

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



12/v-75

P4 - 8634

3-91

А.Л.Зубарев, И.Н.Ивлиева, А.П.Подкопаев

1687/2-75

ОБ ОДНОМ ИТЕРАЦИОННОМ МЕТОДЕ
В ТЕОРИИ МНОГОКАНАЛЬНОГО РАССЕЙЯНИЯ

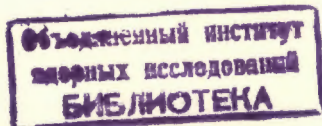
1975

Р4 - 8634

А.Л.Зубарев, И.Н.Ивлиева, А.П.Подкопаев

ОБ ОДНОМ ИТЕРАЦИОННОМ МЕТОДЕ
В ТЕОРИИ МНОГОКАНАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ

Направлено в ЖЭТО



Зубарев А.Л., Ивлиева И.Н., Подкопаев А.П.

P4 - 8634

Об одном итерационном методе в теории многоканального рассеяния

В работе предложен итерационно-сепарабельный метод решения уравнений типа Липпмана-Швингера. Установлена экспоненциальная сходимость метода. Численная сходимость проверяется на примере e^+N рассеяния. Формулируется применение метода в теории многоканального рассеяния.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1975

P4 - 8634

Zubarev A.L., Ivlieva I.N., Podkopaev A.P.

On Iteration-Separable Method in the
Theory of Multichannel Scattering

Iteration-separable method of solving the equations of the Lippman-Schwinger type is suggested. Exponential convergency of the method is proved. Numerical convergency is clarified on the e^+N scattering. Application of the method to theory of multichannel scattering is formulated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1975

Введение

Для решения квантовомеханических задач наиболее часто употребляется метод итераций, причем возможен ряд итерационных схем^{/1/}. Один из общих недостатков большинства известных итерационных процедур заключается в том, что они сходятся в предположении "слабости взаимодействия".

Существует, однако, метод, свободный от этого недостатка: речь идет о т.н. итерационно-сепарабельном методе /ИСМ/ решения квантовомеханических задач, который сходится для произвольных короткодействующих потенциалов. Очевидно, что при разработке приближенных методов следует иметь в виду квантовомеханическую задачу многих тел, поскольку строить рафинированные приближения к парциальной задаче двух тел нецелесообразно, так как соответствующее уравнение всегда может быть проинтегрировано численными методами. Однако различные приближенные способы решения задачи двух тел являются удобным введением в построение методов решения значительно более сложных задач.

В настоящей работе ИСМ применяется к задаче двух тел и к рассеянию позитронов на атомах водорода.

В первом параграфе рассмотрена задача двух тел. Детально изучены вопросы сходимости. В частности, показано, что ИСМ сходится экспоненциально и равномерно для широкого класса потенциалов. Исследована численная сходимость метода.

Во втором параграфе ИСМ применяется к теории многоканального рассеяния. Проводится обобщение теоремы о сходимости метода для многоканальных задач. Рассчитана длина рассеяния позитрона на атоме водорода с учетом связи $1S$, $2S$, $2P$, $3S$, $4S$ виртуальных состояний атома водорода.

§1. Задача двух тел

Двухчастичное парциальное рассеяние описывается уравнением

$$\psi_\ell(r) = j_\ell(kr) + \int_0^\infty G_\ell(r, r') V(r') \psi_\ell(r') r'^2 dr',$$

$$G_\ell(r, r') = \begin{cases} k^{-1} j_\ell(kr) n_\ell(kr'), & r \leq r', \\ k^{-1} n_\ell(kr) j_\ell(kr'), & r' \leq r, \end{cases} \quad /1/$$

где j_ℓ и n_ℓ - функции соответственно Риккати-Бесселя и Риккати-Неймана.

Сущность ИСМ заключается в следующем: оператор потенциала V заменяем сепарабельным

$$V_s = \frac{V|\chi\rangle\langle\chi|V}{\langle\chi|V|\chi\rangle}, \quad /2/$$

а в качестве χ выбираем какое-либо приближенное решение уравнения /1/. Затем с сепарабельным потенциалом /2/ уравнение /1/ решается в явном виде и находится $\psi_\ell^0 = \psi_\ell(\chi_0)$. После этого, полагая в /2/ $\chi_1 = \psi_\ell^0$, опять решаем уравнение и находим $\psi_\ell^1 = \psi_\ell(\chi_1)$, затем $\chi_2 = \psi_\ell(\chi_1)$ и т.д.

Рассмотрим теперь сходимость ИСМ. Покажем, что справедлива теорема: итерационно-сепарабельный метод для фазы рассеяния на короткодействующем потенциале сходится экспоненциально и равномерно.

Прежде всего отметим, что ИСМ на каждом шаге приводит к вариационному принципу Швингера^{/2/}. Действительно, пусть $\tilde{\psi}_\ell$ - пробная функция, тогда фаза рассеяния на потенциале /2/ с $\chi = \tilde{\psi}_\ell$ имеет вид

$$\text{tg } \delta_{\ell s} = \text{tg } \tilde{\delta}_\ell \cdot C(k),$$

$$\text{tg } \tilde{\delta}_\ell = -k^{-1} \langle j_\ell | V | \tilde{\psi}_\ell \rangle,$$

$$C(k) = \langle j_\ell | V | \tilde{\psi}_\ell \rangle / (\langle \tilde{\psi}_\ell | V | \tilde{\psi}_\ell \rangle - \langle \tilde{\psi}_\ell | VGV | \tilde{\psi}_\ell \rangle), \quad /3/$$

и, если $|\langle j_\ell | V | (\psi_\ell - \tilde{\psi}_\ell) \rangle| > \epsilon$, то

$$|\langle j_\ell | V | (\psi_\ell - C\chi) \rangle| \sim \epsilon^2. \quad /4/$$

Следовательно,

$$|\text{tg } \delta_\ell - \text{tg } \delta_{\ell s}| \sim \epsilon^2. \quad /5/$$

Для доказательства сходимости итерационного процесса

$$\psi_\ell^N = j_\ell + \langle G_\ell | V | \psi_\ell^{N-1} \rangle C^{N-1},$$

$$C^{N-1} = \langle j_\ell | V | \psi_\ell^{N-1} \rangle / (\langle \psi_\ell^{N-1} | V - VGV | \psi_\ell^{N-1} \rangle), \quad /6/$$

покажем, что

$$\max_k |\langle j_\ell | V | (\psi_\ell - \psi_\ell^N) \rangle| \sim \max_k |\langle j_\ell | V | (\psi_\ell - \psi_\ell^{N-1} C^{N-1}) \rangle|. \quad /7/$$

Введем функционал

$$\rho(\psi) = \max_k |\langle j_\ell | V | \psi \rangle|. \quad /8/$$

Нетрудно видеть, что ρ удовлетворяет всем определениям нормы и доказательство /7/ сводится к доказательству соотношения

$$\rho(\psi_\ell - \psi_\ell^N) \sim \rho(\psi_\ell - \psi_\ell^{N-1} C^{N-1}).$$

Учитывая рекуррентное соотношение /6/, имеем

$$\rho(\psi_\ell - \psi_\ell^N) \sim \rho[G_\ell V(\psi_\ell - \psi_\ell^{N-1} C^{N-1})].$$

Следовательно, если $G_\ell V$ - вполне непрерывный оператор, то соотношение /7/ справедливо^{/3/}.

Из /7/ следует, что если на каком-то шаге окажется

$$\max_k |\langle j_\ell | V | (\psi_\ell - \psi_\ell^N) \rangle| \sim \epsilon < 1,$$

то, сделав после этого N_1 итераций, получим

$$\max_k |\langle j_\ell | V | (\psi_\ell - \psi_\ell^{N+N_1}) \rangle| \sim \exp(2N_1 \ln \epsilon),$$

и теорема доказана.

Используя результаты теоремы, получаем

$$|\operatorname{tg} \delta_\ell - \operatorname{tg} \delta_\ell^N| \sim |C^{N-1} - 1|^2,$$

если $|C^{N-1} - 1| < 1$.

Следовательно, на каждом шаге можно оценить погрешность.

В отличие от борновского разложения для трехмерной задачи ИСМ сходится равномерно и экспоненциально и приводит на каждом шаге к унитарной S -матрице, в то время как в обычной теории возмущений унитарность выполняется лишь приближенно.

Перейдем теперь к численной сходимости метода. В табл. 1 приведены длины рассеяния на потенциале

$$V(r) = \frac{g}{r} \theta(1-r).$$

Точное значение длины рассеяния на таком потенциале легко вычислить^{/1/}. Оно равно

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} g^i / [(i+1)!(i-1)!]}{\sum_{i=0}^{\infty} g^i / (i!)^2}.$$

Из табл. 1 видно, что в области значений g , где сходится борновский ряд, первое приближение ИСМ не хуже, чем второе борновское, второе приближение ИСМ не хуже четвертого, третье не хуже восьмого борновского и т.д. в соответствии с теоремой.

Таблица 1

g	a_0	a_1	a_2	a
20	-0.697674416	-0.423862662	-0.632448315	-0.789290815
15	-0.681818179	-0.530973777	-0.618485048	-0.759095221
10	-0.652173914	-0.615034185	-0.617338575	-0.709979757
5	-0.576923072	-0.592755220	-0.596135705	-0.606672647
2	-0.428571425	-0.436187397	-0.436745792	-0.436821375
1	-0.300000000	-0.302182432	-0.302224215	-0.302225343
0.5	-0.187500000	-0.187956839	-0.187959047	-0.187959058
0.1	-0.046875000	-0.046881022	-0.046881025	-0.046881023
-0.1	0.053571429	0.053579508	0.053579510	0.053579510
-0.5	0.374999996	0.377094965	0.377105295	0.377105347
-1.0	1.499999985	1.574344038	1.575890094	1.575920298
-1.3	4.875000357	6.144098341	6.198497951	6.200247526
-1.4	10.500000715	20.370762348	21.150523662	21.180144786

Примечание: a_0 - длина рассеяния на потенциале (2) $\chi = j_\ell(kr)$; a_1, a_2 - длины рассеяния соответственно после первой и второй итераций.

§2. Многоканальное рассеяние

Многие задачи ядерной и атомной физики сводятся к решению многоканальной системы уравнений

$$-\frac{\hbar^2}{2M} F''_{\alpha}(r) + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l_{\alpha}(l_{\alpha}+1)}{r^2} F_{\alpha}(r) + \sum_{\alpha'} V_{\alpha\alpha'}(r) F_{\alpha'}(r) = (E - \epsilon_{\alpha}) F_{\alpha}(r). \quad /9/$$

Обобщение ИСМ на многоканальные задачи проводится просто /2/. В этом случае для упругого рассеяния

$$V_{\alpha\alpha'}^s = \frac{V_{\alpha\beta} \langle \chi_{\beta} \rangle \langle \chi_{\gamma} | V_{\gamma\alpha'} \rangle}{\langle \chi_{\delta} | V_{\delta\rho} | \chi_{\rho} \rangle}, \quad /10/$$

а для неупругих процессов

$$V_{\alpha\alpha'}^s = \frac{V_{\alpha\beta} \langle \chi'_{\beta} \rangle \langle \chi_{\gamma} | V_{\gamma\alpha'} \rangle}{\langle \chi'_{\delta} | V_{\delta\rho} | \chi_{\rho} \rangle}. \quad /11/$$

Далее можно повторить все рассуждения, предполагая $V_{\alpha\alpha'}^s$ вполне непрерывным оператором, и получить равномерную и экспоненциальную сходимость ИСМ для многоканальных задач.

Для иллюстрации метода рассмотрим столкновения позитронов с атомами водорода. Так как масса позитрона мала по сравнению с массой протона, то движение ядра в процессе столкновения несущественно и им можно пренебречь. Предположим также, что аннигиляция идет через канал образования позитрония. Тогда соответствующая система уравнений имеет вид /2/

$$\left(\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + E - \epsilon_n \right) F_n(\vec{r}) = \left(\sum_m + f \right) u_{nm}(\vec{r}) F_m(\vec{r}). \quad /12/$$

Здесь

$$u_{nm}(\vec{r}) = \int \psi_n^*(\vec{r}) \left(\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \psi_m(\vec{r}') d\vec{r}'$$

где $\{\psi_n(\vec{r})\}$ - система собственных функций атома водорода. В табл. 2 приведены в атомной системе единиц длины рассеяния позитрона на атоме водорода при использовании сепарабельного потенциала.

Таблица 2

Длина рассеяния	Статический потенциал	IS-2S-2P			
		IS-2S	IS-2S-2P	-2P-3S	-3S-4S
ИСМ	0.561	0.541	0.365	0.356	0.355
Точный расчёт	0.582	0.564	-	-	-

Рассматривалась связь каналов рассеяния через виртуальные состояния 1S, 2S, 2P, 3S, 4S атома водорода. Для сравнения приведены данные точных расчетов на статическом потенциале и с учетом сильной связи состояний 1S - 2S^{1/2}. Видно, что сепарабельный потенциал дает длины рассеяния, близкие к точным в задаче с ограниченным числом каналов. Наибольший вклад в длину рассеяния, как и следовало предполагать, вносит учет виртуального 2P состояния атома водорода. Из табл. 2 видно, что ряд по виртуальным S-состояниям быстро сходится.

Таким образом, мы построили быстросходящуюся универсальную процедуру, которая применима для расчетов рассеяния заряженных частиц на атомах, а также ядерных столкновений.

Литература

1. Ф.Калоджеро. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. М., Изд-во "Мир", 1972.

2. Н.Мотт, Г.Месси. Теория атомных столкновений. М., Изд-во "Мир", 1969.
3. Б.Э.Вулих. Введение в функциональный анализ. М., Изд-во "Наука", 1967.
4. P.G.Burke, K.Smith. Rev. Mod. Phys., 34, 458 (1962).

Рукопись поступила в издательский отдел
21 февраля 1975 года.