

Метод комплексных вращений для систем нескольких частиц: теория и приложения к исследованию резонансов и процессов рассеяния.

XII Зимняя школа по теоретической физике
Е. Яревский

Санкт-Петербургский государственный университет

5 февраля 2014

Лекция 2

Вычисления резонансов в системах нескольких частиц. Примеры. Связь резонансов и поведения сечения рассеяния. Физический смысл резонансной функции.

Комплексные вращения

$$(U_1^\theta u)(x) = J(\theta)^{1/2} u[\phi_\theta(x)].$$

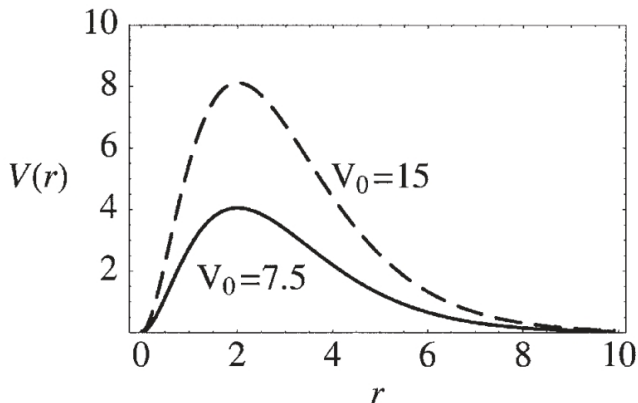
Модифицированный Гамильтониан:

$$H(\theta) = U_1^\theta (H_0 + V)(U_1^\theta)^{-1}.$$

Спектр $H(\theta)$:

- Все ветви непрерывного спектра H_0 поворачиваются на угол 2θ
- Энергии связанных состояний остаются неизменными
- Возникают новые комплексные точки дискретного спектра – резонансы. Их положение независимо от θ после превышения критического угла

Пример 1: потенциал

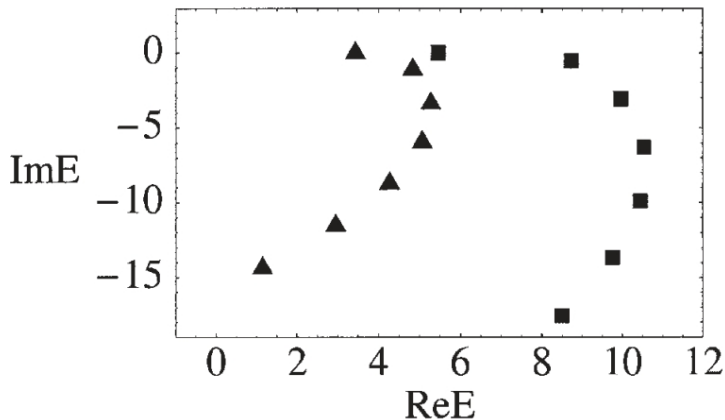


Потенциал

$$V(r) = V_0 r^2 \exp(-r).$$

Принадлежит классу $\mathcal{F}_{\pi/2}$.

Пример 1: резонансы

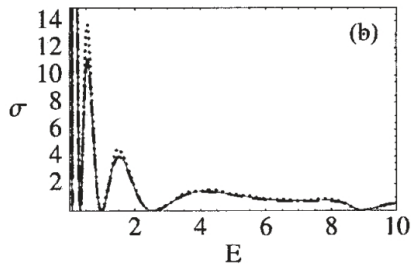
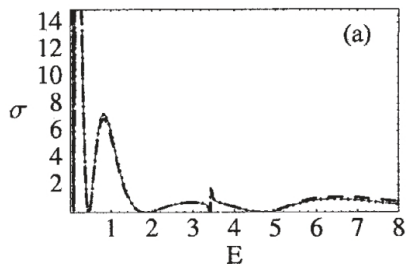


Комплексные собственные значения для потенциала с $V_0 = 7.5$ (треугольники) и $V_0 = 15$ (квадраты).

$V_0 = 7.5$: 3.4263903-i0.01277448, 4.8348068-i1.1178766, ...

$V_0 = 15$: 5.4622398-i0.5818 10^{-4} , 8.7255153-i0.5353910, ...

Пример 1: сечение рассеяния



S-волновое сечение рассеяния для потенциала $V_0 = 7.5$ (a) и $V_0 = 15$ (b).

Вычисление резонансов

Ищем собственные значения энергии:

$$H(\theta)\Psi_\theta = z\Psi_\theta.$$

Резонансные состояния для $H(\theta)$ – квадратично интегрируемы.

Можно искать с помощью разложения по разнообразным базисам:

$$\Psi_\theta = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i(x).$$

Оператор $H(\theta)$ – несимметричный!

Можно искать решение вариационной задачи: найти Ψ_θ и z такие, что

$$\langle H(\theta)\Psi_\theta, \Phi \rangle = z \langle \Psi_\theta, \Phi \rangle \quad \forall \Phi.$$

Естественно записывается в матричном виде:

$$\hat{H}(\theta)\vec{c} = z\hat{S}\vec{c}, \quad \hat{H}_{ij}(\theta) = \langle H(\theta)\varphi_i, \varphi_j \rangle, \quad \hat{S}_{ij} = \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle.$$

Это – обобщенная задача на собственные значения.

Матрица $\hat{H}(\theta)$ – симметричная (не комплексно-симметричная!).

Последствия дискретизации

Основная теорема о спектре для $\hat{H}(\theta)$ не выполняется!

Положения резонансов **зависят** от угла θ .

Точный аналог вариационного принципа для связанных состояний

$$z = \min_{\|\Psi_0\|=1} \langle H(0)\Psi_0, \Psi_0 \rangle$$

отсутствует для резонансов.

Аналог вариационного принципа:

$$\left. \frac{d\Re z}{d\theta} \right|_{\theta_r} = 0 \quad \text{и} \quad \left. \frac{d\Im z}{d\theta} \right|_{\theta_i} = 0.$$

Оптимальные углы θ_r и θ_i сходятся к одному углу с повышением точности вычислений.

Дважды возбужденные состояния атома гелия

Система трех частиц с парными кулоновскими взаимодействиями, дискретные степени свободы могут быть отделены (четность, полный угловой момент).
Разлагаем решения по D -функциям Вигнера:

$$\Psi_m^{L\tau} = \sum_s^L \frac{1}{\sqrt{2 + 2\delta_{s0}}} \left(D_{ms}^L(\alpha, \beta, \gamma) + \tau(-1)^s D_{m-s}^L(\alpha, \beta, \gamma) \right) \psi_s^{L\tau}(\mathbf{R}).$$

α, β, γ – углы Эйлера.

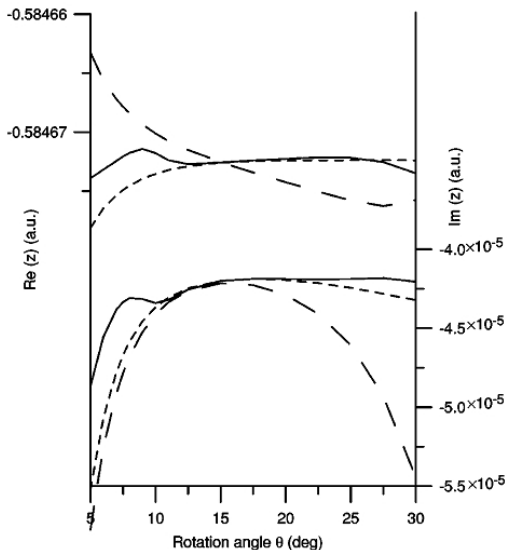
$\mathbf{R} = \{r_1, r_2, c\}$, где r_i – расстояние от i -го электрона до ядра, и $c = \cos(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$.

Подстановка такого представления в уравнение Шредингера приводит к конечной системе трехмерных дифференциальных уравнений.

Соответствующий Гамильтониан – матричный трехмерный диф.оператор.

Может быть преобразован с помощью комплексного преобразования координаты \mathbf{R} .

Дважды возбужденные состояния атома гелия



Вещественная (верх) и мнимая (низ) части $3P^0(1)$ резонанса как функции угла θ .

Резонансы ван-дер-Ваальсова комплекса Ne-ICI

30 резонансов при $J = 0$ для $v = 2$ состояния |C|.

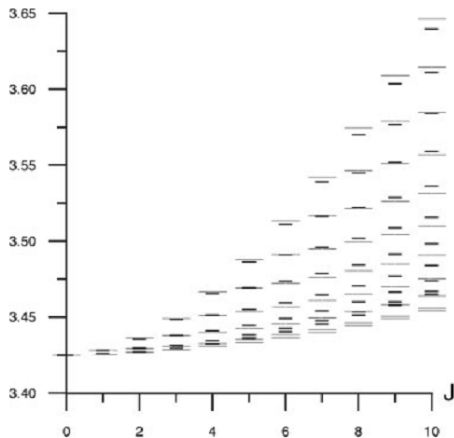


FIGURE 2. The resonance positions E_1 (in 10^2 cm^{-1})

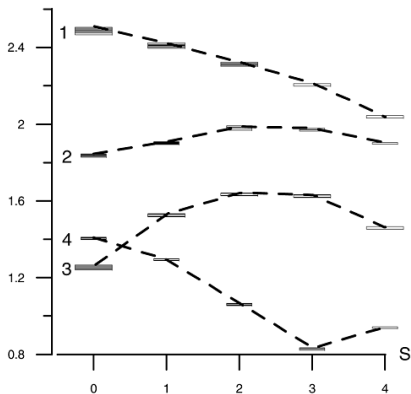


FIGURE 5. The dependence of the resonance widths (in 10^{-3} cm^{-1}) on the component number s for the four resonances given in Table IV. For every resonance, the

Влияние резонансов на сечение рассеяния

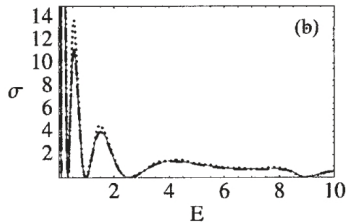
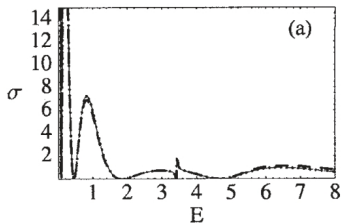
Теорема Миттаг-Леффлера (Mittag-Leffler) о представлении мероморфной функции.
Разложение парциальной S -матрицы:

$$S_{\ell}(E) = \sum_j^N \frac{\text{Res}[S_{\ell}(z_j)]}{E - z_j} + \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{S_{\ell}(z)}{(z - E)} dz .$$

Значения резонансных вычетов $\text{Res}[S_0(z_j)]$:

$V_0 = 7.5$: $(-0.956 - i0.208) 10^{-2}$, $-0.196 + i0.960$, ...

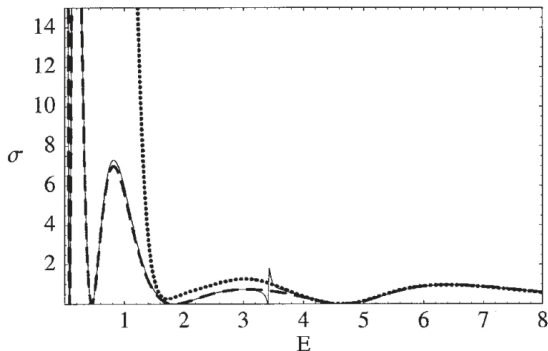
$V_0 = 15$: $(0.221 + i0.273) 10^{-4}$, $0.2802 + i0.2069$, ...



Влияние резонансов на сечение рассеяния

Исключение вклада резонанса в сечение:

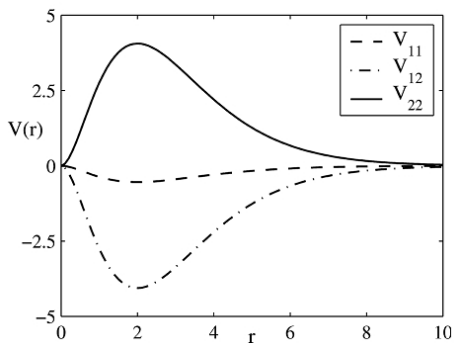
$$\tilde{S}_\ell(E, z_i) = S_\ell(E) - \frac{\text{Res}[S_\ell(z_i)]}{E - z_i}.$$



S-волновое сечение рассеяния: полное и с исключенным вкладом первого резонанса ($V_0 = 7.5$)

Двухканальная модельная система (Noro-Taylor potential)

$$\mathbf{V}(r) = \begin{bmatrix} -r^2 e^{-r} & -7.5r^2 e^{-r} \\ -7.5r^2 e^{-r} & 7.5r^2 e^{-r} + 0.1 \end{bmatrix}.$$



Двухканальная модельная система (Noro-Taylor potential)

Схема спектра системы при комплексных вращениях:

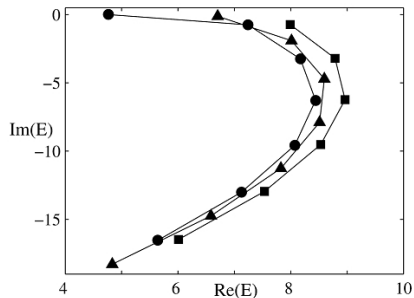
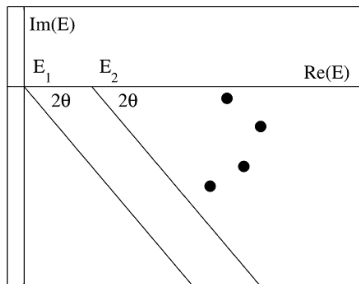


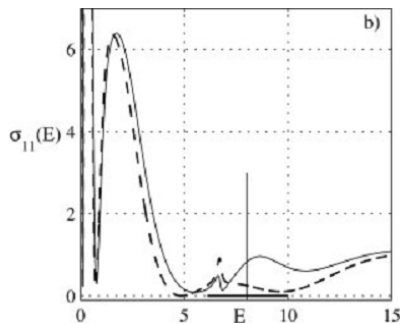
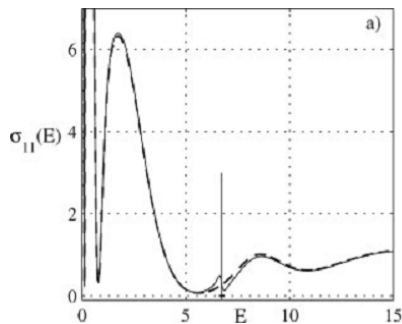
FIGURE 3. Complex eigenvalues for the Noro-Taylor potential. Energies for $\ell = 0$ are marked with circles, for $\ell = 1$ and $\ell = 2$ with triangles and squares, respectively.

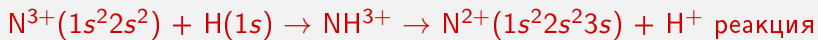
Двухканальная модельная система (Noro-Taylor potential)

The resonance energies obtained for the Noro-Taylor potential for $\ell = 1, 2$.

nr.	$\ell = 1$			$\ell = 2$		
	ϑ_R	$\text{Re}(E)$	$\text{Im}(E)$	ϑ_R	$\text{Re}(E)$	$\text{Im}(E)$
1	1.074	6.703719	-0.125653	5.285	7.990973	-0.739155
2	13.48	8.012942	-1.920165	20.08	8.785076	-3.212051
3	28.77	8.595336	-3.059822	34.80	8.963076	-6.230228
4	42.82	8.511458	-4.718772	48.13	8.530920	-9.516225
5	55.19	7.824340	-11.256937	59.82	7.532637	-12.952033
6	65.93	6.584809	-14.741148	69.96	6.009227	-16.471597

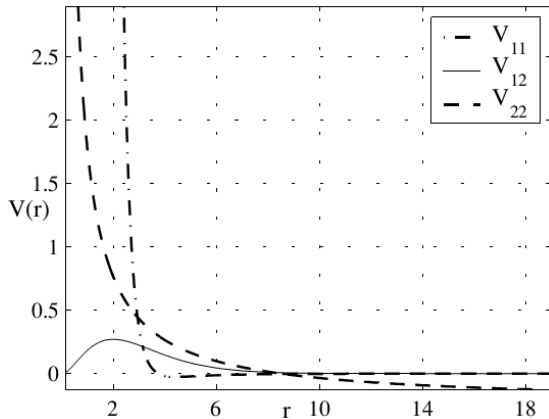
ϑ_R is the resonance angle in degrees.





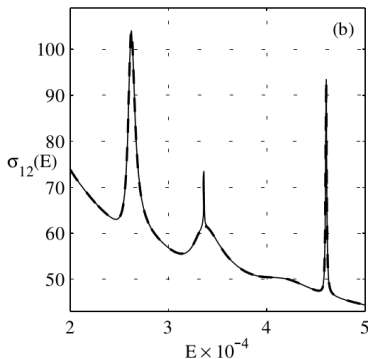
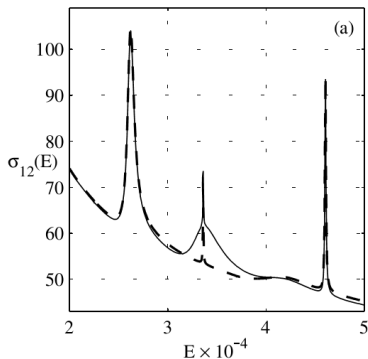
Пороги: $E_1 = 0$, $E_2 = -0.235$.

Приведенная масса $\mu = 1713.5$.



$N^{3+}(1s^2 2s^2) + H(1s) \rightarrow NH^{3+} \rightarrow N^{2+}(1s^2 2s^2 3s) + H^+$ реакция

ℓ	Re (E) $\times 10^{-4}$	Im (E) $\times 10^{-6}$
14	0.402 651	-0.581 634
17	0.770 981	-0.195 283
18	1.203 721	-2.633 764
21	1.888 127	-0.470 838
22	2.616 842	-3.983 628
23	3.335 315	-14.901 49
25	3.358 457	-0.347 933
26	4.601 989	-0.658 896



Парциальные ширины распада в многоканальной системе

Асимптотическое поведение волновой функции резонанса:

$$\varphi(r) \rightarrow \mathcal{A}(\mu/k)^{1/2} \exp(ik\phi_\theta(r)).$$

Эта в.ф. – аналитическое продолжение Siegert в.ф.:

$$\psi_{Sieg}(r) \rightarrow \mathcal{A}(\mu/k)^{1/2} \exp(ikr).$$

Введем оператор

$$j = \frac{1}{2\mu i} \left(\psi_{Sieg}^* \frac{d\psi_{Sieg}}{dr} - \psi_{Sieg} \frac{d\psi_{Sieg}^*}{dr} \right).$$

Его среднее значение:

$$\langle j \rangle = \Gamma = |\mathcal{A}|^2.$$

Тогда ширину можно найти как

$$\Gamma = \lim_{r \rightarrow +\infty} |\varphi(r)g(r)|^2, \quad \text{где} \quad g(r) = (k/\mu)^{1/2} \exp(-ik\phi_\theta(r)).$$

В многоканальном случае:

$$\Gamma_j = \lim_{r \rightarrow +\infty} |k_j^{1/2} \varphi_j^{res}(r) \exp(-ik_j\phi_\theta(r))|^2.$$

Ядро углерода ^{12}C

- Process: formation of ^{12}C nucleus from three α particles due to a resonant reaction
- Place and conditions: in the centres of stars, at temperatures from 10^7 K to 10^{10} K (most important range 10^8 K to 10^9 K)
- Significant for:
 - determining elemental abundances in the Universe
 - determining the size of the iron core of a star just before it goes supernova

Резонансы в 3α кластерной модели ядра ^{12}C

Полное взаимодействие:

$$\hat{V} = \sum_{\alpha=1}^3 V_c(x_\alpha) + \sum_{\alpha=1}^3 V_s(x_\alpha) + V_3(x_1, x_2, x_3)$$

Кулоновский потенциал:

$$V_c(r) = \frac{4e^2}{r}$$

Парное взаимодействие в $\alpha - \alpha$ системе (Ali-Bodmer), в каждой волне:

$$V_s^{(l)}(r) = V_1^{(l)} \exp\left(-\left(\frac{r}{\beta_1^{(l)}}\right)^2\right) + V_2^{(l)} \exp\left(-\left(\frac{r}{\beta_2^{(l)}}\right)^2\right)$$

Эффективное трехчастичное взаимодействие:

$$V_3(x_1, x_2, x_3) = V \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{3\beta^2}\right)$$

Теоретическая картина структуры резонансов

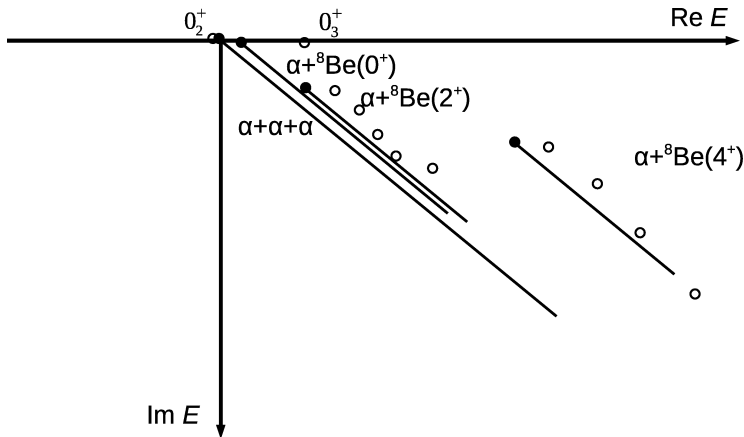


Рис.: Спектр ядра ^{12}C после комплексного вращения

Широкие резонансы

Таблица: Energies $E_r - i\Gamma/2$ of first resonances of ^8Be system.

	$E_{l=0}$, KeV	$E_{l=2}$, MeV	$E_{l=4}$, MeV
M1	$92.7 - 3 \cdot 10^{-3}i$	$2.70 - 0.77i$	
M2	$93.9 - 3 \cdot 10^{-3}i$	$2.90 - 0.64i$	$11.6 - 1.55i$

Таблица: Energies (MeV) of wide resonance states of ^{12}C

M1	M2
$3.3 - 1.0i$	$3.7 - 0.9i$
$3.7 - 1.2i$	$4.1 - 1.0i$
$4.0 - 1.3i$	$4.5 - 1.2i$
$4.2 - 1.6i$	$4.9 - 1.4i$
$4.5 - 2.0i$	$5.3 - 1.7i$
	$5.6 - 2.1i$
	$15.1 - 1.9i$
	$14 - 2i$
	$16 - 3i$
	$17 - 4i$
	$18 - 4i$
	$19 - 6i$

Резонансы: цифры в цвете

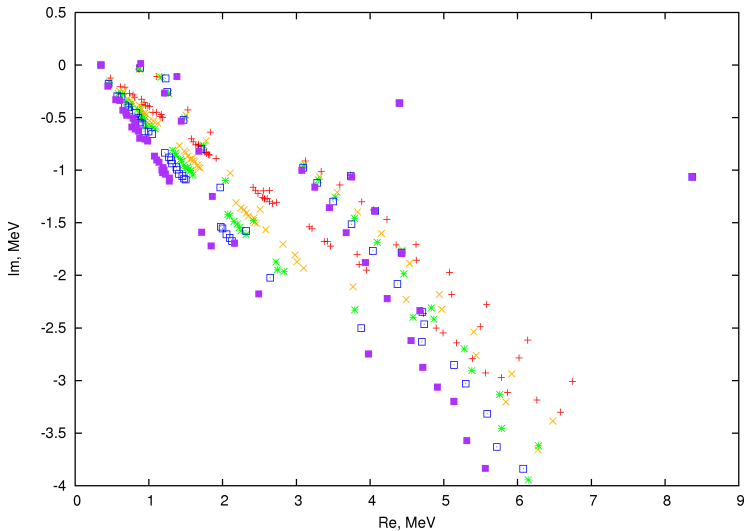


Рис.: Дискретизованный комплексно повернутый спектр ядра ^{12}C

Резонансы: просто цифры

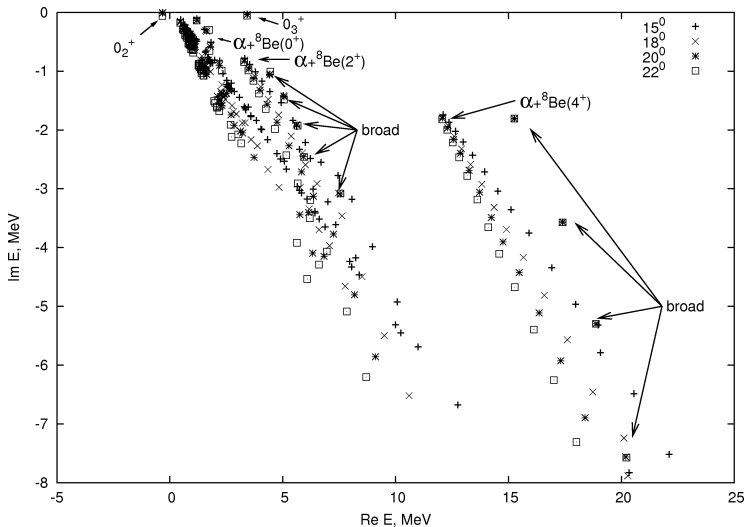


Рис.: Дискретизованный комплексно повернутый спектр ядра ^{12}C