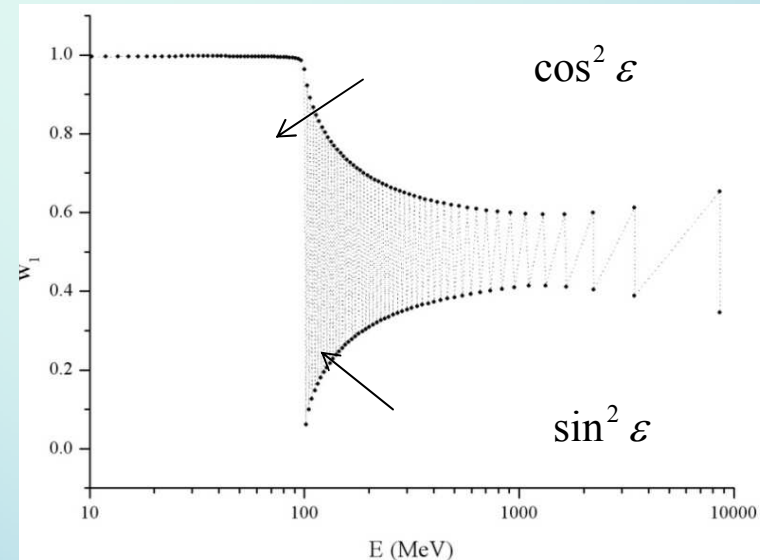
$$S_{11}(E) = e^{2i\delta^{(1)}} \cos^2 \varepsilon + e^{2i\delta^{(2)}} \sin^2 \varepsilon$$

Разложение для псевдосостояния, которое получается из диагонализации в пакетном базисе

$$|z_i^{(\kappa)}\rangle = \sum_{j=1}^N C_{ij}^{(\kappa 1)} |x_j^{(1)}\rangle + \sum_{j=1}^N C_{ij}^{(\kappa 2)} |x_j^{(2)}\rangle, \quad \kappa = 1, 2$$

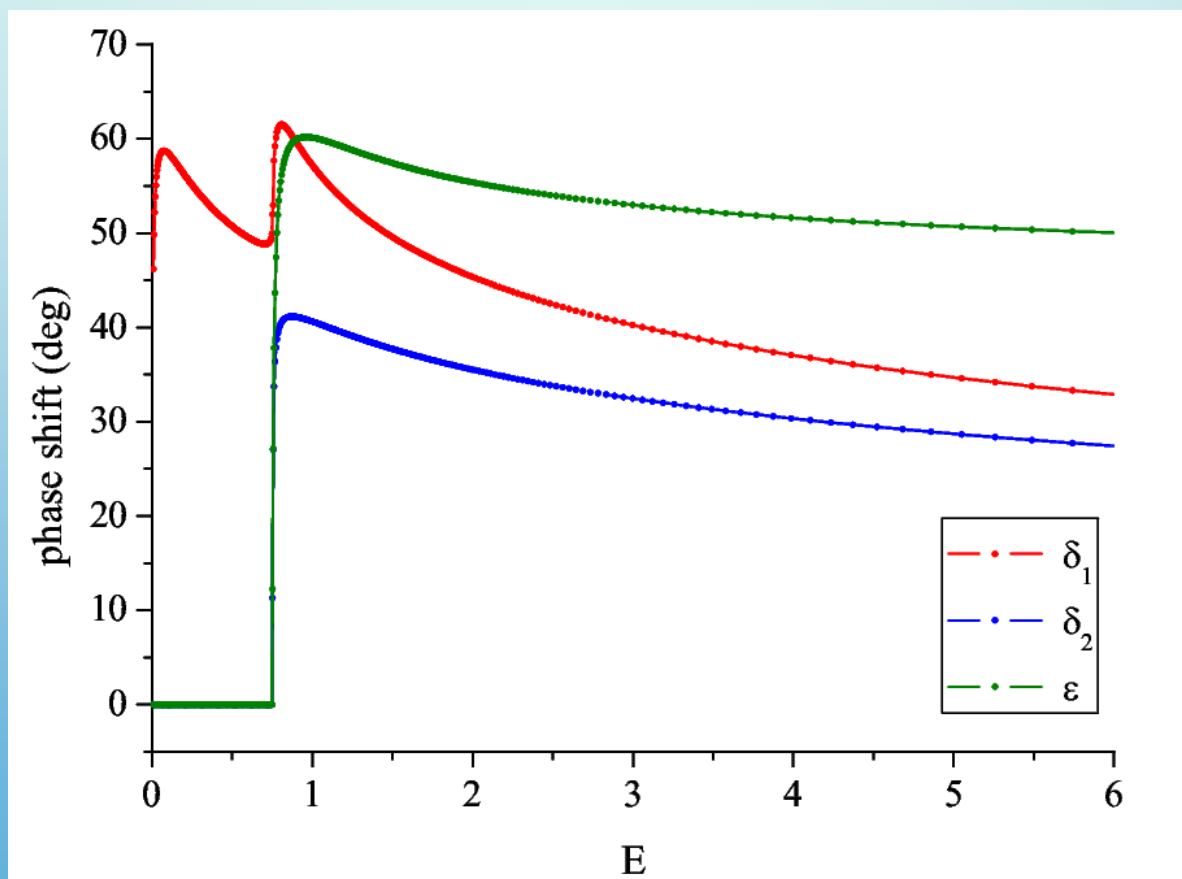
Тогда

$$\cos^2 \varepsilon(E_j^0) \approx \sum_{j=1}^N |C_{ij}^{(11)}|^2, \quad \sin^2 \varepsilon(E_j^0) \approx \sum_{j=1}^N |C_{ij}^{(21)}|^2,$$



Расчеты для модельного e-H рассеяния

Собственные фазовые сдвиги δ_1 и δ_2 и параметр смешивания ε

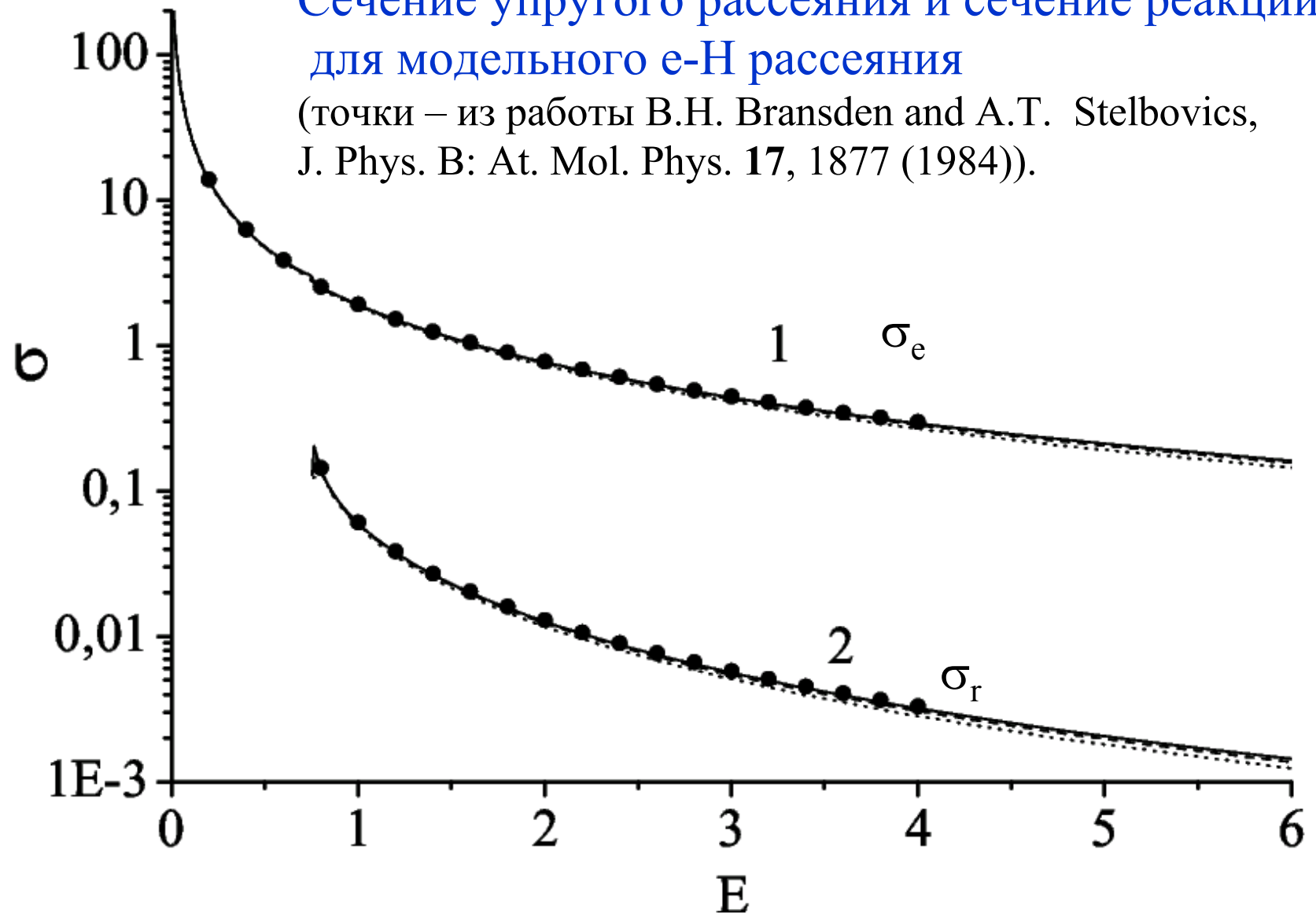


Модель Burke

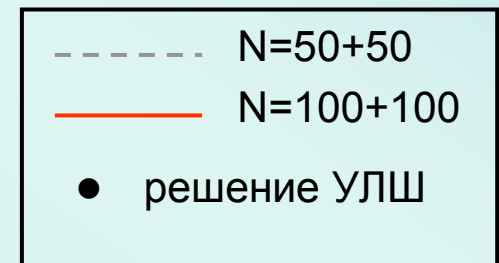
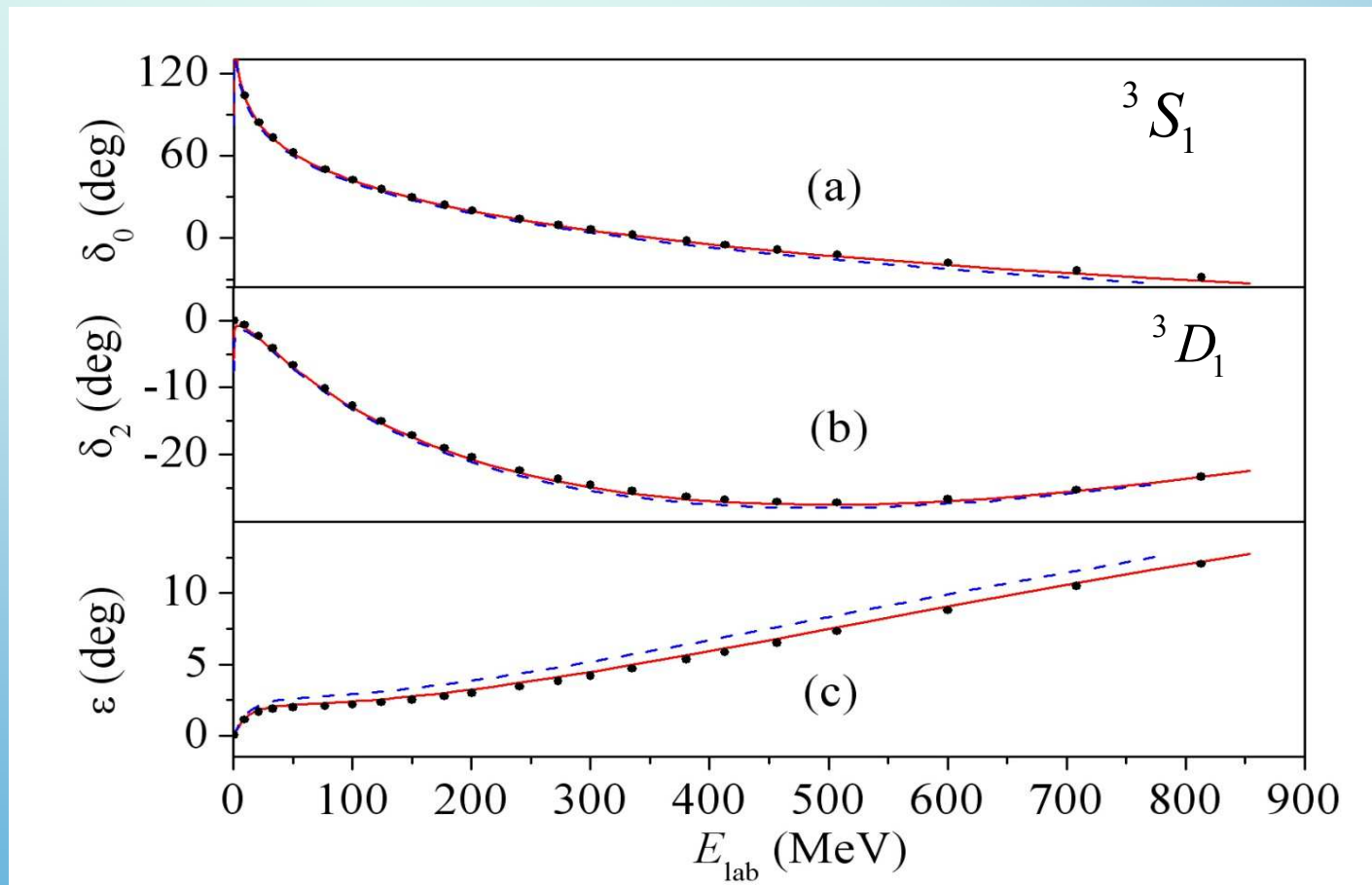
$$V_{11}=V_{22}=-1.5\exp(-r)/r$$
$$V_{12}=-0.25\exp(-r),$$
$$\Delta_2=0.75$$

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

(точки – из работы В.Н. Bransden and А.Т. Stelbovics,
J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, 1877 (1984)).



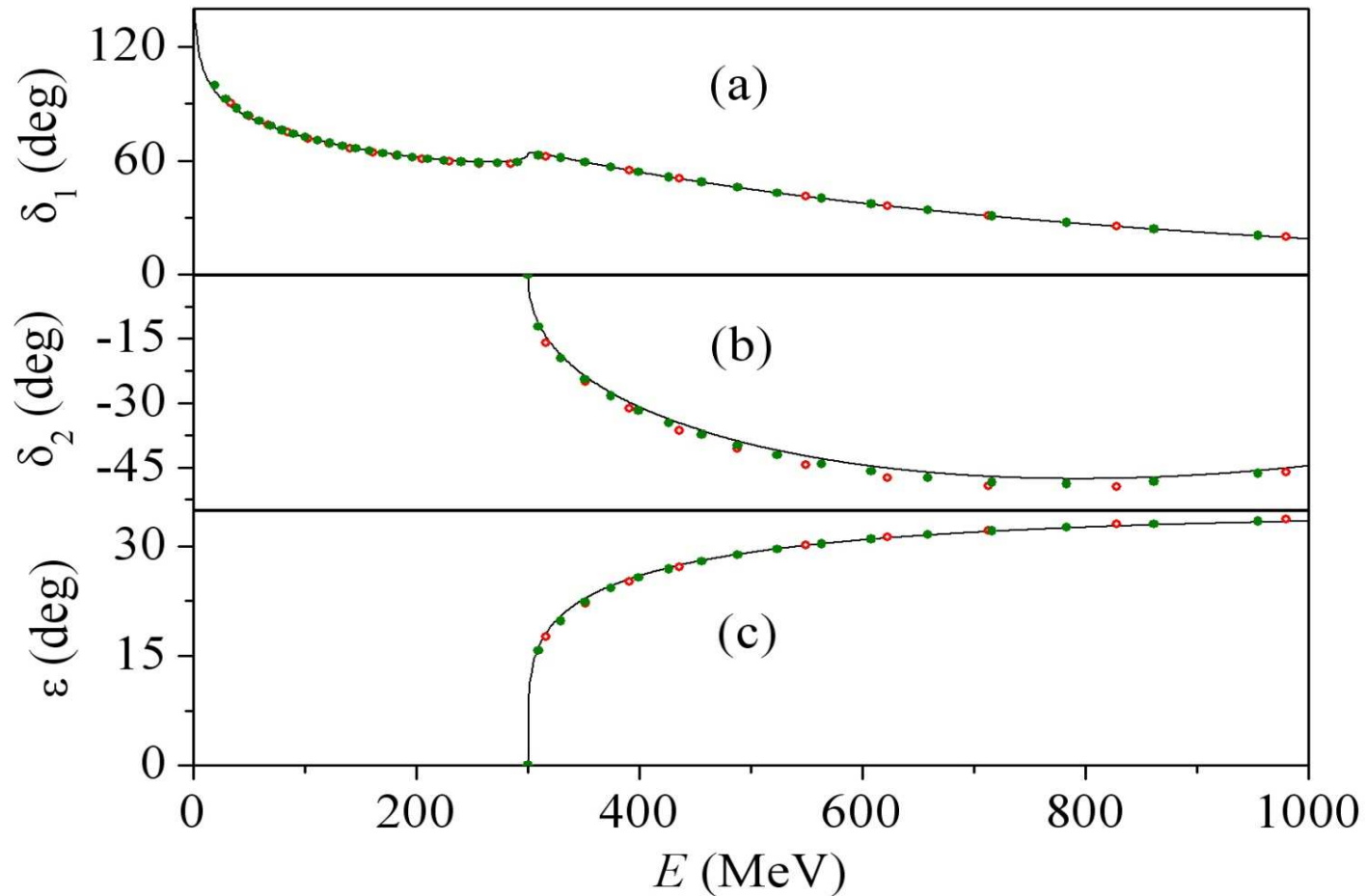
NN рассеяние с Московским потенциалом взаимодействия



Модельный «дибарионный» потенциал

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} T_{NN} + V_{NN} & \lambda |\varphi_{NN}\rangle \langle \varphi_{D\sigma}| \\ \lambda |\varphi_{D\sigma}\rangle \langle \varphi_{NN}| & E_0 + T_{D\sigma} \end{pmatrix}$$

Собственные фазовые сдвиги и параметр смешивания



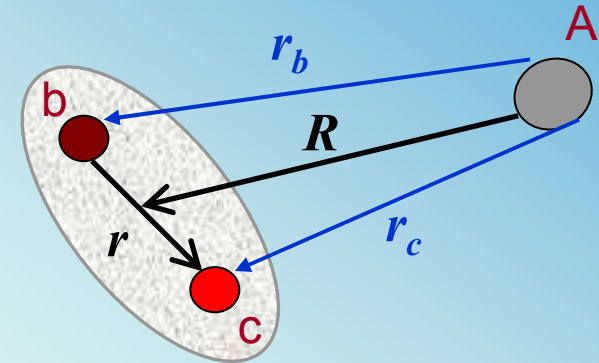
Рассеяние составной частицы в поле ядра

Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = h_0(\mathbf{R}) + h_{bc}(\mathbf{r}) + v_{bA}(r_b) + v_{cA}(r_c) = H_{bc} + V^{\text{ext}}$$

Гамильтониан канала определяет асимптотические состояния в системе:

$$H_{bc} = h_0(\mathbf{R}) \oplus h_{bc}(\mathbf{r})$$



Если дискретизовать спектр гамильтониана h_{bc} , и разложить волновую функцию по соответствующим псевдосостояниям

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \phi_0(\mathbf{r})\chi_0(\mathbf{R}) + \sum_v \phi_v(\mathbf{r})\chi_v(\mathbf{R}), \quad \langle \phi_v | h_{bc} | \phi_\mu \rangle = \varepsilon_v \delta_{v\mu},$$

трехчастичное уравнение Шредингера сводится к системе связи каналов

$$\left[h_0(\mathbf{R}) + V_{vv}^{\text{ext}}(\mathbf{R}) - (E - \varepsilon_v) \right] \chi_v(\mathbf{R}) = - \sum_{\mu \neq v} V_{v\mu}^{\text{ext}}(\mathbf{R}) \chi_\mu(\mathbf{R}), \quad v = 0, \dots, K,$$

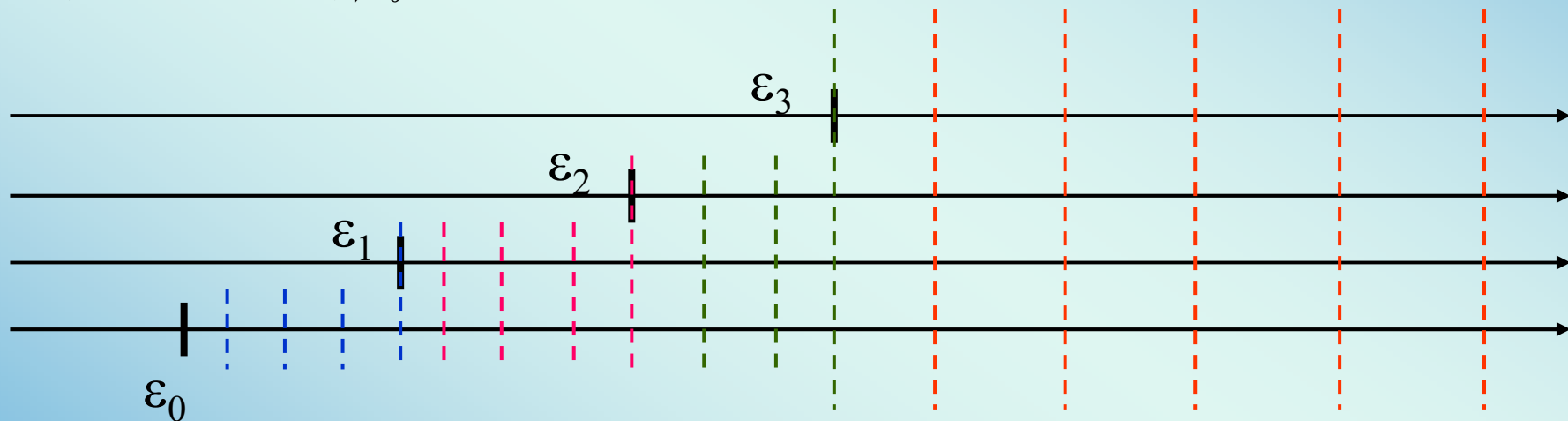
которую следует решать с учетом соответствующих граничных условий.

Используя метод дискретных спектральных сдвигов, получившаяся многоканальная система может быть решена на основе однократной диагонализации матрицы многоканального гамильтониана в многоканальном пакетном базисе.

При этом фактически используется трехчастичный пакетный базис,

$$\left\{ \left\{ \left| \phi_\nu, x_i^{(\nu)} \right\rangle \right\}_{i=1}^{N_\nu} \right\}_{\nu=0}^K$$

в котором матрица канального гамильтониана диагональна и имеет дискретный вырожденный спектр.



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

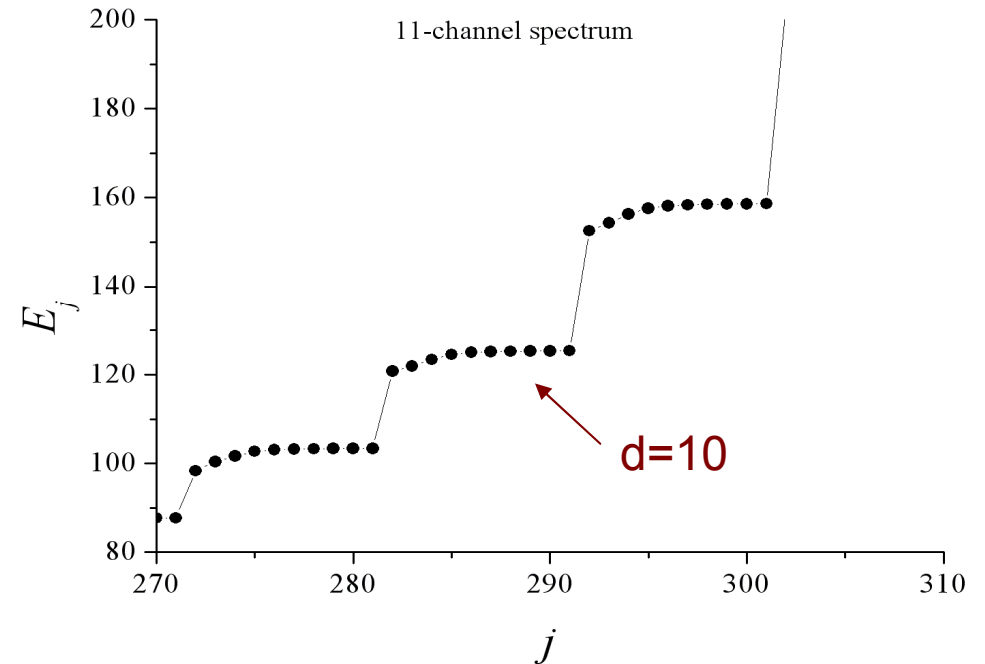
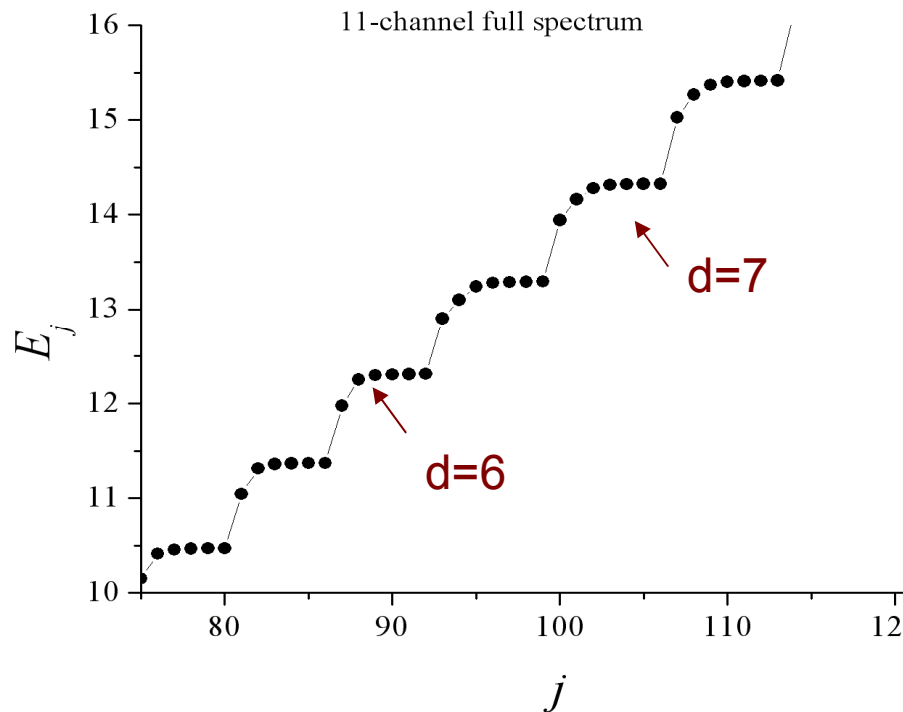
Собственные фазовые сдвиги и элементы матриц поворота находятся из диагонализации матрицы полного трехчастичного гамильтониана в пакетном базисе.

Модельная задача d+A рассеяния

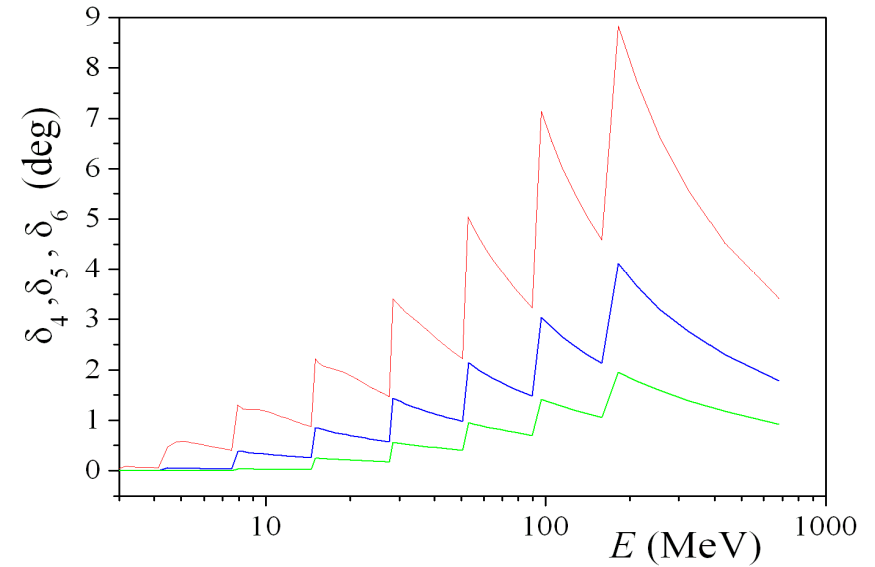
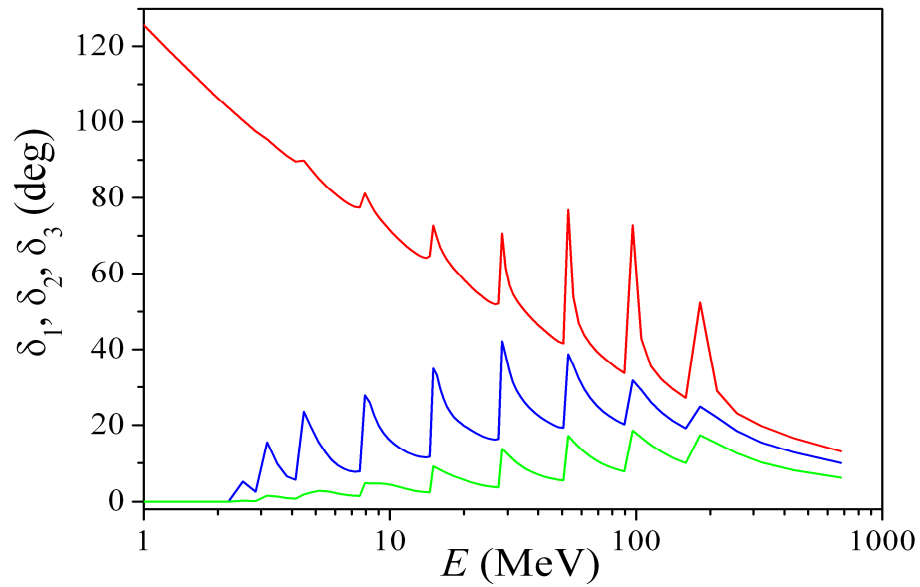
Двухчастичный гамильтониан h_{np} дискретизуется в гауссовом базисе размерности $K=11$.

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

Спектр собственных состояний полного трехчастичного гамильтониана



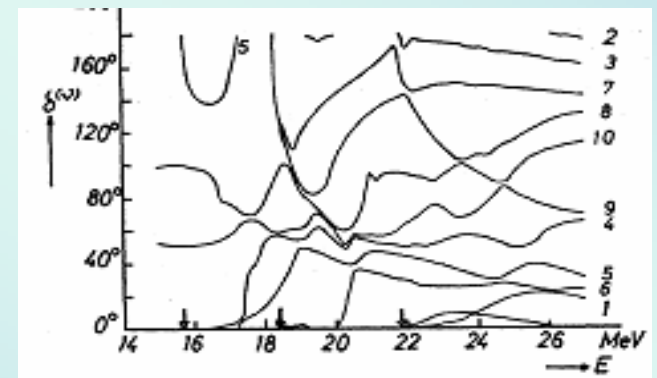
Собственные фазовые сдвиги рассматриваемой 11-канальной задачи



$$\delta_k \approx -\pi \frac{E_j^k - E_j^0}{D_j^0}$$

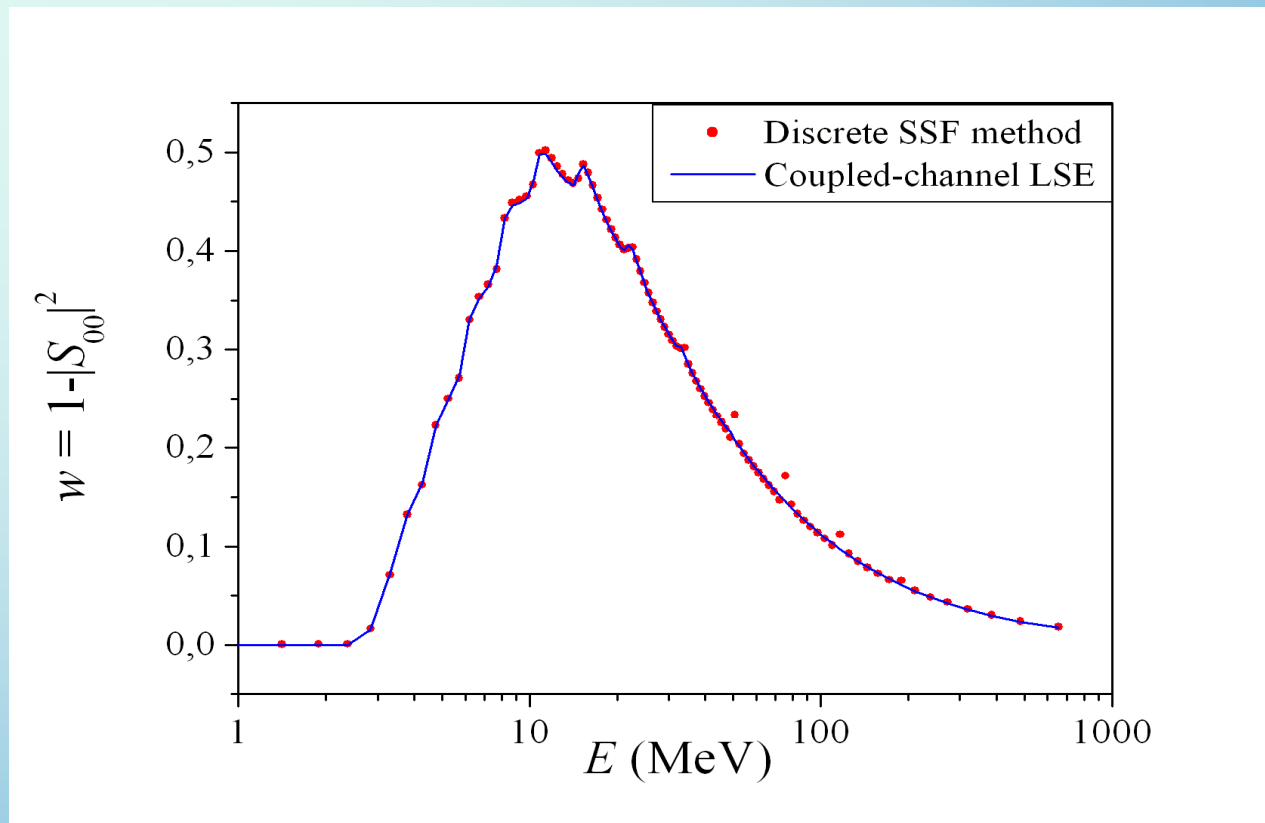
Собственные фазы из работы

H.G. Wahsweiler, W. Greiner, M. Danos, Phys. Rev. **170**, 893 (1968).



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).

Область применения дискретного формализма ФСС

1. Развитие математического аппарата теории ФСС в многоканальном случае.
2. Нахождение параметров резонансов, в т.ч. многоканальных.
3. Решение малочастичных (few-body) задач рассеяния.
4. Использование формализма дискретных спектральных сдвигов в квантовой статистике.

Связь квантовой статистики и теории рассеяния.

Второй групповой интеграл для статистики Больцмана

$$b_2 = \frac{\sqrt{2}}{\lambda^3} \text{Tr} \left(e^{-\beta H} - e^{-\beta H_0} \right)$$

Еще Бет и Уленбек в 1937г. показали, что этот групповой интеграл связан с фазой рассеяния в случае сферически симметричных потенциалов. Более позднее строгое доказательство было дано в работе В.С. Буслаева

$$b_2 = \frac{\sqrt{2}}{\lambda^3} \left[\sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i} + \frac{1}{2\pi i} \int dE e^{-\beta E} \text{Tr} \left(S^*(E) \frac{dS(E)}{dE} \right) \right]$$

Также В.С. Буслаев и С.П. Меркурьев показали, что третий групповой интеграл связан с трехчастичной S-матрицей.

Литература

M.Sh. Birman, A.V. Pushnitsky, *Spectral shift function, amazing and multifaceted*, Integr. equ. oper. theory **30**, 191 (1998).

М.Ш. Бирман, Д.Р. Яфаев, *Функция спектрального сдвига. Работы М.Г. Крейна и их дальнейшее развитие*, Алгебра и анализ, **4** (5) (1992).

F. Gesztesy, K.A. Makarov, A.K. Motovilov, *Monotonicity and concavity properties of the spectral shift function*, Canadian Mathematical Society Conference Proceedings **29**, 207 (2000).

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

В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, О.А. Рубцова, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 443 (2009).