

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

6 февраля 2014

Лекция 3

Использование метода комплексных вращений для решения задачи рассеяния. Особенности применения для короткодействующих, далекодействующих и кулоновских потенциалов.

Асимптотическое поведение плоских волн

Проблема при решении задачи рассеяния для систем нескольких частиц: сложные асимптотические граничные условия.

Можно ли упростить их с использованием метода комплексных вращений?

Асимптотическое поведение комплексного аргумента:

$$\phi_{\theta}(r) \sim \text{const} + r \exp(i\theta) \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Для расходящейся волны e^{ikr} на комплексной траектории $\phi_{\theta}(r)$

$$e^{ik\phi_{\theta}(r)} \sim \text{const} e^{ikr \exp(i\theta)} = \text{const} e^{ikr \cos \theta} e^{-kr \sin \theta}.$$

Сходящаяся волна e^{-ikr} (и линейные комбинации волн) экспоненциально растут на больших расстояниях.

Задача рассеяния для короткодействующих потенциалов

Формулировка задачи рассеяния в виде неоднородного уравнения Шредингера:
J. Nuttall and H.L. Cohen, Phys. Rev. **188**, 1542 (1969).

$$(H_0 + V - E)\Psi = 0$$

Представление решения Ψ в виде

$$\Psi = \Psi^{in} + \Psi^{dr}$$

Поскольку $(H_0 - E)\Psi^{in} = 0$, то

$$(H_0 + V - E)\Psi^{dr} = -V\Psi^{in}$$

В Ψ^{dr} нет сходящейся волны \rightarrow применим однородное комплексное вращение:

$$U^\theta \Psi^{dr} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty.$$

Правая часть – возможен экспоненциальный рост на больших расстояниях!

Его отсутствие гарантировано, если

$V(x)$ – финитный, или экспоненциально убывает.

Задача рассеяния для некороткодействующих некулоновских потенциалов

Решение проблемы предложено в
T.N. Rescigno, M. Baertschy, D. Byrum, C.W. McCurdy,
Phys. Rev. **A55**, 4253 (1997)

Срезка потенциала: $V \rightarrow V_R$,

$$V_R(r) = \begin{cases} V(r), & r \leq R \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

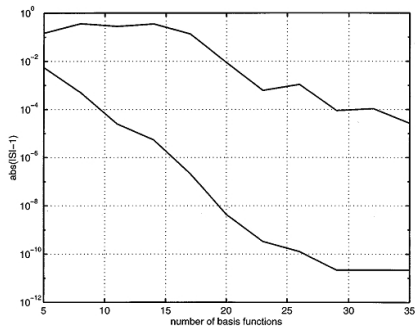
Потенциал V_R неаналитичен при $r \leq R \rightarrow$ требуется внешнее комплексное вращение с $Q \geq R$.

Тогда

$$U^\theta [V_R \Psi^{in}](r) = 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty.$$

Примеры расчетов амплитуд рассеяния

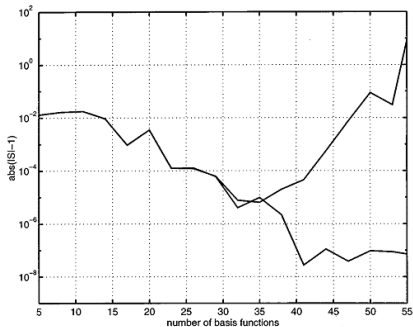
Унитарность S-матрицы:



Потенциал $V(r) = -e^{-r}$

Верхняя кривая – внешнее вращение.

Нижняя кривая – однородное вращение.



Потенциал $V(r) = 1/(1+r)^4$

Верхняя кривая – необрезанный потенциал.

Верхняя кривая – обрезанный потенциал.

$e^- + H$ рассеяние.

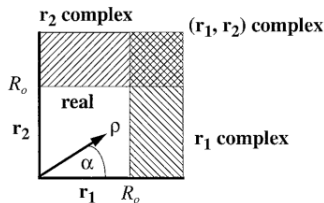
T.N. Rescigno, M. Baertschy, W.A. Isaacs, C.W. McCurdy, *Science* **286** 2474 (1999),
Collisional Breakup in a Quantum System of Three Charged Particles

Уравнение для системы трех частиц:

$$\begin{aligned} (H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - E) \Psi^{sc}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= - (H(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - E) \left(\varphi_{1s}(\vec{r}_1) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2} \pm \varphi_{1s}(\vec{r}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \right) \\ &= - (1 + (-1)^S P_{12}) \left(\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_2|} \right) \varphi_{1s}(\vec{r}_1) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2}. \end{aligned}$$

Волновая функция ищется в виде:

$$\Psi^{sc}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{r_1 r_2} \sum_{L_{h_1 h_2}} \psi_{h_1 h_2}^L(r_1, r_2) \mathcal{Y}_{h_1 h_2}^L(\hat{r}_1, \hat{r}_2).$$



$e^- + H$ рассеяние. Радиальные волновые функции.

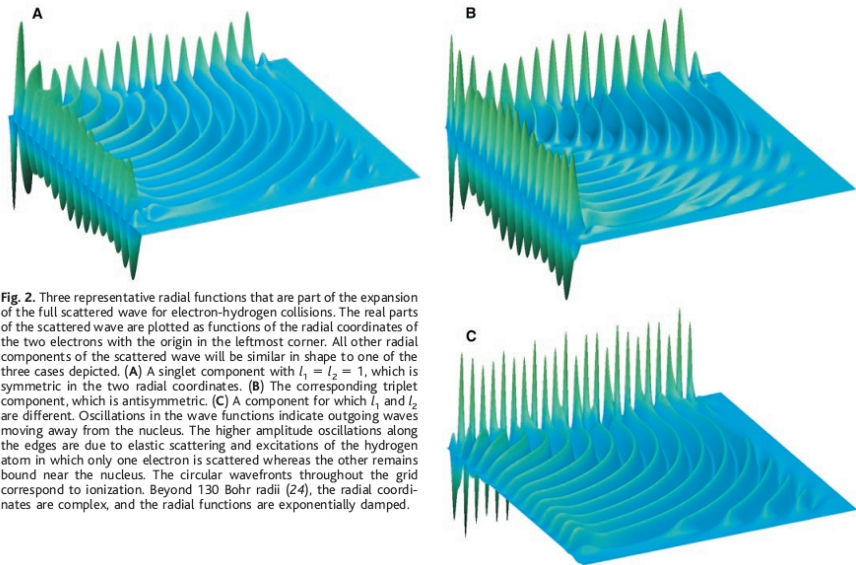
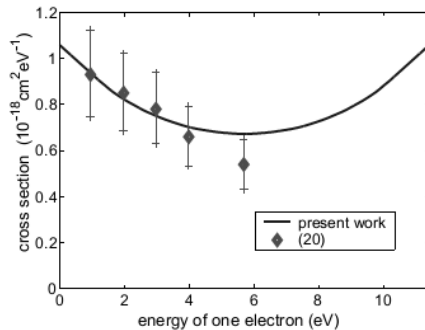


Fig. 2. Three representative radial functions that are part of the expansion of the full scattered wave for electron-hydrogen collisions. The real parts of the scattered wave are plotted as functions of the radial coordinates of the two electrons with the origin in the leftmost corner. All other radial components of the scattered wave will be similar in shape to one of the three cases depicted. (A) A singlet component with $l_1 = l_2 = 1$, which is symmetric in the two radial coordinates. (B) The corresponding triplet component, which is antisymmetric. (C) A component for which l_1 and l_2 are different. Oscillations in the wave functions indicate outgoing waves moving away from the nucleus. The higher amplitude oscillations along the edges are due to elastic scattering and excitations of the hydrogen atom in which only one electron is scattered whereas the other remains bound near the nucleus. The circular wavefronts throughout the grid correspond to ionization. Beyond 130 Bohr radii (24), the radial coordinates are complex, and the radial functions are exponentially damped.

$e^- + H$ рассеяние. Single differential ionization cross section

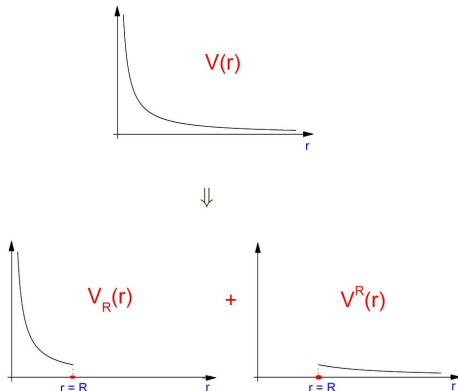


Расщепление потенциала

Кулоновский потенциал не может быть просто обрезан!

Возможности:

- 1) Включить кулоновское взаимодействие в невозмущенный гамильтониан (необходимо точное решение)
- 2) Использовать **расщепление** потенциала $V(r) = V_R(r) + V^R(r)$:



Задача рассеяния с обрезанным кулоновским взаимодействием

Модифицированная падающая волна:

$$(H_0 + V^R - E)\Psi^R = 0$$

Для рассеянной волны

$$\Phi = \Psi - \Psi^R,$$

строим неоднородное уравнение:

$$(H_0 + V - E)\Phi = -V_R\Psi^R, \quad (1)$$

$$\Phi \sim \sum_j (A_j - A_j^R)\Psi_j^{sc}, \quad U^\theta\Phi \rightarrow 0.$$

Правая часть финитна, так что возможно применить внешнее комплексное вращение.

Необходимо построить Ψ^R !

Задача рассеяния с обрезанным кулоновским взаимодействием

1) $r \leq R$. Регулярное в нуле решение:

$$\Psi^R(r) = a^R \hat{j}_0(k_i r_1).$$

2) $r \geq R$.

$$\Psi^R(r) = e^{i\sigma_0} F_0(\eta_i, k_i r) + \mathcal{A}^R \mathcal{U}_0^+(\eta_i, k_i r).$$

Коэффициенты a^R и \mathcal{A}^R определяются из условий непрерывности функции $\Psi^R(r)$ и ее производной при $r = R$.

$$a_R = k_i (\mathcal{U}_0^+(\eta_i, k_i R) \hat{j}_0'(k_i R) - \mathcal{U}_0^{+'}(\eta_i, k_i R) \hat{j}_0(k_i R))^{-1}.$$

Двухшаговый подход к решению задачи рассеяния

- Решение краевой задачи:
метод внешнего комплексного вращения в точке R
нулевые граничные условия при $r = R_{max} > R$
волновая функция зависит от **немодифицированных** координат для $r < R$.
Асимптотическое поведение в.ф. **не используется** !
- Извлечение амплитуд рассеяния и сечений из построенной в.ф. (используется асимптотическое поведение).

Потенциальное рассеяние α -частиц

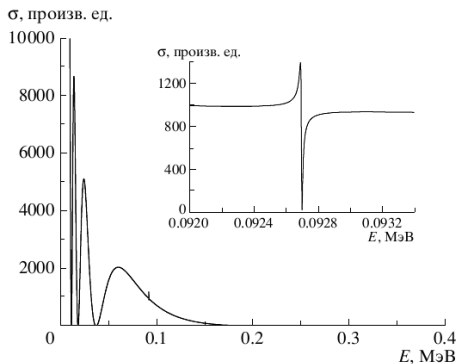


Рис. 1. Сечение $\alpha\alpha$ -рассеяния как функция энергии рассеяния E .

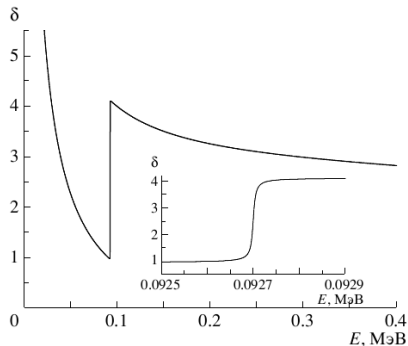


Рис. 2. Фаза $\alpha\alpha$ -рассеяния как функция энергии рассеяния E .

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

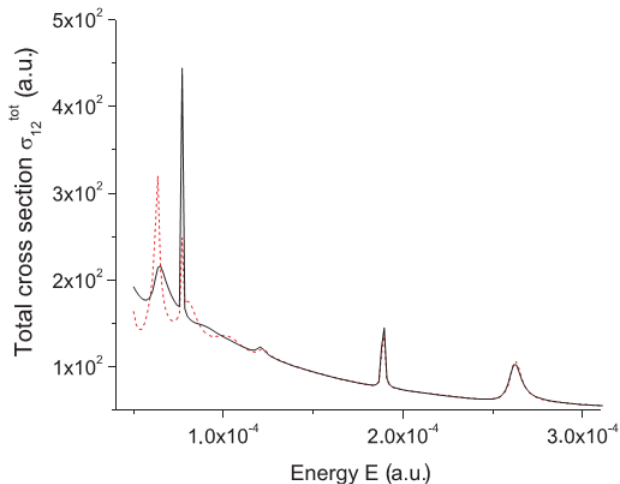


FIG. 6. (Color online) Total cross section σ_{12}^{tot} as a function of energy E . The values for the radii $R = 50$ a.u. (solid line) and $R = 30$ a.u. (dashed line) are plotted.

S-волновая модель рассеяния электронов:

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + V(r_1, r_2) - E \right) \Psi(r_1, r_2) = 0. \quad (2)$$

Полный потенциал

$$V(r_1, r_2) = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + V_{12}(r_1, r_2),$$

электрон-электронное взаимодействие

$$V_{12}(r_1, r_2) = 1 / \max \{r_1, r_2\}.$$

ТП модель: метод расщепления

Let $\chi^R(r_1)$ be the indicator of the domain $|r_1| \geq R$:

$$\chi^R = \begin{cases} 0, & r_1 < R \\ 1, & r_1 \geq R \end{cases}, \quad \text{and} \quad \chi_R = 1 - \chi^R.$$

The potential V^R is

$$V^R = -\frac{Z}{r_2} + \left(-\frac{Z}{r_1} + V_{12}(r_1, r_2) \right) \chi^R,$$

and the complimentary potential V_R is

$$V_R = \left(-\frac{Z}{r_1} + V_{12}(r_1, r_2) \right) \chi_R.$$

The total Hamiltonian is split as

$$H = H_K + \left(-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + V_{12}(r_1, r_2) \right) = H_K + V^R + V_R.$$

The asymptotic Hamiltonian H^R is defined as

$$H^R = H_K + V^R.$$

Solution of Eq. $(H^R - E)\Psi^R = 0$ can be found explicitly:

$$\Psi^R(r_1, r_2) = \begin{cases} a_R \hat{j}_0(k_i r_1) \varphi_i(r_2), & r_1 < R. \\ [e^{i\sigma_0} F_0(\eta_i, k_i r_1) + \mathcal{A}U_0^+(\eta_i, k_i r_1)] \varphi_i(r_2), & r_1 > R, r_2 < R. \end{cases}$$

The Sommerfeld parameter $\eta_i = -(Z - 1)/k_i$.

Solution of Eq. $(H^R - E)\Psi^R = 0$ can be found explicitly:

$$\Psi^R(r_1, r_2) = \begin{cases} a_{Rj_0} \hat{\varphi}_i(k_i r_1) \varphi_i(r_2), & r_1 < R. \\ [e^{i\sigma_0} F_0(\eta_i, k_i r_1) + \mathcal{A}U_0^+(\eta_i, k_i r_1)] \varphi_i(r_2), & r_1 > R, r_2 < R. \end{cases}$$

The Sommerfeld parameter $\eta_i = -(Z - 1)/k_i$.

The total w.f. Ψ is as $\Psi = \Psi^R + \Phi$, and the Schrödinger equation reads

$$\left[H_K + \left(-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + V_{12}(r_1, r_2) \right) - E \right] \Phi(r_1, r_2) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (1 + (-1)^S P_{12}) \left(-\frac{Z}{r_1} + V_{12}(r_1, r_2) \right) \chi_R(r_1) a_{Rj_0} \hat{\varphi}_i(k_i r_1) \varphi_i(r_2).$$

Асимптотическое поведение волновой функции

$$\Psi(X) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \chi_A(X; \mathbf{p}_\alpha) + \sum_B \varphi_B(\mathbf{x}_\beta) \mathcal{A}_{BA}(\hat{y}_\beta, p_\alpha) Q_B(y_\beta, E) + \mathcal{A}_0(\hat{X}; \mathbf{p}_\alpha) Q_0(\rho, E).$$

The state of the two body subsystem is describe by B : $B = \{\beta; n', l', m'\}$.

The incoming Coulomb wave

$$\chi_A(X; \mathbf{p}_\alpha) = \varphi_A(\mathbf{x}_\alpha) \exp\{i(\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)\} e^{-\pi\eta_A/2} \Gamma(1 + i\eta_A) \Phi(-i\eta_A, 1, ip_\alpha y_\alpha - i(\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)),$$

$$\eta_A = \frac{q_{\alpha\alpha}}{2\sqrt{E + \varepsilon_A}}, \quad q_{\alpha\alpha} = \sum_{\gamma \neq \alpha} q_\gamma / |s_{\gamma\alpha}|.$$

The distorted spherical waves

$$Q_B(y_\beta, E) = \exp\{i\sqrt{E + \varepsilon_B} y_\beta + iW_B\} y_\beta^{-1}, \quad W_B = -\eta_B \ln 2\sqrt{E + \varepsilon_B} y_\beta,$$

$$Q_0(\rho, E) = \exp\{i\sqrt{E} \rho + iW_0\} \rho^{-5/2}, \quad W_0 = -\frac{\rho}{2\sqrt{E}} \sum_\gamma \frac{q_\gamma}{x_\gamma} \ln 2\rho\sqrt{E}.$$

Асимптотическое поведение волновой функции: модель ТП

$$\Phi(r_1, r_2) \sim \sum_j f_{ji}(k_j) \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + (-1)^S P_{12}) \mathcal{U}_0^+(\eta_j, k_j r_1) \varphi_j(r_2) + F(\alpha) \frac{e^{iK\rho + iQ_0(\rho)}}{(K\rho)^{5/2}},$$

where $Q_0(\rho) = -\frac{\rho}{K} V(r_1, r_2) \ln(2K\rho)$, the hyperradius $\rho = (r_1^2 + r_2^2)^{1/2}$ and the angle $\alpha = \arctan(r_2/r_1)$. The break-up momentum K is given as $K^2 = 2(E - \varepsilon_i)$.

The amplitude f_{ji} is calculated with the projection of the w.f. on $\varphi_j(r_2)$:

$$f_{ji}(k_j) = \lim_{r_1 \rightarrow \infty} \sqrt{2} (\mathcal{U}_0^+(\eta_j, k_j r_1))^{-1} \int_0^R dr_2 r_2^2 \varphi_j(r_2) \Phi(r_1, r_2).$$

The cross sections are given as

$$\sigma_{ji}(k_j) = 4\pi \frac{k_j}{k_i} |f_{ji}(k_j)|^2.$$

They can be also calculated with the projected optical theorem

$$\sigma_a = \left(-\frac{8\pi}{k_i^2} \right) \Im \int_0^R (P_a \Phi(R, r_2))^* \frac{\partial}{\partial r_1} (P_a \Phi(r_1, r_2)) \Big|_{r_1=R} dr_2,$$

and the surface integral representation

$$f_{ji}(k_j) = \sqrt{2} \int_0^R dr_2 r_1^2 \varphi_j(r_2) \left[\frac{1}{r_1} \Phi(r_1, r_2) \frac{\partial}{\partial r_1} j_0(k_j r_1) - j_0(k_j r_1) \frac{\partial}{\partial r_1} \frac{1}{r_1} \Phi(r_1, r_2) \right] \Big|_{r_1=R}.$$

1s-ns сечения для e-H рассеяния

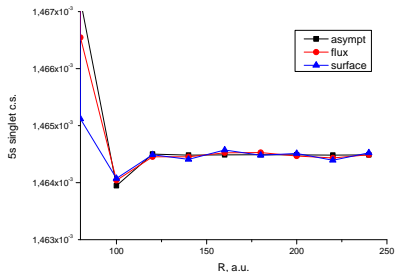
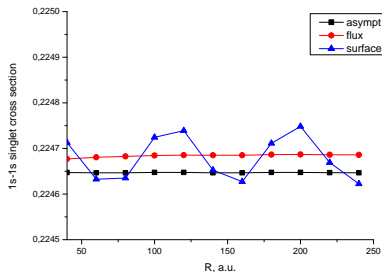


Рис.: The singlet 1s (left) and 5s (right) scattering cross sections at the energy $E = 17.6$ eV with spin weighting, as functions of the radius R .

1s-ns сечения для e-H рассеяния

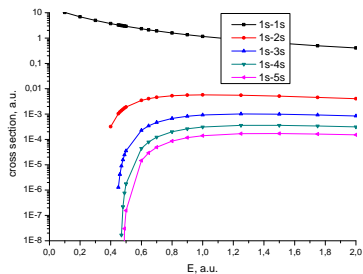
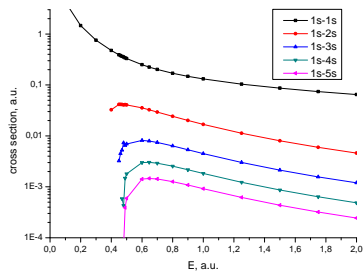
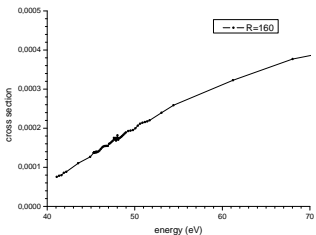
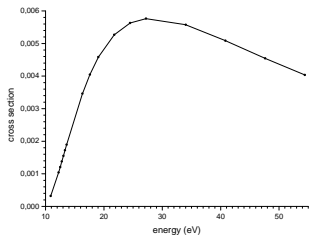
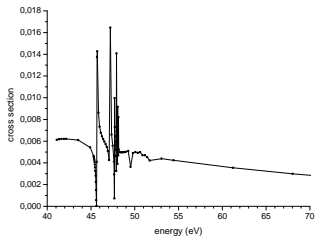
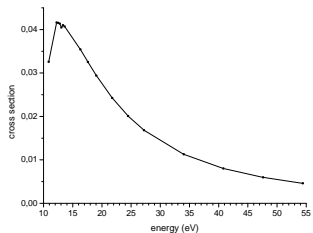


Рис.: The singlet (left) and triplet (right) electron-hydrogen cross sections.

1s-2s сечения



The e-H (left) and e-He⁺ (right) 1s-2s cross sections. The singlet (first line) and the triplet (second line) results.

Волновая функция $e\text{-He}^+$ рассеяния

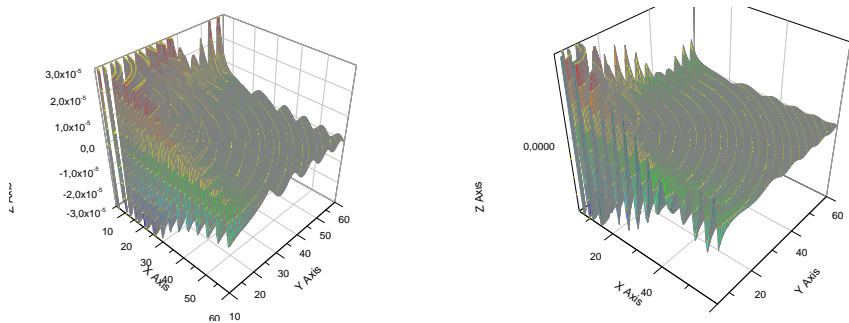
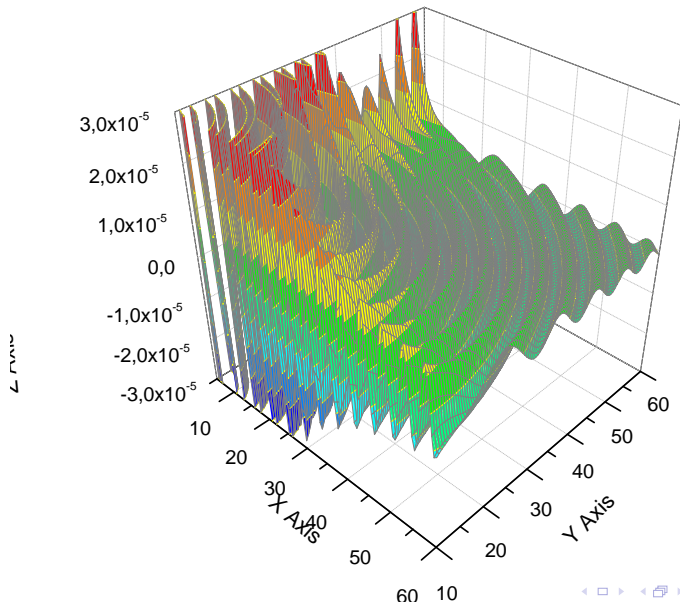
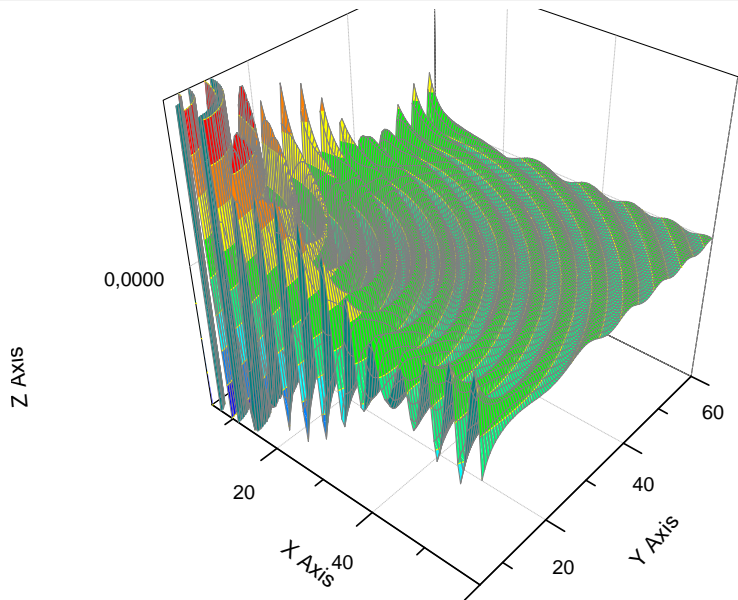


Рис.: Вещественная (слева) и мнимая (справа) части волновой функции $e\text{-He}^+$ рассеяния, энергия $E = 1$ а.е.

Волновая функция $e\text{-He}^+$ рассеяния



Волновая функция $e\text{-He}^+$ рассеяния



Выводы

- Метод комплексных вращений (КВ) основан на точных математических результатах
- Метод КВ позволяет в рамках единого подхода изучать резонансы и процессы рассеяния в квантовых системах нескольких частиц, а также устанавливать связи этими явлениями и процессами
- Модификация метода КВ (метод расщепления потенциала) позволяет исследовать системы с асимптотическим кулоновским взаимодействием