

Aufbruch in Nukleon-Deuteron Streuung

Vom Fachbereich Physik
der Universität Hannover

zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Phys. Karsten Chmielewski

geb. am 9. Januar 1968 in Hameln

Referent: Prof. Dr. P. U. Sauer
Korreferent: Prof. Dr. D. Zawischa
Tag der Promotion: 3. 2. 1999

Zusammenfassung

Die Geschichte der Kernphysik ist seit ihren Anfängen von dem Wunsch geprägt, die Wechselwirkung zwischen den Kernbausteinen, den Nukleonen, zu verstehen. Die zurückliegenden Dekaden an physikalischer Forschung haben auf diesem Weg ein breites Arsenal unterschiedlicher Parametrisierungen der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung hervorgebracht. Sie sind mit großer Präzision an experimentelle Zweinukleonen-Daten angepaßt worden. Es stellt sich jedoch die Frage mit welcher Güte die verschiedenen Nukleon-Nukleon Wechselwirkungen die Eigenschaften von Mehrnukleonen-Systemen beschreiben und ob überhaupt die Beschränkung auf eine rein nukleonische Paarwechselwirkung in Mehrnukleonen-Systemen zu einer erfolgreichen theoretischen Vorhersage führt. Detaillierte Studien zur Neutron-Deuteron Streuung haben tatsächlich in den letzten Jahren die Erkenntnis erbracht, daß einige spezielle Observablen der Neutron-Deuteron Streuung durch keine existierende Nukleon-Nukleon Wechselwirkung beschrieben werden können.

Die vorliegende Arbeit verwendet ein Kraftmodell, das neben dem Nukleon (N) auch das Δ -Isobar als expliziten Freiheitsgrad enthält. Die Kopplung von $N\Delta$ -Kanälen an rein nukleonische führt im Dreinukleonen-Medium auf effektive Dreinukleonen-Kräfte. Ihre Auswirkung auf Observable der Neutron-Deuteron Streuung soll untersucht werden. Es wird nicht nur elastische sondern auch inelastische Neutron-Deuteron Streuung betrachtet. Das Dreinukleonen-Kontinuum läßt aufgrund der Vielfalt an kinematischen Situationen im Endzustand neue Informationen über die Wechselwirkung erwarten.

Zur Lösung der Dreiteilchen-Streugleichungen wird eine separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix entworfen und im Zweinukleonen-Sektor getestet. Oberhalb der Aufbruchschwelle treten in den Dreiteilchen-Streugleichungen Singularitäten kinematischen Ursprungs auf, die eine numerische Lösung erschweren. Als zentralen Punkt der Arbeit stelle ich ein effizientes numerisches Verfahren zur Lösung der Streugleichungen für elastische und inelastische Neutron-Deuteron Streuung vor. Es basiert auf der Integration über reelle physikalische Impulse und wird als *Real-Axis Integration* bezeichnet.

Zum Erweis der Tauglichkeit wird für die elastische Neutron-Deuteron Streuung die Äquivalenz des beschriebenen Verfahrens zu der etablierten Methode der *Contour Deformation* demonstriert. Die praktischen Vorteile der vorgeschlagenen Methode werden hervorgehoben.

In Anwendung auf Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch werden Resultate für die Wechselwirkung mit Δ -Isobar Anregung gezeigt und mit Resultaten für eine rein nukleonische Referenzwechselwirkung verglichen. In den bisher betrachteten Observablen niedriger Energie trat kein nennenswerter Einfluß des Δ -Isobars auf. Wir erwarten, daß das Δ -Isobar und die von ihm vermittelte Dreinukleonenkraft für die Beschreibung von Observablen höherer Energie wichtig wird. Diese Erwartung wird partiell durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt bei 65 MeV eingelöst. Allerdings ist aufgrund der Beschränkung in der

Anzahl der berücksichtigten Partialwellen zu diesem Punkt noch kein abschließendes Urteil möglich. Der Vergleich mit experimentellen Daten zur Aufbruch-Streuung zeigt trotz der Beschränkung in der Anzahl der berücksichtigten Partialwellen bereits eine befriedigende bis gute Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage. Eine eingehendere Untersuchung von Aufbruchobservablen bleibt zukünftigen Projekten vorbehalten.

Mit der Möglichkeit zur verlässlichen Berechnung von Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch eröffnen sich zahlreiche Anwendungsgebiete. Dazu zählt inelastische Elektronenstreuung am gebundenen Dreinukleonen-System mit hadronischer Endzustandswechselwirkung. Speziell ist für den Zweikörper-Aufbruch die Kenntnis der hadronischen *half-shell* Übergangsamplitude notwendig.

Stichworte: Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch, Dreinukleonensystem, Δ -Isobar--Anregung

Abstract

One of the main goals of nuclear physics is to understand the forces that act between the constituents of the nucleus, the nucleons. The past decades have seen the advent of various parameterizations of the nucleon-nucleon interaction. All of them have been fitted to the experimental two-nucleon data. Thus, the question arises to which extent those nucleon-nucleon interactions are able to account for the properties of many-nucleon systems and whether the restriction to purely nucleonic two-body forces leads to a successful theoretical description at all. Recent studies have in fact shown that some particular observables of neutron-deuteron scattering cannot be described by any realistic nucleon-nucleon interaction.

The present work employs a force model which contains besides the nucleon (N) the Δ -isobar as an explicit degree of freedom. The coupling of $N\Delta$ -channels to purely nucleonic ones gives rise to an effective three-nucleon force in the three-nucleon system. Their effect on observables of elastic and inelastic neutron-deuteron scattering is investigated. The three-nucleon continuum with its variety of observables is an especially interesting object of study which promises to reveal new information about the nucleon-nucleon interaction.

The three-particle scattering equations are solved by a separable expansion of the two-baryon transition matrix. The expansion is tested in the two-baryon sector. Above break-up threshold the three-particle scattering equations develop singularities of kinematical origin. One of the central points of this thesis is an efficient numerical method for solving the scattering equations in the presence of singularities. It is the *real-axis integration* method, based on the integration over real momenta.

The equivalence of the proposed method to the established *contour-deformation* method of solution is demonstrated for elastic neutron-deuteron scattering. The practical advantages of the *real-axis* method are discussed.

Results for neutron-deuteron scattering with break-up and Δ -isobar excitation are shown and compared to the purely nucleonic reference potential. The observables of low energy scattering considered so far do not exhibit an appreciable Δ -isobar effect. We expect the Δ -isobar to become important at higher energies – an expectation which is partly fulfilled by the differential cross section at 65 MeV. However, due to the restricted number of partial waves included no final conclusion can be drawn yet. The overall agreement between theoretical prediction and experimental data is – despite the limitation in the number of included partial waves – acceptable. A thorough investigation of breakup-up observables remains a future research project which this thesis makes possible.

The reliable calculation of the half-shell transition matrix opens up other applications. Among them is the description of inelastic electron scattering from ${}^3\text{He}$ with two-body break-up. Therefore neutron-deuteron scattering with break-up has a rich set of applications.

Keywords: neutron-deuteron scattering with break-up, three-nucleon system, Δ -isobar--excitation

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen und Definitionen	3
2.1	Hilbertraum	3
2.2	Basiszustände	4
2.3	Hamilton Operator	5
2.4	Verbindung zu früheren Arbeiten	6
2.5	Dreiteilchen-Streuung	7
3	Separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix	11
3.1	Definition der separablen Entwicklung	11
3.2	Dreiteilchenstreuung mit separabler Wechselwirkung	14
3.3	Partialwellenzerlegung der AGS Gleichung	21
4	Test der separablen Entwicklung	25
4.1	Das Deuteron	25
4.2	Elastische Zweinukleonen-Streuung	25
5	Numerische Lösung der AGS Gleichung	31
5.1	Singularitäten des Kerns	31
5.2	Singularitäten des Propagators τ	32
5.2.1	Der Deuteron Pol	32
5.2.2	Berechnung der Matrixelemente von τ	34
5.3	Singularitäten von Z	37
5.3.1	Singularitätsstruktur von G_0	37
5.3.2	Singularitätsstruktur von Z	38
5.4	Behandlung der Singularitäten	40
5.4.1	Berechnung des Integrales Q_1	43
5.4.2	Berechnung des Integrales Q_2	44
5.5	Berechnung von Neutron-Deuteron Aufbruch-Streuung	45
5.6	Vergleich numerischer Methoden	45
6	Observablen für Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch	47
6.1	Aufbruch-Übergangsamplitude	47
6.2	Berechnung von Observablen	48

7	Resultate	51
7.1	Vergleich der Methoden	51
7.1.1	Elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 10 MeV	51
7.1.2	Elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 67 MeV	54
7.2	Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch	56
8	Zusammenfassung	61
A	Spline Interpolation	63
A.1	Kubische Spline Funktionen	63
A.2	Bestimmung der Koeffizienten	64
A.3	Wahl der Randbedingungen	66
A.4	Vergleich zur Polynom Interpolation	67
B	Padé Approximation	69
B.1	Einführung	69
B.2	Padé Approximanten	69
B.3	Beziehung der Padé Approximanten zu Kettenbrüchen	70
B.4	Beispiel zur Padé Approximation	72
C	Spezielle Numerische Methoden	75
C.1	<i>Blocking</i> Techniken	75
C.2	Multiple Präzision	76
C.3	Numerische Berechnung singularer Integrale	77
C.3.1	Beispiele	78
D	Identitäten	81
D.1	Matrixelemente des Permutationsoperators	81
D.2	Zerlegung des Operators Z	82
E	Separable Entwicklung in rein nukleonischen Partialwellen	87
	Literatur	91
	Danksagung	95
	Selbständigkeitserklärung	97
	Curriculum Vitae	99

1

Einleitung

Die Geschichte der Kernphysik ist seit ihren Anfängen von dem Wunsch geprägt, die Wechselwirkung zwischen den Kernbausteinen, den Nukleonen, zu verstehen. Die zurückliegenden Dekaden an physikalischer Forschung haben auf diesem Weg ein breites Arsenal unterschiedlicher Parametrisierungen der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung hervorgebracht. Sie sind teils mesonentheoretisch, teils rein phänomenologisch begründet, aber stets mit großer Präzision an die experimentellen Zweinukleonen-Daten angepaßt worden.

Es erhebt sich die Frage, mit welcher Güte die einzelnen Nukleon-Nukleon Wechselwirkungen die Eigenschaften von Mehrnukleonen-Systemen beschreiben und ob überhaupt die Beschränkung auf eine rein nukleonische Paarwechselwirkung in Mehrnukleonen-Systemen zu einer erfolgreichen Beschreibung führt. Speziell das Dreinukleonen-System stellt zur Beantwortung dieser Frage ein ideales Forschungsobjekt dar, da es erstens – nach der Theorie Faddeevs – exakt berechenbar ist und zweitens Komponenten der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung abfragt, die dem Zweinukleonen-System nicht zugänglich sind. Detaillierte Studien zur Neutron-Deuteron Streuung haben tatsächlich in den letzten Jahren die Erkenntnis erbracht, daß einige spezielle Observablen der Neutron-Deuteron Streuung durch keine existierende Nukleon-Nukleon Wechselwirkung beschrieben werden können. Darunter sind vor allem die Neutron Analysierstärke A_y im Niedrigenergiebereich um 10 MeV und die sogenannte Sagara Diskrepanz zu zählen.

Die vorliegende Arbeit verwendet ein Kraftmodell, das neben dem Nukleon (N) auch das Δ -Isobar als expliziten Freiheitsgrad enthält. Die Kopplung von $N\Delta$ -Kanälen an rein nukleonische führt im Dreinukleonen-Medium auf effektive Dreinukleonen-Kräfte. Ihre Auswirkung auf Observable der Neutron-Deuteron Streuung soll untersucht werden. Dabei erweitert die vorliegende Arbeit die in Refs. [32, 33] beschriebene elastische Neutron-Deuteron Streuung auf Streuung mit Aufbruch. Das Dreinukleonen-Kontinuum läßt im Vergleich zu der elastischen Neutron-Deuteron Streuung aufgrund der Vielfalt an kinematischen Situationen im Endzustand eine nochmals gesteigerte Anzahl von Informationen über die Wechselwirkung erwarten.

Wir benutzen die Alt-Grassberger-Sandhas (AGS) Gleichung zur Beschreibung von Neutron-Deuteron Streuung. Wir lösen sie durch die separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix. Oberhalb der Aufbruchschwelle entwickelt die Dreiteilchen-Streugleichung Singularitäten kinematischen Ursprungs. Sie machen die wesentliche Schwierigkeit bei der numerischen Lösung der Dreiteilchen-Streugleichungen aus. Das Hauptanliegen dieser Arbeit ist daher auch die Entwicklung einer numerischen Methode zur Berechnung von elastischer und inelastischer Neutron-Deuteron Streuung. Die Coulomb Wechselwir-

kung wird nicht betrachtet, d. h. die Resultate beziehen sich auf Neutron-Deuteron Streuung.

In Kapitel 2 stellen wir den benutzten Hilbertraum mit Δ -Isobar Anregung vor. Wir definieren Dreiteilchen-Zustände und den Hamilton Operator in diesem Hilbertraum. Dabei gehen wir kurz auf die Verbindung zu früheren Arbeiten ein [21, 22], in denen das Kraftmodell mit Δ -Isobar Anregung erstmals zur Berechnung der Eigenschaften des gebundenen Dreinukleonen-Systems angewandt wurde. Abschließend skizzieren wir die Grundlagen der Dreiteilchen-Streutheorie.

Das Kapitel 3 bestimmt die separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix mit Δ -Isobar Anregung nach der EST Methode. Die Auswirkung der Separabilität auf die Form der AGS Gleichung wird untersucht und die resultierende Gleichung nach Partialwellen zerlegt. In einem weiteren Abschnitt 4 wird die gewonnene separable Entwicklung im Zweinukleonen-Sektor getestet.

Einen Schwerpunkt bildet das Kapitel 5, in dem zunächst die Singularitätsstruktur der AGS Gleichung ausführlich erörtert wird, bevor wir Vorschriften zur Regularisierung der singulären Ausdrücke angeben. Anschließend stellen wir eine Methode vor, mit der die Integrale über die singulären Integranden, die in der AGS Gleichung auftreten, numerisch verlässlich ausgeführt werden können. Die Methode ist die *Real-Axis Integration*. Die Berechnung von Neutron-Deuteron Aufbruchamplituden wird besprochen. In einer theoretischen Gegenüberstellung vergleichen wir die beschriebene numerische Methode zur Lösung der AGS Gleichung mit einem anderen Verfahren, das in der Literatur unter der Bezeichnung *Contour Deformation* geführt wird. Die Äquivalenz der beiden Methoden wird durch einige Resultate für elastische Neutron-Deuteron Streuung demonstriert. Weitere Resultate geben ausgewählte Ergebnisse zur Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch wieder.

Die Kapitel des Anhangs widmen sich in erster Linie speziellen numerischen Algorithmen, die zu der Lösung der AGS Gleichung notwendig sind und speziell für die Verwendung in der Dreiteilchen-Streuung aufbereitet wurden. Darunter fallen die Padé Approximation, die Spline Interpolation sowie eine allgemeine Technik zur Berechnung singulärer Integrale. Schließlich haben wir in einem weiteren Kapitel diverse Identitäten zusammengestellt.

2

Grundlagen und Definitionen

In diesem Kapitel führen wir unsere Notation ein. Wir stellen das Kraftmodell mit expliziten Δ -Isobar Komponenten vor und definieren Dreiteilchen-Basiszustände. Die Beziehung der vorliegenden Arbeit zu früheren wird erläutert. Ein weiterer Abschnitt referiert benötigte Tatsachen aus der Dreiteilchen-Streutheorie.

2.1 Hilbertraum

Abbildung 2.1 zeigt diagrammatisch den verwandten Dreibaryonen-Hilbertraum. Er besteht aus einem rein nukleonischen Sektor H_N und einem Sektor H_Δ , in dem ein Nukleon zu einem Δ -Isobar angeregt ist. Das Δ -Isobar wird als stabiles Baryon mit Spin und Isospin $\frac{3}{2}$ und der reellen Masse $m_\Delta = 1232$ MeV behandelt. Die betrachteten Neutron-Deuteron Streuenergien verbleiben unterhalb der Pionproduktionsschwelle. Aus diesem Grund treten im Endzustand keine Zustände mit Δ -Isobar Anregung auf.

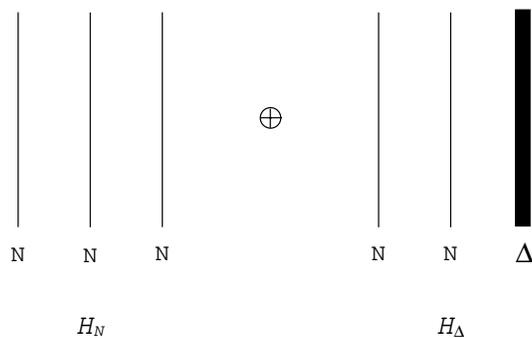


Abbildung 2.1: Der zur Beschreibung des Dreinukleonen-Bindungszustandes und der Streuzustände verwandte Dreibaryonen-Hilbertraum. Eine dünne durchgezogene Linie steht für ein Nukleon (N), eine dicke durchgezogene Linie für ein Δ -Isobar (Δ).

Der Hilbertsektor H_Δ enthält das Δ -Isobar als eigenständiges Baryon. Insofern besteht zwischen dem Δ -Isobar und dem Nukleon in einem Nukleon- Δ Zustand keine Symmetriebeziehung. Andererseits werden Zustände mit Δ -Isobar Anregung nur durch die Kopplung an die rein nukleonischen, total antisymmetrischen Zustände erzeugt. Die Anregung ihrerseits ist symmetrisch in den Nukleonen, und koppelt daher ausschließlich antisymmetrische Zustände des Hilbertsektors H_Δ an die rein nukleonischen. Für die Rechnungen sind folglich

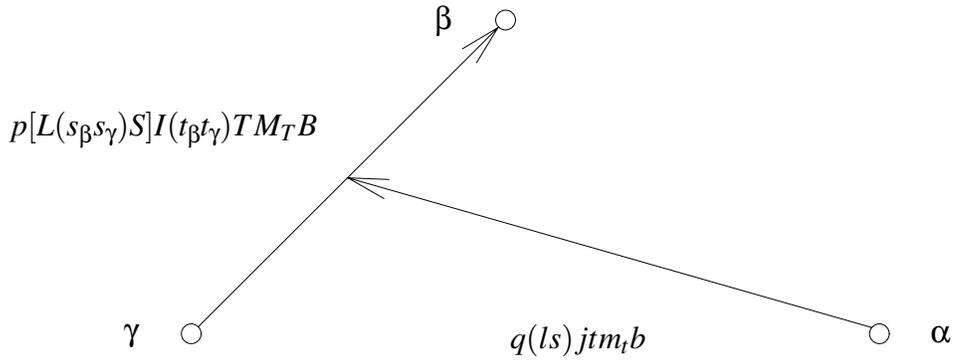


Abbildung 2.2: Jacobikoordinaten

nur antisymmetrische Dreibaryonen-Zustände mit einem Δ -Isobar von Belang.

2.2 Basiszustände

Wir benutzen eine Dreiteilchen-Basis im Impulsraum und führen Jacobiimpulse gemäß

$$\mathbf{p}_\alpha = \frac{m_\gamma \mathbf{k}_\beta - m_\beta \mathbf{k}_\gamma}{m_\beta + m_\gamma}, \quad (2.1a)$$

$$\mathbf{q}_\alpha = \frac{m_\alpha (\mathbf{k}_\beta + \mathbf{k}_\gamma) - (m_\beta + m_\gamma) \mathbf{k}_\alpha}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}, \quad (2.1b)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta + \mathbf{k}_\gamma \quad (2.1c)$$

ein, wobei $(\alpha\beta\gamma)$ eine zyklische Permutation von (123) bedeutet. \mathbf{k}_α ist der Impuls des α -ten Teilchens und m_α seine Masse, mithin entweder die durchschnittliche Nukleonenmasse $m_N = 938.9$ MeV oder die Masse des Δ -Isobars. Die Definition der Jacobiimpulse zeichnet das einzelne Teilchen α , den *Spektator*, aus. Die Basiszustände

$$\begin{aligned} |pq\nu(Ij)\rangle_\alpha &= \sum_{M_I m_j} \sum_{M_T m_t} |p[L(s_\beta s_\gamma)S]IM_I(t_\beta t_\gamma)TM_TB\rangle_\alpha |q(ls)jm_jtm_ib\rangle_\alpha \\ &\times \langle IM_I jm_j | \mathcal{J} \mathcal{M}_j \rangle \langle TM_T m_t | \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle \end{aligned} \quad (2.2)$$

beziehen sich nur auf die interne Bewegung. Wir werden sie auch in ihrer ungekoppelten Form $|p[L(s_\beta s_\gamma)S]IM_I(t_\beta t_\gamma)TM_TB\rangle_\alpha |q(ls)jm_jtm_ib\rangle_\alpha$ verwenden. Die Quantenzahlen der Basiszustände können in Abb. 2.2 abgelesen werden. Der Index α bezeichnet die Rollen der Teilchen als Paar und Spektator. Aus diesem Grund werden wir diesen Index α unterdrücken, sofern keine Mißverständnisse entstehen können. Wir benutzen das (Ij) Kopplungsschema. Die Bahndrehimpulse des Paares L und des Spektators l werden zunächst mit den jeweiligen Spins S und s zu dem Paar- und Spektatorgesamt-drehimpuls I und j gekoppelt und anschließend zum Gesamtdrehimpuls \mathcal{J} mit der Projektion \mathcal{M}_j . Die Gesamtparität Π ergibt sich als $\Pi = (-)^L (-)^l$. Analog ergibt sich der Gesamtsospin \mathcal{T} mit der Projektion \mathcal{M}_T aus der Kopplung von Paarisospin T und Spektatorisospin t . Für Neutron-Deuteron Streuung ohne Coulomb-Wechselwirkung werden nur Basiszustände mit einem Gesamtsospin $\mathcal{T} = \frac{1}{2}$ benötigt. Die zusätzlichen Quantenzahlen (Bb) legen den Baryoneninhalt des Paares und des Spektators fest, $B = 1(0)$ steht für ein Zweinukleonen- (Nukleon- Δ)-Paar und $b = \frac{1}{2}$

$(-\frac{1}{2})$ für ein Nukleon (Δ) als Spektator. Da der Baryoneninhalt bereits aus den Spin- und Isospinquantenzahlen folgt, stellen die zusätzlichen Quantenzahlen bloß eine zweckmäßige Notation dar. In Gl. (2.2) erstreckt sich die Summe über die Projektionsquantenzahlen M_I, m_j, M_T und m_t für Paar- und Spektatordrehimpuls und für Paar- und Spektatorisospin. Den Satz der diskreten Quantenzahlen werden wir im Gegensatz zu den kontinuierlichen Jacobiimpulsen p und q mit $v(Ij)$ abkürzen.

Obgleich die betrachteten Dreibaryonen-Zustände total antisymmetrisch in bezug auf die Vertauschung zweier Teilchen sind, wird diese Symmetrie nicht von den Basiszuständen (2.2) erfüllt. Diese lassen sich lediglich im Paar $(\beta\gamma)$ antisymmetrisieren. Dies wird bei einem nukleonischen Paar durch die bekannte Vorschrift $(-1)^{(L+S+T)} = -1$, bei einem Nukleon- Δ Paar durch explizite Antisymmetrisierung mit der Phasenwahl aus Ref. [22] erreicht.

2.3 Hamilton Operator

Der kinetische Operator H_0 wird geschrieben als Summe aus der Schwerpunkts- (c.m.) und Relativbewegung (rel.) des Paares $(\beta\gamma)$ und der Bewegung des Spektators α ,

$$H_0 = \sum_{\sigma=1}^3 h_0(\sigma) \quad (2.3a)$$

$$= h_0^{\text{rel.}}(\beta\gamma) + h_0^{\text{c.m.}}(\beta\gamma) + h_0(\alpha). \quad (2.3b)$$

Der Operator H_0 enthält die Ruhemassendifferenzen $\delta m_\alpha = m_\alpha - m_N$ der Teilchen und ist so normiert, daß drei Nukleonen im Ruhezustand die Energie Null zukommt. Die Ruhemassendifferenzen werden in $h_0^{\text{rel.}}$ und $h_0(\alpha)$ einbezogen. Die genannten Basiszustände $|pqv(Ij)\rangle_\alpha$ sind Eigenzustände von H_0 .

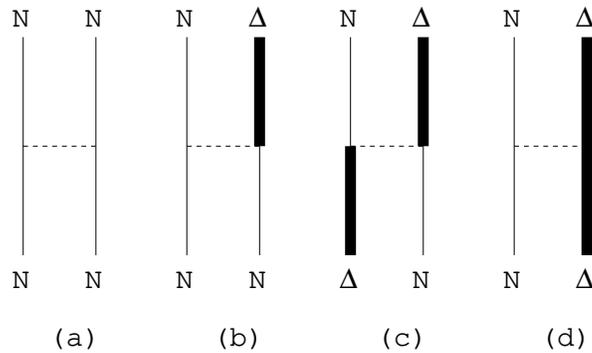


Abbildung 2.3: Die Baryon-Baryon Wechselwirkung. Die Prozesse (b)–(d) treten nur in Isospin-Triplett Partialwellen auf.

Der Wechselwirkungsanteil H_1 des Hamiltonoperators hat die Gestalt

$$H_1 = \sum_{\sigma=1}^3 v_\sigma. \quad (2.4)$$

Die Baryon-Baryon Wechselwirkung v_α , wirkend zwischen dem Paar $(\beta\gamma)$, ist in Abb. 2.3 gezeigt. Prozeß (a) stellt das Potential zwischen zwei Nukleonen dar, während Prozeß (b) die

beiden Sektoren des Zweibaryonen-Hilbertraumes verbindet. Prozesse (c) und (d) zeigen ein diagonales Nukleon- Δ Potential. Aufgrund des Isospins des Δ -Isobars sind die Prozesse (b)–(d) nur in Isospin Triplet ($T = 1$) Partialwellen möglich. Der zu (b) hermitesch konjugierte Prozeß ist nicht gezeigt.

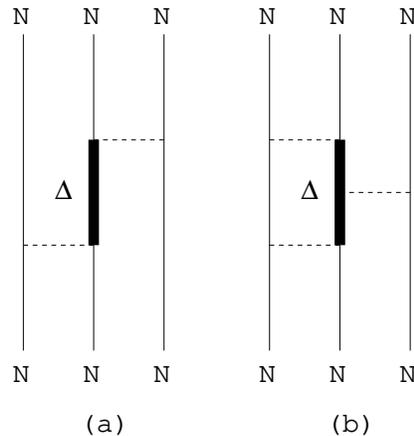


Abbildung 2.4: Das Δ -Isobar im Dreinukleonen-Medium. Gezeigt ist eine Auswahl von Prozessen, die effektive Dreinukleonen-Kräfte bewirken.

2.4 Verbindung zu früheren Arbeiten

Eine Zweibaryonen-Wechselwirkung wie in Abb. 2.3 wurde zuerst in Ref. [22] verwandt, um Eigenschaften des Dreinukleonen-Grundzustandes zu berechnen. Die dort verwandte Parametrisierung der Wechselwirkung wurde als A2 bezeichnet. Der Überganganteil basiert auf Pion- und Rho-Meson Austausch, der Diagonaleil, den Prozessen (c) und (d) entsprechend, ist auf Null gesetzt. Der rein nukleonische Anteil wurde vom Paris Potential [30] abgeleitet, jedoch so modifiziert, daß das volle Potential mit Δ -Isobar nahezu phasenäquivalent zum Paris Potential ist. Das Paris Potential stellt unser rein nukleonisches Referenzpotential dar, um den Einfluß des Δ -Isobars auf die Neutron-Deuteron Streuung zu isolieren. Die virtuelle Anregung des Δ -Isobars liefert eine effektive Dreinukleonen-Kraft, die erfahrungsgemäß im Mittel attraktiv ist. Abbildung 2.4 zeigt zwei Beispielprozesse im Dreinukleonen-Medium, die auf eine Dreinukleonenkraft führen, wobei Prozeß (a) der wichtigere ist. Das Potential A2 kann die experimentelle Dreinukleonen-Bindungsenergie nicht exakt reproduzieren. Daher werden auch bei jenen Observablen der Neutron-Deuteron Streuung, die mit der Dreinukleonen-Bindungsenergie korreliert sind, bei niedrigen Energien Abweichungen zum Experiment unausweichlich sein.

Referenz [22] hat Partialwellen bis zu einem Paardrehimpuls $I = 2$, ausreichend für die Berechnung des Dreinukleonen-Bindungszustands, berücksichtigt. Die exakte Beschreibung von Neutron-Deuteron Streuung verlangt jedoch, je nach Energie der Projektile, die Einbeziehung von höheren Paardrehimpulsen $I = 3, 4$ und, als Konsequenz, die Einbeziehung einer größeren Anzahl von Dreiteilchen-Basiszuständen (2.2). Da die Dimension des Problems, was die Numerik anbelangt, quadratisch mit der Anzahl der verwandten Dreiteilchen-Zustände wächst, steigen damit auch die Anforderungen an Rechenkapazität erheblich. Tabelle 2.1 auf der nächsten Seite gibt eine Übersicht über die benutzten Partialwellen.

Tabelle 2.1: Partialwellen $^{(2S+1)}L_I(B)$ des gekoppelten Zweibaryonen-Potentials, die zur Beschreibung von Neutron-Deuteron Streuung benutzt werden. Unterschieden nach ihrem Baryoneninhalt, mit NN für $B = 1$ und $N\Delta$ für $B = 0$, sind sie nach aufsteigendem Paardrehimpuls I angeordnet. Die Kopplung zwischen Zweinukleonen und Nukleon- Δ Partialwellen ist dargestellt. Die Kopplung $^1D_2(NN) - ^3D_2(N\Delta)$ verschwindet für das Zweibaryonen-Potential A2 aus Ref. [22], da der entsprechende geometrische Faktor Null ist. Die Isospin-Triplett Partialwellen mit $I > 2$ werden aus technischen Gründen rein nukleonisch angenommen: Einerseits wäre die Anzahl der Dreiteilchen-Zustände für die numerische Rechnung zu groß. Andererseits wurde die Partialwellenzerlegung des Zweibaryonen-Potentials mit Δ -Isobar Anregung für die betreffenden Partialwellen noch nicht praktisch ausgeführt.

	I	NN	$N\Delta$
$T = 0$	1	$^3S_1 - ^3D_1$	
		1P_1	
	2	3D_2	
	3	$^3D_3 - ^3G_3$	
1F_3			
$T = 1$	0	3G_4	
		1S_0	5D_0
	1	3P_0	3P_0
		3P_1	$^3P_1 - ^5P_1 - ^5F_1$
	2	$^3P_2 - ^3F_2$	$^3P_2 - ^5P_2 - ^3F_2 - ^5F_2$
		1D_2	$^3D_2 - ^5S_2 - ^5D_2 - ^5G_2$
	3	3F_3	
	4	1G_4	
$^3F_4 - ^3H_4$			

Die Parametrisierung A2 des gekoppelten Kanal-Potentials setzt den diagonalen Nukleon- Δ Anteil auf Null. In Ref. [35] wurden die Auswirkungen einer nichtverschwindenden Parametrisierung des diagonalen Nukleon- Δ Anteils für klein befunden. Es ist folglich anzunehmen, daß die Auswirkungen dieser speziellen Parametrisierung der Prozesse (c) und (d) aus Fig. 2.3 auf Neutron-Deuteron Streuung im Niederenergiebereich ebenfalls gering sind.

2.5 Dreiteilchen-Streuung

Wir betrachten Neutron-Deuteron Streuung im Dreinukleonen-Schwerpunktsystem. Der Anfangszustand $|\phi_\alpha(\mathbf{q})\nu_\alpha\rangle$,

$$|\phi_\alpha(\mathbf{q})\nu_\alpha\rangle = |dIM_I T M_T\rangle_\alpha |qsm_s t m_t b\rangle_\alpha, \quad (2.5)$$

enthält das Paar $(\beta\gamma)$ als gebundenen Deuteronzustand $|dIM_I T M_T\rangle$ mit dem Spin $I = 1$ und dem Isospin $T = 0$. Der Spektor α ist frei. Die Energie E_i des Zustandes $|\phi_\alpha(\mathbf{q})\nu_\alpha\rangle$ beträgt

$$E_i = e_d + \delta m_\alpha + \frac{q^2}{2M_\alpha} \quad (2.6)$$

mit der Deuteronbindungsenergie $e_d = -2.2249$ MeV und $1/M_\alpha = 1/(m_\beta + m_\gamma) + 1/m_\alpha$. Der Anfangszustand enthält ausschließlich Nukleonen, daher gilt $\delta m_\alpha = 0$ und $M_\alpha = 2m_N/3$. Aufgrund der Teilchenidentität kann jedes Paar von Nukleonen gebunden sein, wir wählen repräsentativ das Paar $(\beta\gamma)$. Der Teilchenidentität werden wir bei der Formulierung der Streugleichungen Rechnung tragen. Das dritte Nukleon, der Spektator, befindet sich in einem Zustand mit festem Impuls, Spin und Isospin, die Quantenzahlen s , t und b haben sämtlich den Wert $\frac{1}{2}$, δm_α ist Null. Die diskreten Quantenzahlen kürzen wir mit v_α ab. Folgende Szenarien der Neutron-Deuteron Streuung sind möglich:

$$\alpha + (\beta\gamma) \longrightarrow \alpha' + (\beta'\gamma') \quad (2.7a)$$

$$\longrightarrow \alpha' + \beta' + \gamma'. \quad (2.7b)$$

Hier bedeutet α' , β' und γ' eine zyklische Permutation von α , β und γ . Die Prozesse (2.7a) beschreiben die elastische Neutron-Deuteron Streuung mit der Möglichkeit, daß das Deuteron im Endzustand von einem anderen Paar Nukleonen als im Anfangszustand gebildet wird, der sogenannten *Rearrangement* Streuung. Prozeß (2.7b) mit drei freien Nukleonen im Endzustand $|\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})v_0\rangle$ beschreibt die Neutron-Deuteron Aufbruchstreuung mit

$$|\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})v_0\rangle = |\mathbf{p}SM_S TM_TB\rangle_\alpha |\mathbf{q}sm_s tm_t b\rangle_\alpha. \quad (2.8)$$

Im Aufbruchzustand befinden sich ausschließlich Nukleonen. Folglich lauten seine Quantenzahlen $B = 1$, und $s = t = b = \frac{1}{2}$. Wir nehmen an, daß der Gesamtspin S und Isospin T des Paares $(\beta\gamma)$ einschließlich der Projektionen M_S und M_T im Endzustand vermessen werden. Alle diskreten Quantenzahlen werden mit v_0 abgekürzt. Die Energie des Aufbruchzustandes beträgt

$$E_0 = \delta\mathcal{M} + \frac{p^2}{2\mu_\alpha} + \frac{q^2}{2M_\alpha}. \quad (2.9)$$

Die Größe $\delta\mathcal{M}$ ist gegeben durch $\delta\mathcal{M} = m_\alpha + m_\beta + m_\gamma - 3m_N$ und $1/\mu_\alpha = 1/m_\beta + 1/m_\gamma$. Da es sich im Fall des Aufbruchzustandes um drei Nukleonen handelt, haben wir $\delta\mathcal{M} = 0$, $\mu_\alpha = m_N/2$ und $M_\alpha = 2m_N/3$. Die Zustände $|\phi_\alpha(\mathbf{q})v_\alpha\rangle$ und $|\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})v_0\rangle$ sind bezüglich des Paares antisymmetrisiert. Deswegen tragen in einer Partialwellenzerlegung des Zustandes $|\mathbf{p}SM_S TM_TB\rangle$ nur Bahndrehimpulse L mit $(-1)^{(L+S+T)} = -1$ bei.

Unsere Rechnungen stützen sich auf die AGS Version der Dreiteilchen-Streutheorie [1]. Sie definiert die Vielkanal-Übergangsmatrix $U_{\beta\alpha}(Z)$ zwischen Zweikörper-Zuständen als Zerlegung der vollen Resolvente $G(Z) = (Z - H)^{-1}$ in Kanalresolventen $G_\alpha(Z) = (Z - H_0 - v_\alpha)^{-1}$ gemäß

$$G(Z) = \delta_{\beta\alpha} G_\alpha(Z) + G_\beta(Z) U_{\beta\alpha}(Z) G_\alpha(Z). \quad (2.10)$$

Das Argument Z ist eine komplexe Zahl. Physikalische Amplituden ergeben sich durch den Grenzübergang $Z = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} E_i + i\epsilon$, in dem Z gegen die zur Verfügung stehende Energie E_i strebt. Diese Art des Grenzüberganges liefert die physikalisch korrekten Randbedingungen. Anstelle von $Z = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} E_i + i\epsilon$ bedient man sich häufig der Kurzform $E_i + i0$, in der das Symbol $i0$ bereits implizit die Vorschrift enthält, den bezeichneten Grenzübergang zu nehmen.

Die Übergangsmatrix erfüllt folgende Integralgleichung, auch AGS Gleichung genannt,

$$U_{\beta\alpha}(Z) = \bar{\delta}_{\beta\alpha} G_0^{-1}(Z) + \sum_{\sigma} \bar{\delta}_{\beta\sigma} T_\sigma(Z) G_0(Z) U_{\sigma\alpha}(Z), \quad (2.11)$$

mit der Zweiteilchen-Übergangsmatrix $T_\alpha(Z)$ im Dreiteilchen-Hilbertraum, d. h.

$$T_\alpha(Z) = v_\alpha + v_\alpha G_0(Z) T_\alpha(Z), \quad (2.12a)$$

$$G_0(Z) T_\alpha(Z) = v_\alpha G_\alpha(Z), \quad (2.12b)$$

und mit

$$\bar{\delta}_{\alpha\beta} = 1 - \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.12c)$$

In den Gln. (2.12a) und (2.12b) bedeutet $G_0(Z) = (Z - H_0)^{-1}$ die freie Resolvente. Die Übergangsmatrix $U_{0\alpha}(Z)$ zu Endzuständen mit drei freien Nukleonen bekommt man mittels einer Quadratur

$$U_{0\alpha}(Z) = G_0^{-1}(Z) + \sum_{\sigma} T_\sigma(Z) G_0(Z) U_{\sigma\alpha}(Z) \quad (2.13)$$

aus der Vielkanal-Übergangsmatrix $U_{\beta\alpha}(Z)$.

Die Teilchenidentität verlangt, die Übergangsmatrix zwischen Zweiteilchenkanälen in der symmetrisierten Form $U(Z)$ zu berechnen mit

$$U(Z) |\phi_\alpha(\mathbf{q}) v_\alpha\rangle \equiv \sum_{\sigma} U_{\alpha\sigma}(Z) |\phi_\sigma(\mathbf{q}) v_\sigma\rangle, \quad (2.14a)$$

$$U(Z) = U_{\alpha\alpha}(Z) + U_{\alpha\beta}(Z) P_{123} + U_{\alpha\gamma}(Z) P_{132}. \quad (2.14b)$$

In Gl. (2.14b) sind $(\alpha\beta\gamma)$ zyklisch. Der zyklische und antizyklische Permutationsoperator P_{123} und P_{321} dreier Teilchen wurde mit der Abkürzung $P = P_{123} + P_{321}$ eingeführt. Die symmetrisierte Übergangsmatrix erfüllt die Integralgleichung

$$U(Z) = P G_0^{-1}(Z) + P T_\alpha(Z) G_0(Z) U(Z), \quad (2.15)$$

die symmetrisierte AGS Gleichung. Die symmetrisierte Aufbruch-Übergangsmatrix $U_0(Z)$ ist in Korrespondenz zu Gl. (2.14a) durch

$$U_0(Z) |\phi_\alpha(\mathbf{q}) v_\alpha\rangle \equiv \sum_{\sigma} U_{0\sigma}(Z) |\phi_\sigma(\mathbf{q}) v_\sigma\rangle \quad (2.16)$$

$$U_0(Z) = U_{0\alpha}(Z) + U_{0\beta}(Z) P_{123} + U_{0\gamma}(Z) P_{132} \quad (2.17)$$

definiert mit zyklischem $(\alpha\beta\gamma)$. Wie in der unsymmetrisierten Form bekommt man auch die Übergangsmatrix $U_0(Z)$ mittels Quadratur

$$U_0(Z) = G_0^{-1}(Z) + (1 + T_\alpha(Z) G_0(Z)) U(Z) \quad (2.18a)$$

$$U_0(Z) = (1 + P) G_0^{-1}(Z) + (1 + P) T_\alpha(Z) G_0(Z) U(Z) \quad (2.18b)$$

aus der symmetrisierten Vielkanal-Übergangsmatrix $U(Z)$. Der Term $G_0^{-1}(Z)$ trägt zu Matrixelementen auf der Energieschale, die in die Berechnung von Wirkungsquerschnitten eingehen, nicht bei. Die Form (2.18b) folgt, wenn in der Gleichung (2.18a) für den faktorlosen Term $U(Z)$ nochmals die Integralgleichung (2.15) verwandt wird.

In der Umgebung $Z = E_B$ der Bindungsenergie E_B des Dreinukleonen-Bindungszustandes $|B\rangle$ läßt sich die volle Resolvente nähern als $G(Z) \approx |B\rangle (Z - E_B)^{-1} \langle B|$. Am Pol wird aus

Gl. (2.15) die symmetrisierte homogene Gleichung für die Faddeev Amplitude $|\psi_\alpha\rangle$ des Bindungszustandes $|B\rangle$

$$|\psi_\alpha\rangle \equiv G_0(E_B)v_\alpha|B\rangle \quad (2.19a)$$

$$|\psi_\alpha\rangle = G_0(E_B)T_\alpha(E_B)P|\psi_\alpha\rangle. \quad (2.19b)$$

Gleichung (2.19b) liefert die Bindungsenergie. Der Bindungszustand $|B\rangle$ berechnet sich aus der Faddeev Amplitude $|\psi_\alpha\rangle$ mittels

$$|B\rangle = (1 + P)|\psi_\alpha\rangle. \quad (2.19c)$$

Der berechnete Bindungszustand $|B\rangle$ muß explizit normiert werden.

Sowohl die inhomogene Integralgleichung (2.15) als auch die homogene Integralgleichung (2.19b) sind Integralgleichungen in zwei kontinuierlichen Variablen und Matrixgleichungen in den diskreten Quantenzahlen $v(Ij)$. In den nachfolgenden Kapiteln wird eine separable Entwicklung der Zweiteilchen-Übergangsmatrix $T_\alpha(Z)$ vorgestellt. Nach Verwendung einer separablen Übergangsmatrix in den Integralgleichungen (2.15) und Gl. (2.19b) verbleibt eine Integralgleichung mit lediglich *einer* kontinuierlichen Variablen q . Der Paarimpuls p wird durch die Ränge der separablen Entwicklung diskretisiert. Daher ist die Verwendung einer separablen Entwicklung in der praktischen Rechnung vorteilhaft, falls die Anzahl der verwandten Ränge der separablen Entwicklung kleiner ist als die Anzahl der Stützstellen, die man für eine Diskretisierung der Impulsvariablen p benötigte.

3

Separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix

Die Zweibaryonen-Übergangsmatrix $T_\alpha(Z)$ im Dreibaryonen-Medium beschreibt die Dynamik der Dreiteilchenstreuung. Im ersten Abschnitt wird zunächst die Zweibaryonen-Übergangsmatrix im Zweibaryonen-Schwerpunktsystem erörtert und separabel entwickelt.

3.1 Definition der separablen Entwicklung

Die separable Entwicklung ist unabhängig von dem Paarindex α für das Paar $(\beta\gamma)$. In der Diskussion dieses Abschnitts werden wir daher diesen Index unterdrücken und für das Potential die Bezeichnung v unterschiedslos gebrauchen. Wir benutzen Kleinbuchstaben, um Operatoren im Zweibaryonen-Hilbertraum zu kennzeichnen. Die Zweibaryonen-Übergangsmatrix im Zweibaryonen-Schwerpunktsystem ist

$$t(z) = v + v g_0(z) t(z) \tag{3.1a}$$

$$t(z) = v + v \frac{1}{z - h_0^{\text{rel}} - v}. \tag{3.1b}$$

Analog zu Gl. (2.3b) bedeutet h_0^{rel} die kinetische Energie der Relativbewegung des wechselwirkenden Paares. $g_0(z) = (z - h_0^{\text{rel}})^{-1}$ ist entsprechend die freie Resolvente.

Wir verwenden die Partialwellenbasis $|p(LS)IM_I T M_T B\rangle$, den Zweiteilchenanteil der ungekoppelten Dreiteilchen-Basis (2.2). Die Zustände sind antisymmetrisiert. Sie sind Eigenzustände des Operators der Relativbewegung h_0^{rel} zu dem Eigenwert $e_0 = \delta m + p^2/2\mu$, δm steht — im Gegensatz zu δm_α im vorigen Abschnitt — für die gesamte Massendifferenz $\delta m_\beta + \delta m_\gamma$ in bezug auf die Ruhemasse zweier Nukleonen und μ steht für die reduzierte Masse des Paares. Die Massen hängen von dem Baryoneninhalt B ab. Im weiteren werden wir die individuellen Spin- und Isospinquantenzahlen nicht mehr angeben, da sie bereits aus dem Baryoneninhalt B gefolgert werden können.

Das Zweibaryonen-Potential ist in der genannten Basis von der Form

$$v = \sum_{IM_I T M_T} \sum_{L'S'B'} \sum_{LSB} \int_0^\infty p'^2 dp' \int_0^\infty p^2 dp |p'(L'S')IM_I T M_T B'\rangle \times \langle p'L'S'B'|v^{\pi IT} |pLSB\rangle \langle p(LS)IM_I T M_T B|. \tag{3.2}$$

Es erhält die Parität $\pi = (-1)^L = (-1)^{L'}$, den Gesamtdrehimpuls I und den Gesamtsospin T . Es koppelt Zustände mit unterschiedlichem Bahndrehimpuls L , Spin S und Baryoneninhalt B . Die möglichen Kopplungen sind in Tabelle 2.1 auf Seite 7 zusammengestellt. Aufgrund von Dreh- und Isospininvarianz sind die Matrixelemente unabhängig von den Projektionen M_I und M_T des Gesamtdrehimpulses und des Gesamtsospins. Wir merken an, daß die Zweibaryonen-Übergangsmatrix $t(z)$ die gleichen Symmetrien aufweist wie das Zweibaryonen-Potential v .

Der einzige Zweinukleonen-Bindungszustand $|dIM_I TM_T\rangle$, das Deuteron, tritt in den rein nukleonischen Partialwellen ${}^3S_1 - {}^3D_1$ auf und gehorcht der Eigenwertgleichung

$$(h_0^{\text{rel}} + v)|dIM_I TM_T\rangle = e_d |dIM_I TM_T\rangle$$

mit $I = 1$ und $T = M_T = 0$. In allen Partialwellen treten Partialwellen-Streuzustände

$$|\psi^{(+)}(p)(LS)IM_I TM_T B\rangle = |p(LS)IM_I TM_T B\rangle + g_0(\delta m + \frac{p^2}{2\mu} + i0)v|\psi^{(+)}(p)(LS)IM_I TM_T B\rangle \quad (3.3)$$

auf, aus denen die vollen Streuzustände konstruiert werden können.

Die separable Entwicklung des Zweibaryonen-Potentials ist von der Form

$$v_{\text{sep}} = \sum_{\pi IM_I M_T} \sum_{ij} |g^{(i\pi IT)} M_I M_T\rangle \lambda^{(i\pi IT)(j\pi IT)} \langle g^{(j\pi IT)} M_I M_T|. \quad (3.4)$$

Die Indizes i und j numerieren die separablen Terme in einer Partialwelle. Die separable Entwicklung (3.4) läßt sich auf die kompakte Gestalt

$$v_{\text{sep}} = |\mathbf{g}\rangle \lambda \langle \mathbf{g}| \quad (3.5)$$

bringen, mit $|\mathbf{g}\rangle = (|g^{(i\pi IT)} M_I M_T\rangle)$, $\langle \mathbf{g}| = (\langle g^{(i\pi IT)} M_I M_T|)$ als Reihen- und Spaltenvektoren in bezug auf die Indizes $(i\pi IT)(M_I M_T)$ und $\lambda = (\lambda^{(i\pi IT)(j\pi IT)})$ als Matrix. λ ist diagonal im Hinblick auf die erhaltenen Quantenzahlen (πIT) und die Projektionsquantenzahlen $(M_I M_T)$ sowie unabhängig von den letzteren. λ ist symmetrisch in den Rangindizes i und j . Die Dimensionen der Vektoren $|\mathbf{g}\rangle$, $\langle \mathbf{g}|$ und der Matrix λ ist durch das Produkt der Ränge $N^{\pi IT}$ aller Partialwellen, gewichtet mit der Multiplizität $(2I+1)(2T+1)$ der jeweiligen Partialwelle gegeben. Wir benutzen die EST Methode [10] zur Bestimmung der separablen Entwicklung. In der Vergangenheit wurde die EST Methode auf nukleonische Potentiale angewandt und die resultierenden separablen Entwicklungen erfolgreich zu einer realistischen Beschreibung von Neutron-Deuteron Streuung benutzt. Die Anwendung für ein Potential mit Kanalkopplung ist neu.

Die EST Methode verlangt, daß die separable Entwicklung v_{sep} den Pol des gebundenen Zweinukleonen-Zustands sowie die *half-shell* Übergangsmatrix $t^{\pi IT}(z)|pLSB\rangle$ des Ausgangspotentials für ausgewählte Impulse p und Energien z in ausgewählten Kanälen ${}^{(2S+1)}L_I(B)$ reproduziert. Zu diesem Zweck definiert man einen Satz von $N^{\pi IT}$ Zuständen $\{|\psi^{(i\pi IT)} M_I M_T\rangle\}$ für jede Partialwelle mit den erhaltenen Quantenzahlen (πIT) mit

$$|\psi^{(i\pi IT)} M_I M_T\rangle \equiv \begin{cases} |dIM_I TM_T\rangle \\ |\psi(z_i, p_i)(L_i S_i)IM_I TM_T B_i\rangle \end{cases} \quad (3.6)$$

Die Zustände $|\psi(z_i, p_i)(L_i S_i)IM_I TM_T B_i\rangle$ sind Lösungen der inhomogenen Integralgleichung

$$|\psi(z_i, p_i)(L_i S_i)IM_I TM_T B_i\rangle = |p_i(L_i S_i)IM_I TM_T B_i\rangle + \mathcal{P}g_0(z_i)v|\psi(z_i, p_i)(L_i S_i)IM_I TM_T B_i\rangle. \quad (3.7)$$

Das Symbol \mathcal{P} bedeutet, daß bei der Integration der Hauptwert der Singularität der freien Resolvente $g_0(z_i)$ zu nehmen ist. Auf diese Weise treten in Gl. (3.7) nur reelle Größen auf, was einen Vorteil im Hinblick auf die numerische Berechnung darstellt. Im Fall $z_i = \delta m_i + p_i^2/2\mu_i + i0$ sind diese Zustände mit den Streuzuständen $|\psi^{(+)}(p_i)(L_i S_i)IM_I T M_T B_i\rangle$ aus Gl. (3.3) bekanntermaßen durch die *on-shell* Übergangsmatrix verknüpft. Für diese Energien reproduziert die separable Entwicklung die *on-shell* und *half-shell* Übergangsmatrix exakt. Im Fall $z_i \neq \delta m_i + p_i^2/2\mu_i + i0$ kommt den Zuständen keine physikalische Bedeutung zu. Sie sind ein technisches Hilfsmittel zur Berechnung der *half-shell* Übergangsmatrix $t^{\pi IT}(z_i)|p_i L_i S_i B_i\rangle$ und stellen die Bedingungen für die separable Entwicklung, d. h. die Reproduktion von Eigenschaften der Zweibaryonen-Übergangsmatrix, sicher. Die Komponenten $\langle p(LS)IM_I T M_T B|\psi^{(i\pi IT)}M_I M_T\rangle$ sind diagonal in den Quantenzahlen (πIT) und $(M_I M_T)$ sowie unabhängig von den letzteren.

Zwischen den Parametern der separablen Entwicklung und dem Satz von Zuständen $\{|\psi^{(i\pi IT)}M_I M_T\rangle\}$ bestehen die Relationen

$$|g^{(i\pi IT)}M_I M_T\rangle \equiv v|\psi^{(i\pi IT)}M_I M_T\rangle \quad (3.8a)$$

$$|g^{(i\pi IT)}M_I M_T\rangle = \sum_{LSB} \int_0^\infty p^2 dp |p(LS)IM_I T M_T B\rangle \langle pLSB|g^{(i\pi IT)}\rangle \quad (3.8b)$$

$$\sum_j \lambda^{(i\pi IT)(j\pi IT)} \langle \psi^{(j\pi IT)}M_I M_T | v | \psi^{(k\pi IT)}M_I M_T \rangle = \delta_{ik}. \quad (3.8c)$$

Die *Formfaktoren* $|g^{(i\pi IT)}M_I M_T\rangle$ hängen in der Form $\langle pLSB|g^{(i\pi IT)}\rangle$ von dem Impuls p und den nichterhaltenen Quantenzahlen (LSB) ab. Sie werden numerisch auf einem Gitter mit 48 Gaußpunkten berechnet, aber zur weiteren Verwendung analytisch durch Gegenbauer Polynome dargestellt, d. h.

$$\langle pLSB|g^{(i\pi IT)}\rangle = \frac{p^L}{(p^2 + \beta_{2i}^2)^m} \left\{ \beta_{1i} + p^2 \left[C_{1i} + (C_{2i}x - C_{3i}) \sum_{n=0}^9 a_n G_n^{5/2}(x) \right] \right\}, \quad (3.9)$$

mit

$$x \equiv \frac{p^2/\beta_{3i}^2 - 1}{p^2/\beta_{3i}^2 + 1}.$$

Die Parameter C_{ki} , β_{ki} und m werden durch Erfahrung festgelegt, die Koeffizienten a_n hingegen durch Minimierung der mittleren quadratischen Abweichung der analytischen Formfaktoren von den numerisch berechneten. Die analytische Darstellung der Formfaktoren ermöglicht es, das Definitionsgebiet der Formfaktoren bzgl. der Impulsvariablen p von der positiven reellen Achse auf die komplexe Ebene zu erweitern. Sie schafft somit die Voraussetzungen zur Anwendung der Methode der komplexen Integration für die numerische Lösung der AGS Gleichung. Die Einzelheiten der Methode werden in Kapitel 5 skizziert. Die Auswahl der Gegenbauer Polynome zur analytischen Darstellung der Formfaktoren geschieht nicht aus physikalischen, sondern aus praktischen Gründen: Die Singularitäten der Formfaktoren, die für die komplexe Integration benötigt werden, lassen sich in dieser Form einfach untersuchen.

Die separable Entwicklung in den rein nukleonischen Partialwellen, dies sind alle Isospin-Singlett Partialwellen sowie die Isospin-Triplett Partialwellen mit einem Gesamtdrehimpuls

$I \geq 3$, die wir als rein nukleonisch annehmen, basiert auf Ref. [19], ist jedoch durch höhere Ränge in den höheren Partialwellen verbessert worden. Einzelheiten sind in Anhang E zusammengestellt. Die separable Entwicklung in den Isospin-Triplett Partialwellen mit $I \leq 2$ wird in diesem Kapitel bestimmt. Die Einzelheiten finden sich in Tabelle 3.1 auf Seite 17. Die Anzahl der Parameter der analytischen Darstellung übertrifft den zur Verfügung stehenden Platz.

Das Deuteron hat in der separablen Darstellung (3.8) die Form

$$|dIM_I T M_T\rangle = g_0(e_d) |g^{(i_0 \pi I T)} M_I M_T\rangle, \quad (3.10)$$

wobei sich die Größe $(i_0 \pi I T)$, mit $I = 1$ und $T = M_T = 0$, unter den Indizes in dem Satz (3.6) von Zuständen befindet, die die separable Entwicklung in der ${}^3S_1(NN)$ - ${}^3D_1(NN)$ Partialwelle liefern.

Die Übergangsmatrix mit Kanalkopplung hat in der separablen Entwicklung die Form

$$t(z) = \sum_{IM_I T M_T} \sum_{ij} \sum_{L'S'B'} \sum_{LSB} \int_0^\infty p'^2 dp' \int_0^\infty p^2 dp |p'(L'S')IM_I T M_T B'\rangle \langle p'L'S'B'|g^{(i\pi I T)}\rangle \quad (3.11a)$$

$$\times \tau^{(i\pi I T)(j\pi I T)}(z) \langle g^{(j\pi I T)} | pLSB \rangle \langle p(LS)IM_I T M_T B |, \quad (3.11b)$$

$$t(z) = |\mathbf{g}\rangle \tau(z) \langle \mathbf{g}|$$

mit dem Propagator $\tau(z)$, definiert durch

$$\tau(z) = [\lambda^{-1} - \langle \mathbf{g} | g_0(z) | \mathbf{g} \rangle]^{-1}. \quad (3.12a)$$

Die Gl. (3.12a) stellt eine Beziehung zwischen den Matrizen

$$\tau(z) = \left(\tau^{(i\pi I T)(j\pi I T)}(z) \right) \quad (3.12b)$$

und

$$\langle \mathbf{g} | g_0(z) | \mathbf{g} \rangle = \left(\sum_{LSB} \int_0^\infty p^2 dp \langle g^{(i\pi I T)} | \frac{1}{z - \delta m - p^2/2\mu} | pLSB \rangle \langle pLSB | g^{(j\pi I T)} \rangle \right) \quad (3.12c)$$

her. Beide Matrizen sind diagonal in den erhaltenen Quantenzahlen $(\pi I T)$ und den Projektions-Quantenzahlen $(M_I M_T)$ sowie unabhängig von den letzteren. Darüber hinaus sind beide Matrizen symmetrisch in den Rangindizes i und j . Die freie Resolvente $(z - \delta m - p^2/2\mu)^{-1}$ in Gl. (3.12c) ist ein Operator, abhängig von dem Baryoneninhalt B , über den summiert wird.

3.2 Dreiteilchenstreuung mit separabler Wechselwirkung

Die separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix (3.11) wird auf die Übergangsmatrix $T_\alpha(Z)$ aus Gl. (2.12a), eingebettet in den Dreiteilchen-Hilbertraum, d. h.

$$T_\alpha(Z) = |\mathbf{g}_\alpha\rangle \tau_\alpha(Z) \langle \mathbf{g}_\alpha|, \quad (3.13a)$$

$$T_\alpha(Z) = |\mathbf{g}_\alpha\rangle \tau_\alpha(Z - h_0^{\text{c.m.}}(\beta\gamma) - h_0(\alpha)) \langle \mathbf{g}_\alpha|, \quad (3.13b)$$

angewandt. Der Operator $\tau_\alpha(Z)$ ist ein komplizierter Dreibaryonen-Operator. Er ist diagonal in dem Spektatorimpuls q . Weiterhin hängt er von dem Baryoneninhalt (Bb) der betrachteten Partialwelle ab. Der Operator $\tau_\alpha(Z)$ geht *nicht* durch bloßes Verschieben des Argumentes in den Zweibaryonen-Propagator $\tau_\alpha(z)$ über, wie im Fall ohne Kanalkopplung. Die Zweibaryonen-Übergangsmatrix $t_\alpha(z)$ bezieht sich auf die Relativbewegung, während die freie Dreiteilchen-Resolvente $G_0(Z)$, auf die sich die Definition von $T_\alpha(Z)$ stützt, auch die kinetische Schwerpunktsenergie des Paares ($\beta\gamma$) und des Spektators α , also $h_0^{c.m.}(\beta\gamma)$ und $h_0(\alpha)$, umfaßt. Die Eigenwerte dieser Anteile der kinetischen Energie hängen von allen Baryonmassen ab, die in einer gegebenen Partialwelle auftreten, und diese Massen sind nicht für alle gekoppelten Kanäle identisch. Die numerische Berechnung von $\tau_\alpha(Z - h_0^{c.m.}(\beta\gamma) - h_0(\alpha))$ in Gl. (3.13b) wird im Kapitel 5 besprochen. Sie wird, für reelle Werte von Z , erschwert durch

- den Pol des Deuteron-Bindungszustandes in der ${}^3S_1(NN) - {}^3D_1(NN)$ Partialwelle und
- die Singularität des Integranden in Gl. (3.12c), die für $z - \delta m > 0$ auftritt.

Der Anfangszustand $|\phi_\alpha(\mathbf{q}_i)\nu_{\alpha_i}\rangle$ der Neutron-Deuteron Streuung ist in Gl. (2.5) definiert. Aufgrund der Beziehung (3.10) zwischen dem Deuteronzustand und dem Formfaktor $|g^{(i_0\pi IT)}M_I M_T\rangle$ in der ${}^3S_1(NN) - {}^3D_1(NN)$ Partialwelle nimmt der Anfangszustand die Gestalt

$$|\phi_\alpha(\mathbf{q}_i)\nu_{\alpha_i}\rangle = G_0(E_i + i0)|g_\alpha^{(i_0\pi IT)}M_I M_T\rangle|\mathbf{q}_i s m_{s_i} t m_t b\rangle_\alpha \quad (3.14)$$

für die separabel entwickelte Zweibaryonen-Wechselwirkung an.

Streuquerschnitte werden aus den *on-shell* Matrixelementen $\langle\phi_f|U(E_i + i0)|\phi_\alpha(\mathbf{q}_i)\nu_{\alpha_i}\rangle$ oder $\langle\phi_f|U_0(E_i + i0)|\phi_\alpha(\mathbf{q}_i)\nu_{\alpha_i}\rangle$ mit der für die Streuung zur Verfügung stehenden Energie $E_i = e_d + \frac{q_i^2}{2M_\alpha}$, $M_\alpha = 2m_N/3$ berechnet, mit einem noch zu spezifizierenden Endzustand $|\phi_f\rangle$, je nachdem ob es sich um elastische oder inelastische Neutron-Deuteron Streuung handelt. Für elastische Neutron-Deuteron Streuung sind die Matrixelemente

$$\langle\phi_f|U(E_i + i0)|\phi_\alpha(\mathbf{q}_i)\nu_{\alpha_i}\rangle = \langle\phi_f|U(E_i + i0)G_0(E_i + i0)|g_\alpha^{(i_0\pi IT)}M_I M_T\rangle|\mathbf{q}_i s m_{s_i} t m_t b\rangle_\alpha \quad (3.15)$$

gesucht, die ich gemäß Gl. (2.15) berechne

$$U(Z)G_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle = P|\mathbf{g}_\alpha\rangle + P|\mathbf{g}_\alpha\rangle\tau_\alpha(Z)\langle\mathbf{g}_\alpha|G_0(Z)U(Z)G_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle, \quad (3.16a)$$

$$\langle\mathbf{g}_\alpha|G_0(Z)U(Z)G_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle = \langle\mathbf{g}_\alpha|PG_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle \quad (3.16b)$$

$$+ \langle\mathbf{g}_\alpha|PG_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle\tau_\alpha(Z)\langle\mathbf{g}_\alpha|G_0(Z)U(Z)G_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle,$$

unter der Annahme $Z = E_i + i0$. Die Matrixelemente in Gl. (3.16b) sind Operatoren bezüglich des Spektatorimpulses \mathbf{q} ; diese Abhängigkeit ist in der Notation nicht kenntlich gemacht. Die Literatur kürzt die Operatoren $\langle\mathbf{g}_\alpha|G_0(Z)U(Z)G_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle$ und $\langle\mathbf{g}_\alpha|PG_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle$ üblicherweise mit $X(Z)$ und $Z(Z)$ ab.

Für inelastische Neutron-Deuteron Streuung sind die Matrixelemente

$$\langle\phi_f|U_0(E_i + i0)|\phi_\alpha(\mathbf{q}_i)\nu_{\alpha_i}\rangle = \langle\phi_f|U_0(E_i + i0)|g_\alpha^{(i_0\pi IT)}M_I M_T\rangle|\mathbf{q}_i s m_{s_i} t m_t b\rangle_\alpha \quad (3.17)$$

gesucht, die ich gemäß Gln. (2.18) berechne

$$U_0(Z)G_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle = (1 + P)|\mathbf{g}_\alpha\rangle\tau_\alpha(Z)\langle\mathbf{g}_\alpha|G_0(Z)U(Z)G_0(Z)|\mathbf{g}_\alpha\rangle \quad (3.18)$$

unter der Annahme $Z = E_i + i0$. Die Gl. (2.18b) für die symmetrisierte Aufbruch-Übergangsmatrix $U_0(Z)$ ist in besonderer Weise bequem, wenn die Zweibaryonen-Übergangsmatrix separabel entwickelt wird. Die *half-shell* Übergangsmatrix für elastische Streuung wird nur in der Form $\langle \mathbf{g}_\alpha | G_0(Z) U(Z) G_0(Z) | \mathbf{g}_\alpha \rangle$ benötigt.

Die zu (3.16b) korrespondierende homogene Gleichung am Pol des Dreinukleonen-Bindungszustandes entspricht den Gln. (2.19) und ergibt den Dreinukleonen-Bindungszustand $|B\rangle$ und seine Bindungsenergie E_B vermittelt

$$|\Psi_\alpha\rangle = G_0(E_B) |\mathbf{g}_\alpha\rangle \mathfrak{T}_\alpha(E_B) \langle \mathbf{g}_\alpha | P | \Psi_\alpha \rangle, \quad (3.19a)$$

$$\langle \mathbf{g}_\alpha | P | \Psi_\alpha \rangle = \langle \mathbf{g}_\alpha | P G_0(E_B) | \mathbf{g}_\alpha \rangle \mathfrak{T}_\alpha(E_B) \langle \mathbf{g}_\alpha | P | \Psi_\alpha \rangle. \quad (3.19b)$$

Aus der Faddeev Amplitude $|\Psi_\alpha\rangle$ wird der Bindungszustand $|B\rangle$ nach Gl. (2.19) konstruiert.

Infolge der Teilchenidentität kann jedes Paar $(\beta\gamma)$ in den Gln. (3.16) und (3.19) als Repräsentant herangezogen werden. Daher kann der Index α im Formfaktor $|\mathbf{g}_\alpha\rangle$ und Propagator $\mathfrak{T}_\alpha(Z)$ unterdrückt werden. Die Partialwellenentwicklung der Gl. (3.16b) ist in Kapitel 3.3 gegeben.

Tabelle 3.1: Die separable Entwicklung der Wechselwirkung mit Kanalkopplung. Die Auflistung erfolgt nach den erhaltenen Quantenzahlen (πIT) der Partialwellen. Ausschließlich Partialwellen, für die eine Kopplung an Nukleon- Δ Zustände betrachtet wird, sind angegeben. Die rein nukleonischen Partialwellen sind in Anhang E aufgeführt. In jeder Partialwelle bezeichnet i den separablen Term $|g^{(i\pi IT)} M_I M_T\rangle$ der Entwicklung; z_i ist die verfügbare Schwerpunktsenergie und gibt die Art des Zustandes $|\psi^{(i\pi IT)} M_I M_T\rangle$ an, der für die Definition von $|g^{(i\pi IT)} M_I M_T\rangle$ benutzt wird. Die Spalte *Typ* gibt diese Art des Zustandes an, wobei S für einen Streuzustand und ein Leerzeichen für keinen Streuzustand steht. Der Impuls p_i und die verfügbare Energie z_i stehen in der gewählten Beziehung $p_i = \sqrt{m_N |z_i|}$. In den Nukleon- Δ Kanälen handelt es sich bei den ausgewählten Energien nie um physikalische Baryonen-Streuzustände. Jede Tabelle gibt in der Kopfzeile die gekoppelten Partialwellen $^{(2S+1)}L_I(B)$ an. Die Zustände sind jeweils nach ansteigender Schwerpunktsenergie z_i aufgelistet. Die Reihenfolge des Rangindex i bezieht sich auf die Verwendung in numerischen Rechnungen. Das Symbol # kennzeichnet Zustände, die aus der separablen Entwicklung ohne Einfluß auf ihre Gültigkeit herausgenommen werden können.

$^1S_0(NN) - ^5D_0(N\Delta)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
4		-50.0	0	0	1 (NN)
5		-50.0	2	2	0 (N Δ)
6		-10.0	2	2	0 (N Δ)
1	S	0.0	0	0	1 (NN)
2	S	25.0	0	0	1 (NN)
3	S	150.0	0	0	1 (NN)

$^3P_0(NN) - ^3P_0(N\Delta)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
3		-25.0	1	1	1 (NN)
5		-25.0	1	1	0 (N Δ)
1	S	5.0	1	1	1 (NN)
2		5.0	1	1	0 (N Δ)
4	S	75.0	1	1	1 (NN)
6	S	150.0	1	1	1 (NN)
7		150.0	1	1	0 (N Δ)

Tabelle 3.1: — Fortsetzung

${}^3P_1(NN) - {}^3P_1(N\Delta) - {}^5P_1(N\Delta) - {}^5F_1(N\Delta)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
5		-25.0	1	1	1 (NN)
7		-25.0	1	2	0 (N Δ)
1	S	5.0	1	1	1 (NN)
2		5.0	1	1	0 (N Δ)
3		5.0	1	2	0 (N Δ)
4		5.0	3	2	0 (N Δ)
6	S	75.0	1	1	1 (NN)
9		75.0	1	2	0 (N Δ)
8	S	150.0	1	1	1 (NN)
10	S	250.0	1	1	1 (NN)

${}^3P_2(NN) - {}^3F_2(NN) - {}^3P_2(N\Delta) - {}^5P_2(N\Delta) - {}^3F_2(N\Delta) - {}^5F_2(N\Delta)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
10		-25.0	1	1	1 (NN)
11		-25.0	3	1	1 (NN)
12		-25.0	1	1	0 (N Δ)
13		-25.0	1	2	0 (N Δ)
1	S	5.0	1	1	1 (NN)
2	S	5.0	3	1	1 (NN)
3		5.0	1	1	0 (N Δ)
4		5.0	1	2	0 (N Δ)
#14		5.0	3	1	0 (N Δ)
#15		5.0	3	2	0 (N Δ)
5	S	37.5	1	1	1 (NN)
6	S	87.5	3	1	1 (NN)
7	S	87.5	1	1	1 (NN)
9	S	150.0	1	1	1 (NN)
8	S	250.0	3	1	1 (NN)

Tabelle 3.1: — Fortsetzung

${}^1D_2(NN) - {}^5S_2(N\Delta) - {}^3D_2(N\Delta) - {}^5D_2(N\Delta) - {}^5G_2(N\Delta)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
5		-25.0	2	0	1 (NN)
1	S	5.0	2	0	1 (NN)
2		5.0	2	1	0 (N Δ)
3		5.0	0	2	0 (N Δ)
4		5.0	4	2	0 (N Δ)
6	S	75.0	2	0	1 (NN)
7	S	150.0	2	0	1 (NN)

3.3 Partialwellenerlegung der AGS Gleichung

Für die praktische Rechnung zerlegen wir die symmetrisierte AGS Gleichung (2.15), umgeschrieben in Gln. (3.16b) nach Partialwellen. Die gewonnene Form wird auch die Basis für alle nachfolgenden Betrachtungen.

Die Matrixelemente in Gl. (3.16b) sind für jede verfügbare Energie Z Operatoren bezüglich des Impulses \mathbf{q} und der diskreten Quantenzahlen des Spektators. Als Basiszustände für den Spektator wählen wir die Zustände $|q(ls)jm_jtm_t b\rangle_\alpha$. Im nächsten Schritt führen wir gekoppelte Partialwellenzustände ein

$$\begin{aligned}
|i q \chi(I j) \Pi J \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle_\alpha &= \sum_{M_I m_j M_T m_t} \sum_{\alpha} |g_\alpha^{(i \pi I T)} M_I M_T \rangle |q(ls)jm_jtm_t b\rangle_\alpha \\
&\quad \times \langle I M_I j m_j | J \mathcal{M}_j \rangle \langle T M_T t m_t | \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle, \\
&= \sum_{LSB} \int p^2 dp |p q [(LS)I(ls)j] J \mathcal{M}_j (Tt) \mathcal{T} \mathcal{M}_T B b \rangle_\alpha \langle p LSB | g_\alpha^{(i \pi I T)} \rangle.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

In Gleichung (3.20) sind alle diskreten Quantenzahlen ausgeschrieben. In den gekoppelten Partialwellenzuständen steht die Abkürzung $\chi(Ij)$ für den Satz $(\pi I T l s j t b)$ von Quantenzahlen. Die Parität des Dreibaryonen-Zustandes Π ist explizit ausgeschrieben, obgleich sie durch $\Pi = \pi(-1)^l$ bestimmt ist. Die gekoppelten Partialwellenzustände $|i q \chi(I j) \Pi J \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle_\alpha$ sind nicht orthogonal, spannen aber denselben Unterraum wie die Tensorproduktzustände $|g_\alpha^{(i \pi I T)} M_I M_T \rangle |q(ls)jm_jtm_t b\rangle_\alpha$ auf, d. h.

$$\begin{aligned}
&\sum_{\Pi J \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T} \sum_{\chi} \sum_i \int q^2 dq |i q \chi(I j) \Pi J \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle_\alpha \langle i q \chi(I j) \Pi J \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T | \\
&= \sum_{\pi I M_I T M_T} \sum_i \sum_{l s j m_j t m_t} \int q^2 dq |g_\alpha^{(i \pi I T)} M_I M_T \rangle \langle g_\alpha^{(i \pi I T)} M_I M_T | \otimes |q(ls)jm_jtm_t b\rangle_\alpha \langle q(ls)jm_jtm_t b|.
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Aus diesem Grund können wir die Integralgleichung (3.16b) mit Hilfe der gekoppelten Partialwellenzustände schreiben. Konkret ergeben sich die folgenden Darstellungen der Operatoren

$$\begin{aligned}
&\alpha \langle i' q' \chi'(I' j') \Pi' J' \mathcal{M}'_j \mathcal{T}' \mathcal{M}'_T | P G_0(Z) | i q \chi(I j) \Pi J \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle_\alpha \\
&= \sum_{L' S' B'} \int p'^2 dp' \sum_{LSB} \int p^2 dp \langle g_\alpha^{(i' \pi' I' T')} | p' L' S' B' \rangle \langle p LSB | g_\alpha^{(i \pi I T)} \rangle \\
&\quad \times \alpha \langle p' q' v'(I' j') | P \frac{1}{Z - \delta \mathcal{M} - \frac{p'^2}{2\mu_\alpha} - \frac{q^2}{2M_\alpha}} | p q v(I j) \rangle_\alpha \\
&= \sum_{L' S' B'} \sum_{LSB} \int_{-1}^{+1} dx \langle g_\alpha^{(i' \pi' I' T')} | \bar{p}'(q', q, x) L' S' B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x) LSB | g_\alpha^{(i \pi I T)} \rangle \\
&\quad \times \frac{1}{\bar{p}^{L'}(q', q, x)} G_{v'v}(q', q, x) \frac{1}{Z - \delta \mathcal{M} - \frac{q'^2}{2\mu_\alpha} - \frac{q^2}{2\mu'_\alpha} - \frac{q' q_x}{m_\alpha}} \frac{1}{\bar{p}^L(q', q, x)} \\
&= \delta_{\Pi \Pi'} \delta_{J' J} \delta_{\mathcal{M}'_j \mathcal{M}_j} \delta_{\mathcal{T}' \mathcal{T}} \delta_{\mathcal{M}'_T \mathcal{M}_T} (i' q' \chi'(I' j') | Z^{\Pi' J' \mathcal{T}'}(Z) | i q \chi(I j) \rangle,
\end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned}
& \alpha \langle i' q' \chi' (I' j') | \Pi' \mathcal{J}' \mathcal{M}'_j \mathcal{T}' \mathcal{M}'_T | \tau_\alpha^{-1}(Z) | i q \chi (I j) \Pi \mathcal{J} \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle_\alpha \\
&= \delta_{\Pi' \Pi} \delta_{\mathcal{J}' \mathcal{J}} \delta_{\mathcal{M}'_j \mathcal{M}_j} \delta_{\mathcal{T}' \mathcal{T}} \delta_{\mathcal{M}'_T \mathcal{M}_T} \delta_{\chi' \chi} \frac{\delta(q' - q)}{q^2} \left[\left((\lambda_\alpha^{-1})^{(i' \pi I T)(i \pi I T)} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sum_{LSB} \int_0^\infty p^2 dp \langle g_\alpha^{(i' \pi I T)} | \frac{1}{Z - \delta \mathcal{M} - \frac{p^2}{2\mu_\alpha} - \frac{q^2}{2M_\alpha}} | p LSB \rangle \langle p LSB | g_\alpha^{(i \pi I T)} \rangle \right] \\
&= \delta_{\Pi' \Pi} \delta_{\mathcal{J}' \mathcal{J}} \delta_{\mathcal{M}'_j \mathcal{M}_j} \delta_{\mathcal{T}' \mathcal{T}} \delta_{\mathcal{M}'_T \mathcal{M}_T} \delta_{\chi' \chi} \frac{\delta(q' - q)}{q^2} (i' | \tau^{-1}(Z, q \chi (I j)) | i)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}
& \alpha \langle i' q' \chi' (I' j') | \Pi' \mathcal{J}' \mathcal{M}'_j \mathcal{T}' \mathcal{M}'_T | G_0(Z) U(Z) G_0(Z) | i q \chi (I j) \Pi \mathcal{J} \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle_\alpha \\
&= \delta_{\Pi' \Pi} \delta_{\mathcal{J}' \mathcal{J}} \delta_{\mathcal{M}'_j \mathcal{M}_j} \delta_{\mathcal{T}' \mathcal{T}} \delta_{\mathcal{M}'_T \mathcal{M}_T} (i' q' \chi' (I' j') | X^{\Pi \mathcal{J} \mathcal{T}}(Z) | i q \chi (I j)).
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Im Anhang D.1 ist die in Gl. (3.22) benutzte Darstellung des Permutationsoperators angegeben. Dort finden sich ebenfalls die Definitionen der Größen $G_{v'v}(q', q, x)$, $\bar{p}'(q', q, x)$ und $\bar{p}(q', q, x)$. Anhand von Gl. (3.22) werden wir in Kapitel 5 die Singularitätsstruktur des Operators $PG_0(Z)$ untersuchen. Die üblichen Notationen $Z(Z) = \langle \mathbf{g}_\alpha | PG_0(Z) | \mathbf{g}_\alpha \rangle$ und $X(Z) = \langle \mathbf{g}_\alpha | G_0(Z) U(Z) G_0(Z) | \mathbf{g}_\alpha \rangle$ wurden in den Gln. (3.22) und (3.24) eingeführt. Die doppelte Verwendung des Symbols Z sollte keine Mißverständnisse aufwerfen. In den Gln. (3.22)–(3.24) werden die Auswirkungen der Rotationsinvarianz und der Isospininvarianz des Potentials deutlich: Die Gleichungen sind diagonal in Π , \mathcal{J} , \mathcal{M}_j , \mathcal{T} und \mathcal{M}_T und dabei unabhängig von \mathcal{M}_j und \mathcal{M}_T . Dies macht den Vorteil der Partialwellenzerlegung aus. Der Propagator $\tau_\alpha(Z)$ ist diagonal im Impuls q und den diskreten Quantenzahlen des Spektators. Er hängt allein von den Quantenzahlen des Paares $(\pi I T)$ und dem Baryoneninhalt b des Spektators ab. Weiterhin ist $\tau_\alpha(Z)$ symmetrisch in den Rangindizes, wie in Kapitel 3.1 bemerkt wurde.

Die zu lösende Integralgleichung ergibt sich mit obigen Definitionen zu

$$\begin{aligned}
& (i' q' \chi' (I' j') | X^{\Pi \mathcal{J} \mathcal{T}}(Z) | i q \chi (I j)) = (i' q' \chi' (I' j') | Z^{\Pi \mathcal{J} \mathcal{T}}(Z) | i q \chi (I j)) \\
&+ \sum_{\tilde{\chi}} \sum_{\tilde{i} \tilde{i}} \int_0^\infty \tilde{q}^2 d\tilde{q} (i' q' \chi' (I' j') | Z^{\Pi \mathcal{J} \mathcal{T}}(Z) | \tilde{i} \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j})) (\tilde{i} | \tau(Z, \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j})) | \tilde{i}) (\tilde{i} \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j}) | X^{\Pi \mathcal{J} \mathcal{T}}(Z) | i q \chi (I j)).
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Im Fall der Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch verknüpft Gl. (2.18b) die Übergangsamplituden $U(Z)$ und $U_0(Z)$ der elastischen und inelastischen Streuung. Es ergibt sich die Beziehung

$$\begin{aligned}
& \langle p' q' v(I' j') | U_0(Z) | i q \chi(I j) \Pi \mathcal{J} \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle \\
&= \sum_{\tilde{\chi}} \sum_{\tilde{i} \tilde{i}} \int \tilde{q}^2 d\tilde{q} \langle p' q' v(I' j') | (1 + P) | \tilde{i} \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j}) \Pi \mathcal{J} \mathcal{M}_j \mathcal{T} \mathcal{M}_T \rangle \\
&\quad \times (\tilde{i} | \tau(Z, \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j})) | \tilde{i}) (\tilde{i} \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j}) | X^{\Pi \mathcal{J} \mathcal{T}}(Z) | i q \chi(I j)) \\
&= \sum_{\tilde{\chi}} \sum_{\tilde{i} \tilde{i}} \int \tilde{q}^2 d\tilde{q} \left[\int \tilde{p}^2 d\tilde{p} \langle p' q' v(I' j') | (1 + P) | \tilde{p} \tilde{q} v(\tilde{I} \tilde{j}) \rangle \langle \tilde{p} \tilde{L} \tilde{B} | g_\alpha^{\tilde{i} \tilde{\pi} \tilde{I} \tilde{T}} \rangle \right] \\
&\quad \times (\tilde{i} | \tau(Z, \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j})) | \tilde{i}) (\tilde{i} \tilde{q} \tilde{\chi}(\tilde{I} \tilde{j}) | X^{\Pi \mathcal{J} \mathcal{T}}(Z) | i q \chi(I j)),
\end{aligned} \tag{3.26}$$

aus der die *on-shell* Elemente zwischen den physikalischen Anfangs- und Endzuständen einfach abgeleitet werden können. Der in Gl. (2.18b) erscheinende Operator $(1+P)G_0^{-1}(Z)$ trägt zu den *on-shell* Aufbruch-Matrixelementen nicht bei. Insgesamt erhält man die gesuchten Aufbruch-Matrixelemente also aus den *half-shell* Elementen der Vielkanal-Übergangsmatrix zwischen Zweikörper-Zuständen, d. h. aus $(\tilde{i}\tilde{q}\tilde{\chi}(\tilde{I}\tilde{j})|X^{\Pi jT}(Z)|iq\chi(Ij))$.

4

Test der separablen Entwicklung

Vor der Verwendung der separablen Entwicklung in der Neutron-Deuteron Streuung wird ihre Güte durch diverse Anwendungen im Zwei- und Dreinukleonen-System untersucht. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich dabei auf das Zweinukleonen-System. Die komplementäre Analyse für das Dreinukleonen-System wird in Refs. [31, 33] durchgeführt.

4.1 Das Deuteron

Nach Konstruktion befindet sich die Deuteron-Wellenfunktion $|dIM_T M_T\rangle$ unter der Menge von Zuständen $\{|\psi^{(i\pi T)} M_I M_T\rangle\}$ der Gl. (3.6), aus denen die Formfaktoren der separablen Entwicklung in der 3S_1 - 3D_1 Partialwelle konstruiert werden. Somit repräsentiert die separable Entwicklung das Deuteron exakt.

4.2 Elastische Zweinukleonen-Streuung

In den Isospin-Triplett Partialwellen sind Zweinukleonen-Zustände an die Zustände mit Δ -Isobar Anregung gekoppelt. Die Schwelle zu inelastischer Streuung liegt bei $m_\Delta - m_N$. Die Inelastizitäten können nicht, dies gilt auch für das zugrunde liegende Kraftmodell, im Detail physikalisch realistisch sein. Zweinukleonen-Phasenverschiebungen und Mischungsparameter aller Isospin-Triplett Partialwellen mit einem Gesamtdrehimpuls $I \leq 2$ werden in Abb. 4.1 für das Ausgangskraftmodell A2 und die separable Entwicklung verglichen. Experimentelle Daten werden nicht gezeigt, da die Coulomb Wechselwirkung in den Testrechnungen dieses Kapitels zur Güte der separablen Entwicklung nicht berücksichtigt ist. Die Übereinstimmung ist bis zur Inelastizitätsschwelle sehr zufriedenstellend. Sie ist nach Konstruktion perfekt für die Energien, deren Streuwellenfunktionen in die Definition der separablen Entwicklung eingeflossen sind. Die Übereinstimmung ist dagegen nicht zufriedenstellend für die Inelastizitäten, die für die betrachtete Wechselwirkung nur oberhalb von 600 MeV Laborenergie auftreten und deshalb in Abb. 4.1 nicht dargestellt sind. Die derzeitige separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix ist aus diesem Grund oberhalb der Inelastizitätsschwelle noch nicht als zuverlässig anzusehen. Allerdings wird dieser Anteil in der Niederenergie Neutron-Deuteron Streuung überhaupt nicht benötigt. Abbildung 4.1 gibt auch die Resultate für die rein nukleonische Partialwelle 3S_1 - 3D_1 wieder. Sie macht deutlich, daß die separable Entwicklung in den Partialwellen mit Kopplung an $N\Delta$ -Zustände von der gleichen Qualität wie in den rein nukleonischen Partialwellen ist.

Abbildung 4.2 zeigt, daß auch die vollständige *off-shell* Zweinukleonen-Übergangsmatrix in den für Dreiteilchen-Streuung charakteristischen kinematischen Bereichen durch die separable Entwicklung mit ausreichender Genauigkeit beschrieben wird.

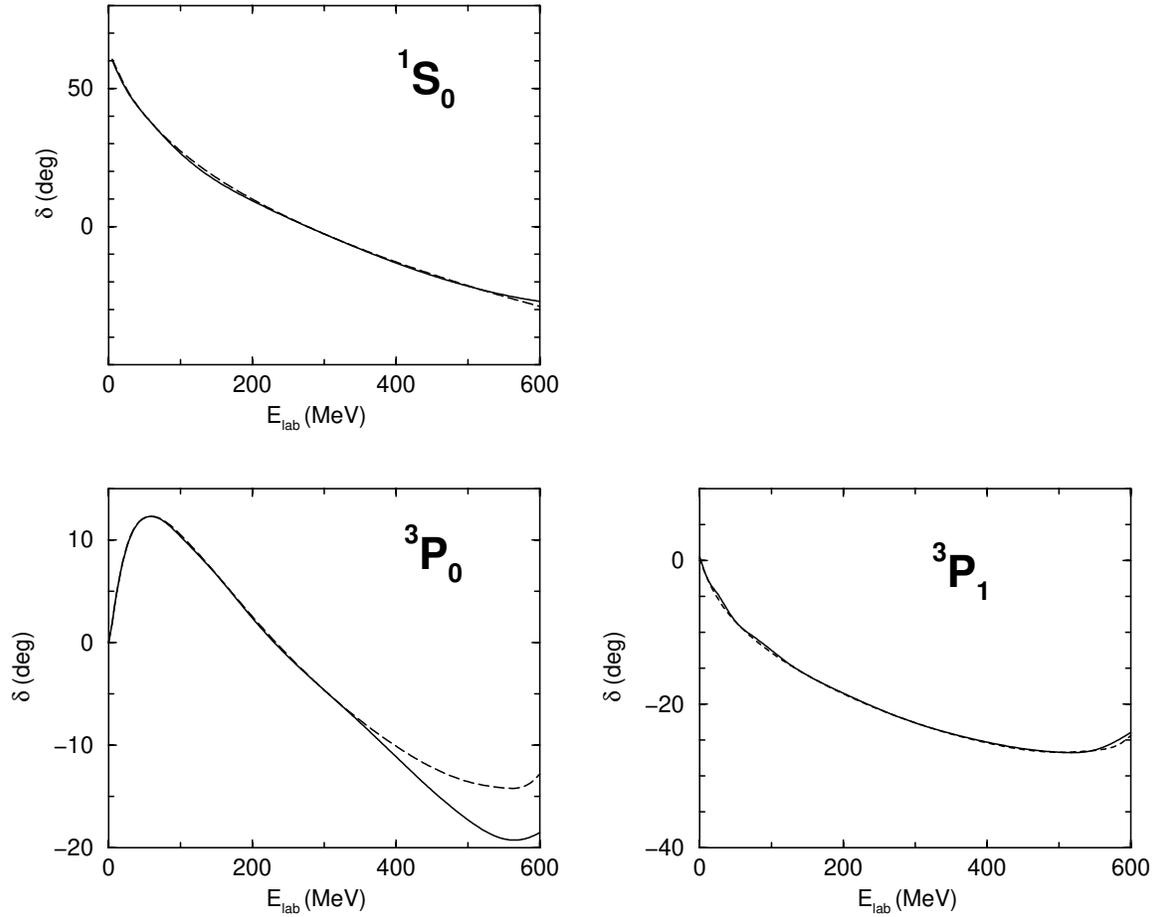


Abbildung 4.1: Zweinukleonen-Phasenverschiebungen δ und Mischungsparameter ϵ aller Isospin-Triplett Partialwellen mit einem Gesamtdrehimpuls $I \leq 2$ als Funktion der Nukleon Laborenergie E_{lab} . Verglichen werden die Resultate für die separable Entwicklung (durchgezogene Kurven) und für die Ausgangswechselwirkung A2 (gestrichelte Kurven). Für Partialwellen mit Tensorkopplung benutzen wir die Parametrisierung in Form der Eigenphasen. Die Phasenverschiebungen und Mischungsparameter der rein nukleonischen Isospin Singulett Partialwelle 3S_1 - 3D_1 sind gleichfalls abgebildet.

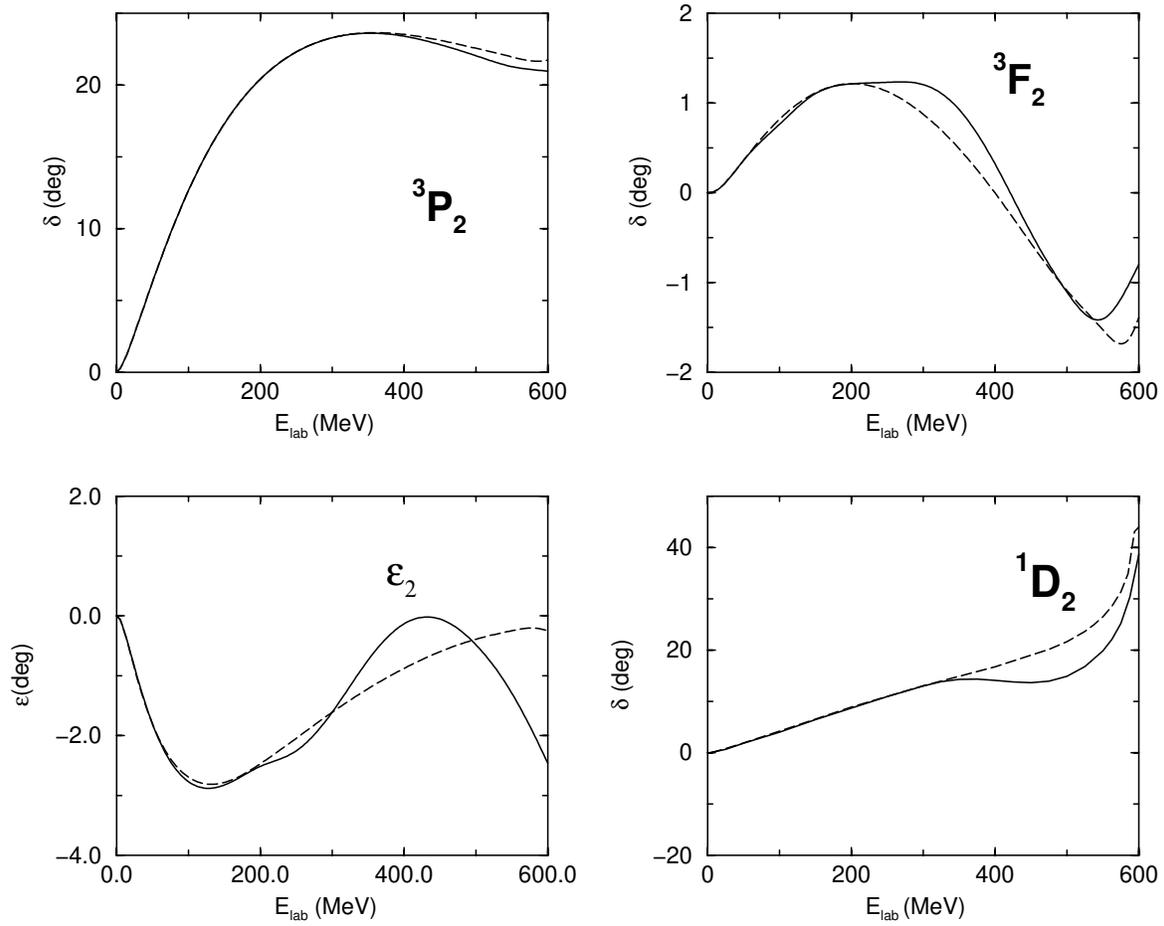


Abbildung 4.1: Fortsetzung.

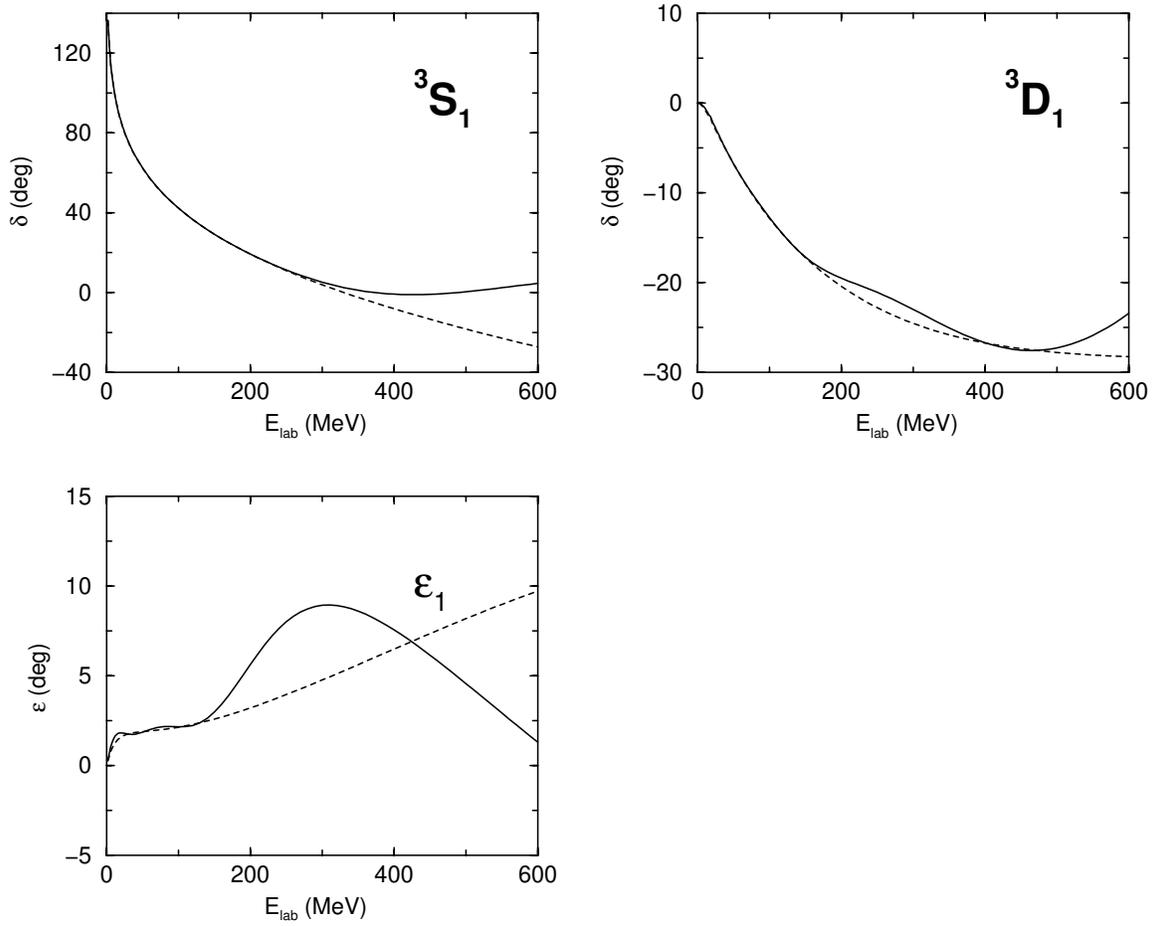


Abbildung 4.1: Fortsetzung.

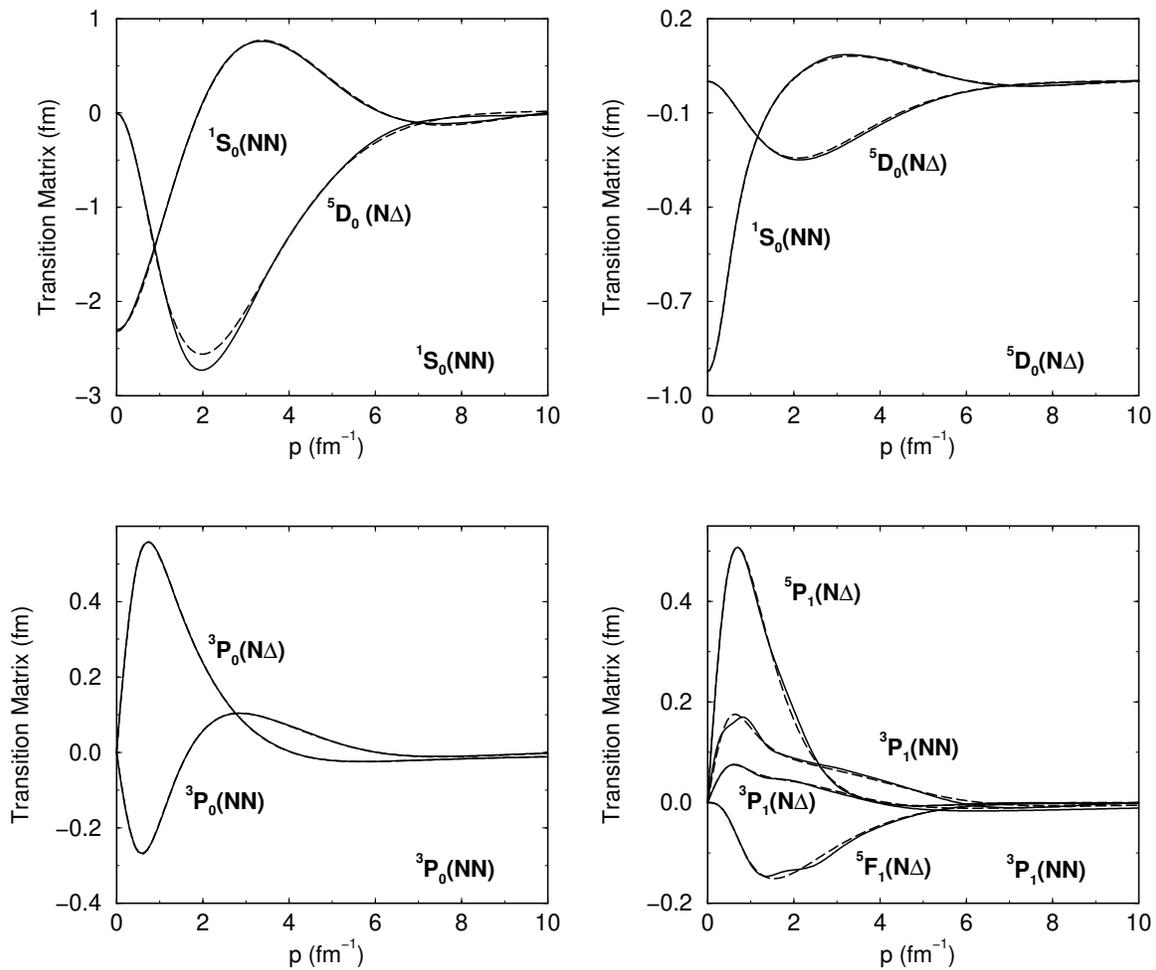


Abbildung 4.2: Off-shell Übergangsmatrizen mit Kanalkopplung. Matrixelemente $\langle pLSB|t^{\pi IT}(-p_0^2/m_N)|p_0L_0S_0B_0\rangle$ für den charakteristischen Impuls $p_0 = 0.25 \text{ fm}^{-1}$ werden als Funktion des Impulses p für die separabel entwickelte Wechselwirkung A2 (durchgezogene Kurven) und die Ausgangswechselwirkung (gestrichelte Kurven) verglichen. Nur ausgewählte Kopplungen sind abgebildet.

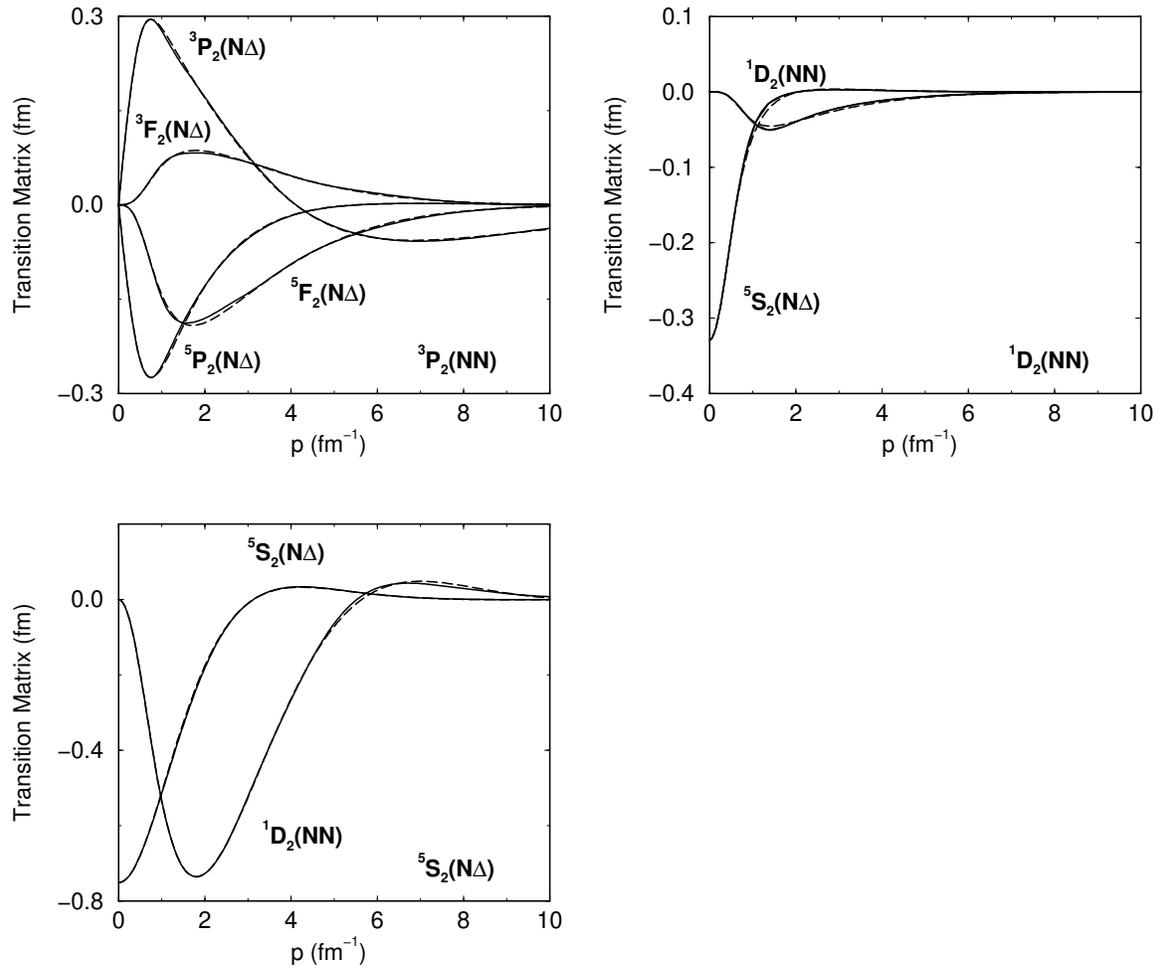


Abbildung 4.2: Fortsetzung.

5

Numerische Lösung der AGS Gleichung

In diesem Kapitel erörtern wir numerische Lösungsverfahren der AGS Gleichung. Wir werden ausführlich auf die Hauptschwierigkeit, nämlich die Singularitäten des Integralgleichungskerns, eingehen. Mit der Methode der *Contour Deformation* und der Methode der *Real-Axis Integration* werden zwei unterschiedliche Techniken zur Behandlung der Singularitäten vorgestellt. Letztere ist im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelt worden und bildet den Schwerpunkt ihres numerischen Teils und die Grundlage für meine Beschreibung von Neutron-Deuteron Streuung. Wir werden die Vor- und Nachteile beider Methoden diskutieren und in Kapitel 7 ihre Äquivalenz anhand von Observablen der elastischen Neutron-Deuteron Streuung demonstrieren. Spezielle Techniken wie die Spline Interpolation oder die Padé Approximation werden wir in gesonderten Kapiteln im Anhang behandeln und an den entsprechenden Stellen darauf verweisen.

5.1 Singularitäten des Kerns

Für den Integalkern der AGS Gleichung haben wir in Kapitel 3.3 den Ausdruck

$$\sum_i (i' q' \chi'(I' j') | Z^{\Pi j T}(Z) | i q \chi(I j)) (i | \tau(Z, q \chi(I j)) | \tilde{i}) \quad (5.1)$$

bekommen. Er ist das Produkt der Operatoren $Z(Z)$ und $\tau(Z)$, die in den Gln. (3.22) und (3.23) definiert wurden. Die komplexe Zahl Z strebt für die physikalischen Operatoren gegen die verfügbare Energie $Z = E_i + i0$ des Dreiteilchen-Systems. Wir werden nachfolgend die Singularitätsstruktur der beiden Operatoren $Z(Z)$ und $\tau(Z)$ getrennt besprechen. Dabei werden uns Singularitäten an konzeptionell unterschiedlichen Stellen begegnen. Es handelt sich dabei auf der einen Seite um Singularitäten der *Matrixelemente* im Ausdruck (5.1) und auf der anderen Seite um Singularitäten, die zwar im Verlauf der *Berechnung* dieser Matrixelemente nach den Gln. (3.22) und (3.23) auftreten, aber in den Operatoren $Z(Z)$ und $\tau(Z)$ nicht mehr vorhanden sind. Sofern nicht anders angegeben, sind alle auftretenden Impulse reell.

5.2 Singularitäten des Propagators τ

Der Zweinukleonen-Bindungszustand, das Deuteron, führt zu einem einfachen Pol der Zweinukleonen-Übergangsmatrix $t(z)$ an der Stelle der Deuteron-Bindungsenergie $z = e_d$ in der zugehörigen 3S_1 - 3D_1 Partialwelle. Dies ist eine bekannte Tatsache aus der Zweiteilchen-Streutheorie. Die in Kapitel 3 vorgestellte separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrizen reproduziert den Zweinukleonen-Bindungszustand. Folglich weist auch die separable Zweibaryonen-Übergangsmatrix $|\mathbf{g}\rangle\tau(z)\langle\mathbf{g}|$ in der 3S_1 - 3D_1 Partialwelle den Deuteron-Pol bei dem Argument $z = e_d$ auf.

Bei der Einbettung in das Dreinukleonen-Medium wird der Propagator $\tau(z)$ nach Gl. (3.13) für das Argument $E_i - \delta\mathcal{M} - \frac{q^2}{2M}$ ausgewertet. Der Propagator wird singulär, wenn dieses Argument der Deuteron-Bindungsenergie entspricht. Die Bedingung für den Pol lautet daher

$$E_i - \delta\mathcal{M} - \frac{q^2}{2M} \stackrel{!}{=} e_d. \quad (5.2)$$

Nun überzeugt man sich leicht, daß in Gegenwart eines Deuterons aufgrund der Erhaltung des Gesamtisospins das Spektator-Teilchen ein Neutron sein muß. In der Tat legt der Neutron-Deuteron Anfangszustand den Gesamtisospin auf $T = \frac{1}{2}$, $M_T = -\frac{1}{2}$ fest, und allein ein Neutron kann in Kombination mit einem Deuteron diesen Gesamtisospin ergeben. Der in Kapitel 2.3 gewählten Normierung zufolge verschwindet daher die Ruhemassendifferenz $\delta\mathcal{M}$ auf der linken Seite von Gl. (5.2) für das Neutron-Deuteron System. Die verfügbare Energie des Dreiteilchen-Systems ist durch $E_i = e_d + q_i^2/(2M)$ bestimmt. Die Bedingung (5.2) wird damit zu

$$e_d + \frac{q_i^2}{2M} - \frac{q^2}{2M} \stackrel{!}{=} e_d. \quad (5.3)$$

Sie ist erfüllt für $q = q_i$, d. h. wenn der Relativimpuls zwischen Deuteron und Spektator gerade dem Relativimpuls des Anfangszustandes entspricht. Dieser Sachverhalt entspricht auch der intuitiven Vorstellung. Zusammenfassend halten wir fest, daß der Propagator $(i|\tau(Z, q\chi(Ij))|\tilde{i})$ an der Stelle $q = q_i$ eine Singularität für solche Dreiteilchen-Partialwellen aufweist, bei denen sich das Paar in der 3S_1 - 3D_1 Partialwelle befindet. In allen anderen Partialwellen ist der Propagator frei von Singularitäten für physikalische Impulse q .

Nachdem wir gesehen haben *wo* die Singularität von $\tau(Z)$ auftritt, wollen wir im folgenden Abschnitt untersuchen *wie* sie auftritt. Dazu werde ich einen Ausdruck für $\tau(Z)$ ableiten, bei dem der singuläre Anteil explizit abgespalten ist. Diese Form ermöglicht eine bequeme Behandlung der $\tau(Z)$ -Singularität im Kern der Integralgleichung, wie ich in Kapitel 5.4.2 zeigen werde.

5.2.1 Der Deuteron Pol

Zur Vereinfachung der Diskussion betrachten wir den Zweiteilchen-Propagator $\tau(z)$ und zwar ausschließlich in der für den Pol relevanten 3S_1 - 3D_1 Partialwelle. Die erhaltenen Quantenzahlen des Paares nehmen daher die Werte $\pi = 1$, $I = 1$, $T = M_T = 0$ an. Die Einbettung in das Dreinukleonen-Medium erörtern wir anschließend.

Der Zweibaryonen-Propagator $\tau(z)$ wird berechnet nach Gl. (3.12a). Für unsere Zwecke ist es jedoch günstiger, vom inversen Operator

$$\tau^{-1}(z) = \lambda^{-1} - \langle\mathbf{g}|g_0(z)|\mathbf{g}\rangle \quad (5.4a)$$

bzw.

$$(\tau^{-1}(z))^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} = (\lambda^{-1})^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} - \langle g^{(i\pi IT)} | g_0(z) | g^{(\tilde{i}\pi IT)} \rangle \quad (5.4b)$$

auszugehen. In der praktischen Berechnung bestimmt man zunächst die Matrix auf der rechten Seite von Gl. (5.4) und bekommt dann die inverse Matrix $\tau(z)$. Aus der Tatsache, daß $\tau(z)$ an der Stelle $z = e_d$ singularär wird, folgt umgekehrt, daß die rechte Seite von Gl. (5.4) mit $z \rightarrow e_d$ gegen eine nicht-invertierbare Matrix streben muß. Mit anderen Worten verschwindet in diesem Limes die Determinante

$$\lim_{z \rightarrow e_d} \det[\lambda^{-1} - \langle \mathbf{g} | g_0(z) | \mathbf{g} \rangle] = 0.$$

Allerdings kann man der rechten Seite in Gl. (5.4) diese Eigenschaft nicht unmittelbar ansehen. Um sie zu verdeutlichen, betrachten wir die speziellen Elemente

$$(\lambda^{-1})^{(i_0\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} - \langle g^{(i_0\pi IT)} | g_0(z) | g^{(\tilde{i}\pi IT)} \rangle \quad (5.5)$$

mit fixiertem Rangindex i_0 und variablem Rangindex \tilde{i} . Den Rang i_0 wählen wir als den Rang des Deuterons, das sich nach Konstruktion in dem Satz von Zuständen befindet, aus denen die separable Entwicklung der 3S_1 - 3D_1 Partialwelle aufgebaut wird. Die Elemente in dem Ausdruck (5.5) bilden also eine Spalte der Matrix (5.4). Unter diesen Voraussetzungen bekommen wir für die Matrixelemente $(\lambda^{-1})^{(i_0\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)}$ zufolge Ref. [20]

$$(\lambda^{-1})^{(i_0\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} = \langle g^{(i_0\pi IT)} | g_0(e_d) | g^{(\tilde{i}\pi IT)} \rangle. \quad (5.6)$$

Es folgt nach

$$\begin{aligned} (\tau^{-1}(z))^{(i_0\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} &= [\lambda^{-1} - \langle g | g_0(z) | g \rangle]^{(i_0\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} \\ &= [\langle g | g_0(e_d) | g \rangle - \langle g | g_0(z) | g \rangle]^{(i_0\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} \\ &= (z - e_d) [\langle g | g_0(e_d) g_0(z) | g \rangle]^{(i_0\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

In den letzten Schritt ist die Identität $g_0(z_1) - g_0(z_2) = (z_2 - z_1)g_0(z_1)g_0(z_2)$, gültig für zwei beliebige komplexe Zahlen z_1 und z_2 , eingeflossen. Der Faktor $(z - e_d)$ ist explizit abgespalten. Mit ihm verschwindet im Limes $z \rightarrow e_d$ die gesamte Spalte (5.5).

Als Hilfsgrößen führen wir eine Matrix $\tilde{\tau}(z)$ und eine Diagonalmatrix $d(z)$ wie folgt ein

$$\begin{aligned} (\tilde{\tau}^{-1}(z))^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} &= \begin{cases} [\langle g | g_0(e_d) g_0(z) | g \rangle]^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} & \text{für } i = i_0, \\ (\tau^{-1}(z))^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} & \text{sonst,} \end{cases} \\ d(z)^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} &= \begin{cases} 1 & \text{für } i = \tilde{i} = i_0, \\ \frac{1}{z - e_d} & \text{für } i = \tilde{i} \neq i_0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\tau^{-1}(z) = (z - e_d) d(z) \tilde{\tau}^{-1}(z),$$

also

$$\tau(z) = \frac{1}{(z - e_d)} \tilde{\tau}(z) d^{-1}(z). \quad (5.8)$$

Die Matrix $\tilde{\tau}(z)$ ist auf der positiven reellen Achse nicht singular. Für alle physikalisch relevanten Argumente z kann daher die Inverse numerisch problemlos berechnet werden. Wir überzeugen uns, daß auch die Matrix $d^{-1}(z)$ im Limes $z \rightarrow e_d$ existiert. Der Definition zufolge haben wir nämlich

$$\lim_{z \rightarrow e_d} (d^{-1}(z))^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = \tilde{i} = i_0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Demnach ist mit dem Faktor $\frac{1}{(z - e_d)}$ in Gl. (5.8) die Singularität vollständig abgespalten worden.

Die Darstellung (5.8) erleichtert die Weiterverarbeitung von $\tau(z)$ in der AGS Gleichung erheblich aufgrund folgender Eigenschaften:

1. Obwohl im Limes $z \rightarrow e_d$ die Matrix $\tau(z)$ als Ganzes singular wird, enthält die rechte Seite der Darstellung (5.8) den singulären Anteil als *skalaren* Faktor.
2. Zur Weiterverarbeitung ist die Kenntnis des Residuums von $\tau(z)$ bei e_d notwendig. Dieses kann aus Gl. (5.8) direkt abgelesen werden, nämlich als $\tilde{\tau}(e_d) d^{-1}(e_d)$.

Was die Einbettung in das Dreinukleonen-System anbelangt, so bemerkten wir bereits, daß sich die Singularität des Propagators nur in rein nukleonischen Dreiteilchen-Partialwellen zeigt. Den Übergang von dem Zweibaryonen-Propagator $\tau(z)$ zu dem Propagator $\tau(Z)$ im Dreinukleonen-Medium erreicht man nach Gl. (3.13b) mittels Verschieben des Argumentes, d. h.

$$\tau(Z) = \tau\left(Z - \frac{q^2}{2M}\right). \quad (5.9)$$

Wir erinnern nochmals, daß sämtliche Überlegungen dieses Kapitels nur für die 3S_1 - 3D_1 Partialwelle relevant sind.

5.2.2 Berechnung der Matrixelemente von τ

Nachdem wir die Singularitäten des Propagators $\tau(Z)$ vollständig untersucht haben, wenden wir uns solchen Singularitäten zu, die zwar im Verlauf der numerischen Berechnung seiner Matrixelemente ($i|\tau(Z, q\chi(Ij))|\tilde{i}$) auftreten, aber im fertigen Propagator nicht mehr vorhanden sind. Dazu betrachten wir erneut die Definition aus Gl. (3.23)

$$(i|\tau^{-1}(Z, q\chi(Ij))|\tilde{i}) = (\lambda^{-1})^{(i\pi IT)(\tilde{i}\pi IT)} - \sum_{LSB} \int_0^\infty p^2 dp \frac{\langle g^{(i\pi IT)} | pLSB \rangle \langle pLSB | g^{(\tilde{i}\pi IT)} \rangle}{Z - \delta\mathcal{M} - \frac{p^2}{2\mu} - \frac{q^2}{2M}}. \quad (5.10)$$

Der Integrand in Gl. (5.10) enthält den Faktor

$$\frac{1}{w^2 + i0 - \frac{p^2}{2\mu}}, \quad (5.11)$$

wobei wir mit $Z = E_i + i0$ die Abkürzung $w^2 = E_i - \delta\mathcal{M} - \frac{q^2}{2M}$ für alle von der Integrationsvariablen p unabhängigen Größen eingeführt haben. Im Fall $w^2 < 0$ ist der Faktor (5.11) eine glatte Funktion von p und die Integration in Gl. (5.10) kann problemlos ausgeführt werden. Im Fall $w^2 > 0$ tritt eine Singularität auf. Im Unterschied zu der Singularität, die uns im vorigen Kapitel begegnet ist, handelt es sich hier um die numerische Berechnung eines einzelnen Integrals mit integrierbarer Singularität. Zur Lösung bedienen wir uns einer Subtraktionstechnik und benutzen die bekannte Identität (siehe z. B. [47])

$$\frac{1}{x \pm i0} = \frac{\mathcal{P}}{x} \mp i\pi\delta(x). \quad (5.12)$$

Das Symbol \mathcal{P} gibt wie in Gl. (3.7) die Vorschrift an, den Hauptwert der Singularität zu nehmen. In Anwendung auf Gl. (5.11) liefert Gl. (5.12)

$$\frac{1}{w^2 + i0 - \frac{p^2}{2\mu}} = \frac{\mathcal{P}}{w^2 - \frac{p^2}{2\mu}} + \frac{i\pi}{2w} \delta\left(w - \frac{p}{\sqrt{2\mu}}\right). \quad (5.13)$$

Mit Hilfe der Identität

$$\mathcal{P} \int_0^\infty \frac{dp}{p_0^2 - p^2} = 0,$$

gültig für ein konstantes $p_0^2 > 0$, bekommen wir

$$\begin{aligned} \int_0^\infty p^2 dp \frac{\langle g^{(i\pi IT)} | pLSB \rangle \langle pLSB | g^{(i\pi IT)} \rangle}{w^2 + i0 - \frac{p^2}{2\mu}} = \\ \int_0^\infty dp \frac{p^2 \langle g^{(i\pi IT)} | pLSB \rangle \langle pLSB | g^{(i\pi IT)} \rangle - 2\mu w^2 \langle g^{(i\pi IT)} | (\sqrt{2\mu}w)LSB \rangle \langle (\sqrt{2\mu}w)LSB | g^{(i\pi IT)} \rangle}{w^2 - \frac{p^2}{2\mu}} \\ + \frac{i\pi}{2} \sqrt{2\mu}w \langle g^{(i\pi IT)} | (\sqrt{2\mu}w)LSB \rangle \langle (\sqrt{2\mu}w)LSB | g^{(i\pi IT)} \rangle, \quad (5.14) \end{aligned}$$

wobei die Masse μ vom Baryoneninhalt B des Zustandes $|pLSB\rangle$ abhängt und wir wiederum $w^2 = E_i - \delta\mathcal{M} - \frac{q^2}{2M} > 0$ gesetzt haben. Im Integranden auf der rechten Seite von Gl. (5.14) streben mit $p \rightarrow \sqrt{2\mu}w$ sowohl der Zähler als auch der Nenner gegen Null, der Bruch gegen einen endlichen Wert. Die Subtraktion hat den singulären Integranden regularisiert und die Integration kann mit üblichen numerischen Methoden ausgeführt werden. Die Hauptwertvorschrift \mathcal{P} kann entfallen. Die besprochene Singularität tritt im resultierenden Propagator $(i|\tau(Z, q\chi(Ij))|\tilde{i})$ nicht mehr auf.

5.3 Singularitäten von Z

In Kapitel 3.2 hatten wir den Operator $Z(Z)$ als

$$Z(Z) = \langle \mathbf{g} | P G_0(Z) | \mathbf{g} \rangle$$

definiert. Während der Permutationsoperator P frei von Singularitäten ist, übertragen sich die Singularitäten der freien Resolvente $G_0(Z)$ auf den Operator $Z(Z)$. Wir beginnen daher diesen Abschnitt mit der Untersuchung der Singularitätsstruktur der freien Resolvente $G_0(Z)$ und erörtern im Anschluß die Lage der Singularitäten des Operators $Z(Z)$. Wie aus den vorangehenden Kapiteln bekannt, wird das Argument Z für den physikalischen Operator zu der verfügbaren Energie des Dreiteilchen-Systems, d. h.

$$Z \rightarrow E_i + i0 = e_d + \frac{q_i^2}{2M} + i0. \quad (5.15)$$

5.3.1 Singularitätsstruktur von G_0

Die Singularitätsstruktur von $G_0(Z)$ läßt sich anhand der Wirkung auf freie Dreiteilchen-Zustände $|\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle$ studieren, die in Gl. (2.8) definiert wurden. Sie sind Eigenzustände des kinetischen Operators H_0 ,

$$H_0 |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle = E_0 |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle,$$

zu dem positiven Energie-Eigenwert

$$E_0 = \delta\mathcal{M} + \frac{p^2}{2\mu} + \frac{q^2}{2M} > 0.$$

Zufolge Gl. (2.3) schließt H_0 und somit auch E_0 Ruhemassendifferenzen $\delta\mathcal{M}$ ein. Es folgt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} i\varepsilon G_0(E_i + i\varepsilon) |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i\varepsilon}{E_i + i\varepsilon - H_0} |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle \quad (5.16a)$$

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i\varepsilon}{E_i + i\varepsilon - E_0} |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle \quad (5.16b)$$

$$= \begin{cases} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i\varepsilon}{i\varepsilon} |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle = |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle & \text{für } E_i = E_0 \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i\varepsilon}{E_i - E_0} |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle = 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.16c)$$

Diese Gleichungen verdeutlichen, daß ohne den gegen Null strebenden Faktor $i\varepsilon$ der Ausdruck $G_0(E_i + i\varepsilon) |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle$ im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ für

$$E_i = E_0 \quad (5.17)$$

divergiert. Offensichtlich tritt immer dann eine Singularität in Erscheinung, wenn die Energie des Dreiteilchen-Systems E_i einem Eigenwert E_0 aus dem Spektrum von H_0 entspricht. Das Spektrum von H_0 ist die positive reelle Achse. Folglich liegen die Pole von $G_0(Z)$ auf der positiven reellen Achse. Der physikalische Grund dieser Pole ist die Tatsache, daß für positive Energien E_i die freie Bewegung dreier Teilchen energetisch möglich ist.

In bezug auf die Neutron-Deuteron Streuung sind drei Energiebereiche zu unterscheiden:

1. Die Energie ist negativ, d. h. unterhalb der Neutron-Deuteron Aufbruchschwelle, $E_i < 0$. In diesem Fall kann die Singularitäts-Bedingung (5.17) nicht erfüllt werden, und $G_0(E_i)$ ist frei von Singularitäten.
2. Die Energie ist positiv, jedoch kleiner als die Massendifferenz zwischen dem Δ -Isobar und dem Nukleon, $0 < E_i < m_\Delta - m_N$. In diesem Fall kann die Singularitäts-Bedingung (5.17) für rein nukleonische freie Dreiteilchen-Zustände erfüllt werden. Für Dreiteilchen-Zustände mit Δ -Isobar Anregung hingegen ist der Ausdruck $G_0(E_i + i\varepsilon) |\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle$ stets regulär.
3. Die Energie ist größer als die Massendifferenz zwischen dem Δ -Isobar und dem Nukleon, $m_\Delta - m_N < E_i$. In diesem Fall kann die Singularitäts-Bedingung (5.17) für alle betrachteten freien Dreiteilchen-Zustände erfüllt werden.

Für die vorliegende Arbeit sind lediglich die Fälle 1 und 2 relevant, weil die zur Verfügung stehende Energie E_i stets kleiner als $m_\Delta - m_N$ angenommen wird. Unterhalb der Deuteron--Aufbruchschwelle, dies entspricht dem Fall 1, ist der Operator $Z(Z)$ regulär und einzig der Propagator $\mathfrak{T}(Z)$ trägt zu den Singularitäten des Kerns (5.1) bei. In der folgenden, detaillierten Untersuchung der Singularitäten von $Z(Z)$ können wir deshalb $E_i > 0$ voraussetzen.

5.3.2 Singularitätsstruktur von Z

In Kapitel 3.3 hatten wir folgenden Ausdruck für die Partialwellenzerlegung Z abgeleitet.

$$\begin{aligned}
& (i'q'\chi'(l'j')|Z^{\Pi j T}(E_i + i0)|iq\chi(lj)) \\
&= \sum_{L'S'B'} \sum_{LSB} \int_{-1}^{+1} dx \langle g^{(i'\pi l' T')} |\bar{p}'(q', q, x) L'S'B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x) LSB | g^{(i\pi l T)} \rangle \\
& \quad \times \frac{1}{\bar{p}^{l'}(q', q, x)} G_{v'v}(q', q, x) \frac{1}{E_i + i0 - \delta\mathcal{M} - \frac{q'^2}{2\mu} - \frac{q^2}{2\mu'} - \frac{q'q}{m}x} \frac{1}{\bar{p}^L(q', q, x)}.
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Das Relikt der freien Resolvente $G_0(E_i + i0)$ ist der Term

$$\frac{1}{E_i + i0 - \delta\mathcal{M} - \frac{q'^2}{2\mu} - \frac{q^2}{2\mu'} - \frac{q'q}{m}x}, \tag{5.19}$$

der die Singularitäten verursacht. Wir schreiben ihn wie folgt um

$$\frac{1}{E_i + i0 - \delta\mathcal{M} - \frac{q'^2}{2\mu} - \frac{q^2}{2\mu'} - \frac{q'q}{m}x} = \frac{m}{q'q} \frac{1}{(u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M}) + i0 - x)} \tag{5.20}$$

mit

$$u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M}) = \frac{m}{q'q} \left(E_i - \delta\mathcal{M} - \frac{q'^2}{2\mu} - \frac{q^2}{2\mu'} \right). \tag{5.21}$$

Alle von der Integrationsvariablen x unabhängigen Größen wurden zu einer neuen Funktion u zusammengefaßt. Diese Definition erweist sich als zweckmäßig, weil die Integration in x auf der rechten Seite von (5.18) jeweils für fixierte Werte der Größen q' , q , E_i und $\delta\mathcal{M}$ und damit für einen festen Wert von $u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})$ durchgeführt wird. Der Integrationsbereich der Winkelvariablen x von -1 bis $+1$ unterteilt die Wertemenge von u in drei Bereiche mit unterschiedlichem Singularitätsverhalten, d. h.

1. $|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| > 1$: Der Term (5.19) ist im Integrationsintervall frei von Singularitäten. Die numerische Berechnung bereitet keinerlei Schwierigkeiten.
2. $|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| < 1$: Der Term (5.19) wird zwar im *Innern* des Integrationsintervalls singulär, aber das resultierende Matrixelement des Operators Z ist für die betreffenden Werte von q' , q , E_i und $\delta\mathcal{M}$ regulär, da die Singularität ausintegriert wird.
3. $|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| = 1$: Der Term (5.19) wird für einen Randpunkt der Winkelintegration singulär und führt zu einem Pol von Z für die betreffenden Werte von q' , q , E_i und $\delta\mathcal{M}$.

Die Lage der Singularitäten von Z ist mithin durch die impliziten Gleichungen

$$|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| = \pm 1 \quad (5.22)$$

gegeben. Dies läßt sich in Form von Kegelschnittgleichungen schreiben

$$E_i - \delta\mathcal{M} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} q' & q \end{pmatrix} M_{\pm} \begin{pmatrix} q' \\ q \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

mit den symmetrischen 2×2 Matrizen

$$M_{\pm} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mu'} & \pm \frac{1}{m} \\ \pm \frac{1}{m} & \frac{1}{\mu} \end{pmatrix}. \quad (5.24)$$

Die Diagonalelemente der Matrizen M_{\pm} sind positiv, ebenso die Determinante $\frac{1}{\mu\mu'} - \frac{1}{m^2}$. Daraus folgt, daß die Matrizen M_{\pm} selbst positiv definit sind, d. h. auf der rechten Seite von Gl. (5.23) steht für alle nicht verschwindenden Werte von q' , q eine positive Zahl. Die Gln. (5.23) sind mithin nur zu erfüllen, falls $E_i - \delta\mathcal{M}$ ebenfalls positiv ist, wobei $\delta\mathcal{M}$ für nukleonische Dreiteilchen-Zustände Null ist. Dies deckt sich mit unseren Erkenntnissen aus der obigen Argumentation: Nur für positives $E_i - \delta\mathcal{M}$ treten Singularitäten auf.

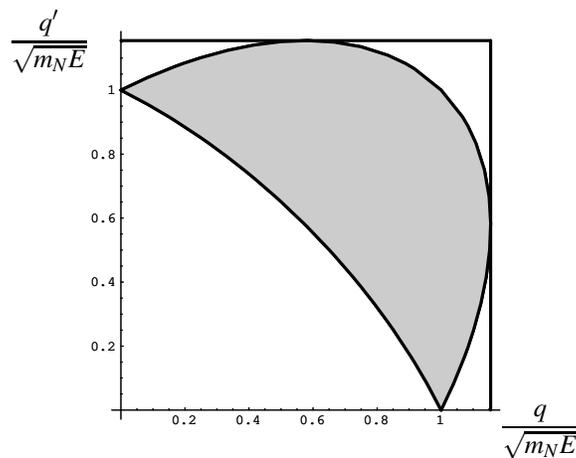


Abbildung 5.1: Lage der Singularitäten des Operators $Z(Z)$ für positive Energie E_i .

Aufgrund der positiven Definitheit der Matrizen M_{\pm} handelt es sich bei den zwei Kegelschnitten um Ellipsen. Sie sind in Abb. 5.1 dargestellt. Die Ellipsen liegen, als Konsequenz der Symmetrie der Gl. (5.23) bzgl. q' und q , symmetrisch zur Winkelhalbierenden $q' = q$. Das grau unterlegte Gebiet zwischen den Ellipsenausschnitten entspricht dem Wertebereich $|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| < 1$. Umgekehrt gilt im Außenraum der Ellipsen $|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| > 1$. Abbildung 5.1 verdeutlicht, daß beide Ellipsen vollständig in dem durch

$$q' \leq q_{\max} \wedge q \leq q_{\max}, \quad (5.25)$$

$$q_{\max} = \sqrt{\frac{4}{3}mE_i}, \quad (5.26)$$

gekennzeichneten Quadrat liegen. Wir merken nochmals an, daß im Rahmen der vorliegenden Arbeit der Operator Z lediglich für rein nukleonische Dreiteilchenkanäle singularär werden kann. In den Gln. (5.23) ist deshalb $\delta\mathcal{M} = 0$ und $\mu = \mu' = 2m$.

Zu einem beliebigen, aber fixierten Impuls q' mit $q' < q_{\max}$ existieren genau zwei Punkte $q_1(q')$ und $q_2(q')$, für die $|u(q', q_k(q'); E_i, \delta\mathcal{M})| = 1$ mit $k = 1, 2$ erfüllt ist und damit der Operator $(i'q'\chi'(I'j')|Z^{\Pi J^T}(E_i + i0)|iq_k(q')\chi(Ij))$ singularär wird. In der Abhängigkeit der Polstellen von dem Impuls q' liegt die eigentümliche Schwierigkeit der numerischen Lösung begründet. In diesem Punkt unterscheidet sich die Dreiteilchen-Streuung wesentlich von der Zweiteilchen-Streuung, bei der der Pol der freien Resolvente an einer festen Position auftritt. In Abgrenzung bezeichnet man daher die Singularitäten der Dreiteilchen-Streuung auch als *bewegliche Singularitäten*.

In den nachfolgenden Kapiteln werde ich das numerische Verfahren zur Behandlung der Singularitäten, das für die vorliegende Arbeit entwickelt wurde, vorstellen.

5.4 Behandlung der Singularitäten

Der Operator $(i'q'\chi'(I'j')|Z^{\Pi J^T}(E_i + i0)|iq\chi(Ij))$ beansprucht bei der numerischen Lösung den größten Speicherplatz. Seine Dimension schätzen wir durch das Produkt $(N_{q'}N_{\text{ch}}) \times (N_qN_{\text{ch}})$ ab.* Darin bedeuten $N_{q'}$ und N_q die Anzahl der Stützstellen, durch die die Impulse q' und q diskretisiert werden. Die Dimension N_{ch} ergibt sich durch Abzählen aller Kombinationen von Dreiteilchen-Zuständen der berücksichtigten Quantenzahlen $\chi(Ij)\Pi J^T$ mit den dazugehörigen Rängen der separablen Entwicklung. Beispielsweise beträgt diese Dimension bei Einschluß von Zweiteilchen-Wechselwirkungen bis zu einem Paardrehimpuls von $I = 3$ und Verwendung des Potentials mit Δ -Isobar Anregung in den Isospin Triplet Partialwellen $N_{\text{ch}} \approx 350$. Setzen wir die Größenordnung von $N_{q'}$ und N_q durch etwa 30 fest, so ergeben sich gewaltige Anforderungen an Speicherbedarf. Die Herausforderung besteht darin, ein Verfahren zur numerischen Lösung der AGS Gleichung zu finden, das mit der geringstmöglichen Anzahl von Stützstellen stabile Resultate liefert. Mit der Reduktion der Stützstellenanzahl verringert sich gleichzeitig auch der Bedarf an Rechenzeit.

Ich skizziere zunächst den Lösungsansatz schematisch und erörtere anschließend die Details. Dazu ist ein Blick auf Abb. 5.2 nützlich, in der die Singularitäten von $Z(Z)$ zusammen mit dem Deuteron-Pol dargestellt sind. Die Abzisse q entspricht darin dem Impuls, über

*Um eine Abschätzung handelt es sich hierbei insofern, als daß, wie wir noch sehen werden, die Anzahl der Stützstellen N_q tatsächlich von dem Impuls q' abhängt, d. h. $N_q = N_q(q')$, und somit nicht durch eine einzelne Zahl N_q zu charakterisieren ist.

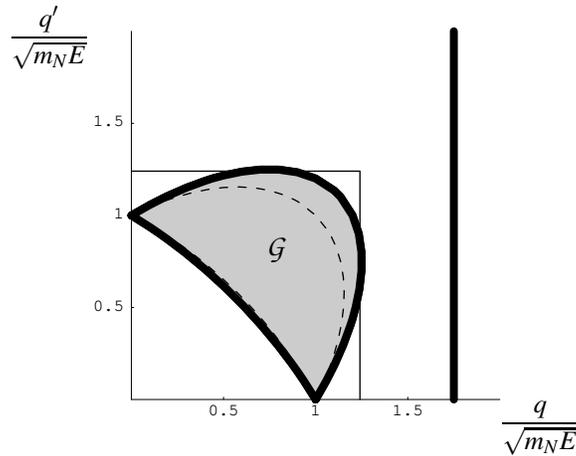


Abbildung 5.2: Partitionierung der q' - q -Ebene. Das Gebiet \mathcal{G} (schattiert gezeichnet) umschließt die Singularitäten (gestrichelte Kurve) vollständig. Dargestellt ist auch der Deuteron-Pol, der an der festen Stelle $q = q_i$ auftritt

den in der Integralgleichung zu integrieren ist. Das numerische Verfahren lässt sich durch folgende Punkte charakterisieren.

1. In der q' - q -Ebene wird ein Gebiet \mathcal{G} durch die Bedingung $|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| < 1 + \varepsilon$ mit einem positiven $\varepsilon \ll 1$ definiert. Es umfaßt die Singularitäten von $Z(Z)$ vollständig.
2. Die beiden Impulsachsen q' bzw. q werden jeweils in zwei Bereiche I', II' bzw. I, II eingeteilt. Der Teilungspunkt $q'_{I',II'}$ für die q' -Achse wird als der Impuls $q'_{I',II'} = q_{\max}$ gewählt, so daß die Gerade $q = q_{\max}$ eine der Singularitätsellipsen tangiert. Der Teilungspunkt $q_{I,II}$ für die q -Achse wird so gewählt, daß die Gerade $q' = q_{I,II}$ das Gebiet \mathcal{G} tangiert. Man beachte, daß der Bereich I nur Singularitäten von $Z(Z)$ und der Bereich II nur den Deuteron-Pol des Propagators $\tau(Z)$ enthält.
3. Der Impuls q' wird in den beiden Bereichen I' und II' jeweils durch $N'_{I'}$ und $N'_{II'}$ Punkte diskretisiert. Die Menge der Stützstellen q' bzw. q bezeichnen wir als $\{q'\}$ bzw. $\{q\}$. Die konkrete Durchführung der q Integration geschieht in Abhängigkeit von den vier möglichen Gebieten, die sich als Kombinationen aus $(I', II') \otimes (I, II)$ ergeben, und wird noch ausführlich erläutert. Die Menge der q' -Punkte in den Bereichen I und II wird durch die speziellen Impulse $q' = 0$ und $q' = q_i$ ergänzt. Der Grund für diese Wahl wird in der weiteren Diskussion verständlich werden.
4. Der Operator $Z(Z)$ wird innerhalb von \mathcal{G} als Summe $Z(Z) = Z^{(1)}(Z) + Z^{(2)}(Z)$ aus einem regulären Anteil $Z^{(1)}(Z)$ und einem singulären Anteil $Z^{(2)}(Z)$ dargestellt. Der singuläre Anteil $Z^{(2)}(Z)$ seinerseits ist als $Z^{(2)}(Z) = w(Z)\tilde{Z}^{(2)}(Z)$ so konstruiert, daß er in den regulären Faktor $\tilde{Z}^{(2)}(Z)$ und die singuläre Funktion $w(Z)$ faktorisiert. Die Funktion $w(Z)$ hängt nur von den Impulsen q' und q ab, d. h. $w(Z) = w(q', q; Z)$, aber weder von den Dreiteilchen-Quantenzahlen noch von den Rangindizes. Darin liegt der entscheidende

Vorzug dieser Aufspaltung begründet, denn die Singularitätsstruktur wird vollständig von der skalaren Funktion $w(Z)$ getragen, während die beiden Matrizen $Z^{(1)}(Z)$ und $\tilde{Z}^{(2)}(Z)$ frei von Singularitäten sind. Weiterhin ist allein die Funktion $w(Z)$ komplexwertig, die Matrizen $Z^{(1)}(Z)$ und $\tilde{Z}^{(2)}(Z)$ dagegen rein reell. Sie können deshalb als reelle Größen abgespeichert werden, wodurch sich der Speicherbedarf auf die Hälfte reduziert. Für die konkrete Form der Aufspaltung verweisen wir auf den Anhang D.2. Aus diesem Anhang geht auch hervor, daß der Ausdruck $\tilde{Z}^{(2)}$ für Impulse q' und q , für die $|u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})| \gg 1$ gilt, große Werte annehmen kann, so daß es sich nicht empfiehlt die Aufspaltung für alle Werte von q' und q vorzunehmen. In der Tat liefert dieses Verhalten von $\tilde{Z}^{(2)}(Z)$ den Grund zur Einführung des Gebietes \mathcal{G} , die sich in diesem Licht als ganz natürlich erweist.[†]

5. Für die Integration des Anteils $w(Z)\tilde{Z}^{(2)}(Z)$ in der Integralgleichung wird eine speziell entwickelte Methode verwandt, die für die singuläre Funktion $w(Z)$ geeignete Gewichte zur numerischen Integration bestimmt. Anhang C.3 beschreibt diese Methode im Detail.

Wir besprechen nun die Einzelheiten. Um die Diskussion durchsichtiger zu gestalten, schreiben wir die AGS Gleichung in einer symbolischen Kurzform als

$$\mathbf{X}(q', q_i) = \mathbf{Z}(q', q_i) + \int_0^\infty dq q^2 \mathbf{Z}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}(q, q_i) \quad (5.27)$$

und deuten durch fettgedruckte Symbole die nicht explizit kenntlich gemachte Abhängigkeit von den diskreten Dreiteilchen-Quantenzahlen und den Rangindizes an. Gleichung (5.27) ist also als Matrixgleichung aufzufassen. Zusätzlich haben wir die Abhängigkeit der auftretenden Größen von der komplexen Zahl Z , die für die physikalischen Operatoren durch $Z = E_i + i0$ zu ersetzen ist, unterdrückt.

Die numerische Lösung der AGS Gleichung benutzt die in Anhang B dargelegte Padé Approximation[‡] zur Bestimmung von $\mathbf{X}(q', q_i)$. Dabei werden iterativ die Größen $\mathbf{X}^{(n)}(q', q_i)$ durch die Vorschrift

$$\mathbf{X}^{(0)}(q', q_i) = \mathbf{Z}(q', q_i), \quad \mathbf{X}^{(n+1)}(q', q_i) = \int_0^\infty dq q^2 \mathbf{Z}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i) \quad (5.28)$$

berechnet. Die Anfangsgröße $\mathbf{X}^{(0)}(q', q_i)$ markiert die Born-Approximation. Der zentrale Punkt der Iteration (5.28) ist die Ausführung der q -Integration. Sie wird zerlegt in die beiden Bereiche I und II, d. h.

$$\int_0^\infty dq q^2 \mathbf{Z}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i) = \mathbf{Q}_1(q') + \mathbf{Q}_2(q'), \quad (5.29a)$$

$$\mathbf{Q}_1(q') = \int_0^{q_{I,II}} dq q^2 \mathbf{Z}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i), \quad \mathbf{Q}_2(q') = \int_{q_{I,II}}^\infty dq q^2 \mathbf{Z}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i). \quad (5.29b)$$

[†]Es sei darauf hingewiesen, daß Ref. [8] eine vergleichbare Aufspaltung in reguläre und singuläre Anteile vornimmt, die aus den geschilderten Gründen dort ebenfalls nur in einem beschränkten Bereich der q - q -Ebene, der mit \mathcal{G} vergleichbar ist, vorgenommen wird. In der Ausführung der Integration über die singulären Anteile weicht unsere Vorgehensweise jedoch grundsätzlich von der in Ref. [8] geschilderten ab.

[‡]In demselben Kapitel wird auch geschildert, welche Vorteile die Padé Approximation gegenüber der prinzipiell möglichen Lösung der Gleichung (5.27) als lineares Gleichungssystem bietet.

5.4.1 Berechnung des Integrales \mathbf{Q}_1

Im Bereich I sind die beiden Fälle a) $q' \leq q_{\max}$ und b) $q' > q_{\max}$ zu unterscheiden.

Fall a): $q' > q_{\max}$

Wie gesehen, tritt für $q' > q_{\max}$ keine Singularität im Operator $\mathbf{Z}(Z)$ auf. Unter dieser Bedingung ist der Integrand regulär und die numerische Berechnung des Integrales $\mathbf{Q}_1(q')$ geschieht auf die übliche Weise, nämlich durch Anwendung der Gauß-Legendre Integrationsregel. Dabei wird das Integral durch eine diskrete Summe genähert, d. h.

$$\int_0^{q_{1,\text{II}}} dq q^2 \mathbf{Z}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i) \approx \sum_{k=1}^{N_I} w_k^{\text{GL}} q_k^{\text{GL}2} \mathbf{Z}(q', q_k^{\text{GL}}) \boldsymbol{\tau}(q_k^{\text{GL}}) \mathbf{X}^{(n)}(q_k^{\text{GL}}, q_i) \quad (5.30)$$

mit N_I Gauß-Legendre Stützstellen q_k^{GL} und Gewichten w_k^{GL} .

Fall b): $q' \leq q_{\max}$

Für $q' \leq q_{\max}$ wird der Integrand an den Stellen $q_1(q')$ und $q_2(q')$ singulär und wir werten das Integral in folgenden Schritten aus.

1. Das Integrationsintervall $[0, q_{1,\text{II}}]$ wird durch zwei Punkte q_l und q_r , mit $q_l < q_r$, in die drei Teilintervalle $\mathcal{J}_1 = [0, q_l]$, $\mathcal{J}_2 = [q_l, q_r]$ und $\mathcal{J}_3 = [q_r, q_{1,\text{II}}]$ partitioniert. Die Punkte q_l und q_r werden als die beiden Schnittpunkte der zur Abszisse parallelen Geraden durch q' und der Randkurve des Gebietes \mathcal{G} bestimmt (siehe Fig. 5.2). Die Singularitäten treten in dem mittleren Intervall \mathcal{J}_2 auf.
2. Für jedes Teilintervall \mathcal{J}_j , $j = 1, \dots, 3$, werden Gauß-Legendre Stützstellen $\bar{q}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_j)$ und Gewichte $\bar{w}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_j)$ bestimmt, deren Anzahl $N_{\mathcal{J}_j}$ sich nach der jeweiligen Intervalllänge bemisst. Allerdings wird dafür Sorge getragen, daß diese Stützstellenzahl nie unter eine vorgegebene Mindestanzahl sinkt. In den äußeren Teilintervallen \mathcal{J}_1 bzw. \mathcal{J}_3 , in denen der Integrand sich regulär verhält, wird anschließend die Integration unter Verwendung der gewöhnlichen Gauß-Legendre Integrationsregel mit $N_{\mathcal{J}_1}$ bzw. $N_{\mathcal{J}_3}$ Stützstellen analog zu Gl. (5.30) durchgeführt.
3. In dem mittleren Intervall \mathcal{J}_2 wird, wie bereits erwähnt, der Operator $\mathbf{Z}(Z)$ in die Summe zweier Anteile $\mathbf{Z}(Z) = \mathbf{Z}^{(1)}(Z) + w(Z) \tilde{\mathbf{Z}}^{(2)}(Z)$ aufgespalten, wobei die skalare Funktion $w(Z)$ die Singularitäten vollständig enthält. Die konkrete Form dieser Zerlegung wird im Anhang D.2 angegeben. Der Anteil

$$\int_{q_l}^{q_r} dq q^2 \mathbf{Z}^{(1)}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i) \quad (5.31)$$

mit dem regulären $\mathbf{Z}^{(1)}(Z)$ wird wiederum mit der Gauß-Legendre Integrationsregel mit $N_{\mathcal{J}_2}$ Stützstellen analog zu Gl. (5.30) ausgewertet. Das Integral über den singulären Anteil $w(Z) \tilde{\mathbf{Z}}^{(2)}(Z)$ benutzt das in Anhang C.3 beschriebene Verfahren zur numerischen Berechnung von Integralen mit integrierbarer Singularität. Es erzeugt zu den

unter Punkt 2. vorgegebenen Stützstellen $\bar{q}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_2)$ in dem Intervall \mathcal{J}_2 und der singulären Funktion $w(Z)$ spezielle Gewichte W_k , so daß sich das Integral durch

$$\int_{q_l}^{q_r} dq q^2 w(q', q; Z) \tilde{\mathbf{Z}}^{(2)}(q', q) \boldsymbol{\tau}(q) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i) \approx \sum_{k=1}^{N_{\mathcal{J}_2}} W_k \bar{q}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_2)^2 \tilde{\mathbf{Z}}^{(2)}(q', \bar{q}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_2)) \boldsymbol{\tau}(\bar{q}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_2)) \mathbf{X}^{(n)}(\bar{q}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_2), q_i) \quad (5.32)$$

in bemerkenswerter Genauigkeit approximieren läßt. Details und Beispiele finden sich in dem zitierten Anhang C.3.

4. Die Partition $\{0, q_l, q_r, q_{l, \text{II}}\}$ ist für jeden Impuls $q' < q_{\text{max}}$ verschieden. Folglich bekommt man auch für jeden Impuls $q' < q_{\text{max}}$ unterschiedliche Stützstellen $\bar{q}_k^{\text{GL}}(\mathcal{J}_j)$ in den drei Teilintervallen. Damit wird der Integrand an Stützstellen abgefragt, die nicht in der Menge der Impulse $\{q'\}$ enthalten sind. In bezug auf die Operatoren $Z(Z)$ sowie $\boldsymbol{\tau}(Z)$ stellt dieser Umstand keine Schwierigkeit dar, da man sie vorderhand an den betreffenden Stützstellen berechnen und abspeichern kann. Diese Operatoren sind damit auch exakt verfügbar. Der iterierte Vektor $\mathbf{X}^{(n)}(Z)$ hingegen wird an den gewünschten Stützstellen mittels Interpolation gewonnen. Da im Verlauf der Iteration sehr viele Interpolationen anfallen,[§] bedienen wir uns der in Anhang A beschriebenen Interpolationstechnik, die diese Aufgabe sehr effizient erfüllt. An dieser Stelle wird auch deutlich, weshalb der spezielle Impuls $q' = 0$ unter die Menge der Stützstellen $\{q'\}$ subsummiert wurde: Das Vorhandensein der Stützstelle $q' = 0$ ermöglicht eine präzise Interpolation von $\mathbf{X}^{(n)}(Z)$ selbst für kleine Impulse.

5.4.2 Berechnung des Integrales \mathbf{Q}_2

In dem Integrationsintervall $[q_{l, \text{II}}, \infty[$ tritt in der 3S_1 - 3D_1 Partialwelle der Deuteron-Pol für den festen Impuls $q = q_i$ auf. In allen anderen Partialwellen ist der Integrand regulär und die Integration problemlos. Nach der in Kapitel 5.2 geleisteten Vorarbeit, wonach sich der Propagator $\boldsymbol{\tau}(Z)$ in der 3S_1 - 3D_1 Partialwelle als Produkt

$$\boldsymbol{\tau}(E_i + i0) = \frac{1}{(E_i + i0 - \frac{q^2}{2M} - e_d)} \tilde{\boldsymbol{\tau}}(E_i - \frac{q^2}{2M}) \mathbf{d}^{-1}(E_i - \frac{q^2}{2M}) \quad (5.33)$$

mit nicht-singulären Matrizen $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ und \mathbf{d}^{-1} darstellen läßt, bereitet auch die Behandlung des Deuteron-Pols keine Schwierigkeiten mehr. In die rechte Seite von Gl. (5.33) ist die Beziehung (5.9) zwischen dem Propagator $\boldsymbol{\tau}$ im Dreiteilchen-Medium und dem Zweiteilchen-Propagator τ eingeflossen, die die Abhängigkeit von dem Integrationsimpuls q hervorhebt. Wir schreiben unter Verwendung der Identität (5.12) sowie $E_i = e_d + \frac{q_i^2}{2M}$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_2(q') &= i\pi q_i M \mathbf{Z}(q', q_i) \tilde{\boldsymbol{\tau}}(e_d) \mathbf{d}^{-1}(e_d) \mathbf{X}^{(n)}(q_i, q_i) \\ &+ \underbrace{\mathcal{P} \int_{q_{l, \text{II}}}^{\infty} dq q^2 \mathbf{Z}(q', q) \frac{\tilde{\boldsymbol{\tau}}(E_i - \frac{q^2}{2M}) \mathbf{d}^{-1}(E_i - \frac{q^2}{2M})}{(q_i^2 - q^2)/2M} \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i)}_{=:\mathbf{Q}_2^{(2)}(q')} \end{aligned} \quad (5.34)$$

[§]Der Anteil an Rechenzeit, der auf die Interpolation entfällt, beträgt etwa 30-40%.

und regularisieren den zweiten Term $\mathbf{Q}_2^{(2)}(q')$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_2^{(2)}(q') &= q_i^2 2M \mathbf{Z}(q', q_i) \tilde{\tau}(e_d) \mathbf{d}^{-1}(e_d) \mathbf{X}^{(n)}(q_i, q_i) \mathcal{P} \int_{q_{I,II}}^{\infty} dq \frac{1}{q_i^2 - q^2} \\ &+ \mathcal{P} \int_{q_{I,II}}^{\infty} dq \frac{2M}{q_i^2 - q^2} \left[q^2 \mathbf{Z}(q', q) \tilde{\tau}(E_i - \frac{q^2}{2M}) \mathbf{d}^{-1}(E_i - \frac{q^2}{2M}) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i) \right. \\ &\quad \left. - q_i^2 \mathbf{Z}(q', q_i) \tilde{\tau}(e_d) \mathbf{d}^{-1}(e_d) \mathbf{X}^{(n)}(q_i, q_i) \right]. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Mit Hilfe der Identität

$$\mathcal{P} \int_{q_{I,II}}^{\infty} \frac{dq}{q_i^2 - q^2} = \frac{1}{2q_i} \log \left(\frac{q_i + q_{I,II}}{q_i - q_{I,II}} \right) \quad (5.36)$$

ergibt sich endgültig

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_2(q') &= \left[i\pi + \log \frac{q_i + q_{I,II}}{q_i - q_{I,II}} \right] q_i M \mathbf{Z}(q', q_i) \tilde{\tau}(e_d) \mathbf{d}^{-1}(e_d) \mathbf{X}^{(n)}(q_i, q_i) \\ &+ \int_{q_{I,II}}^{\infty} dq \frac{2M}{q_i^2 - q^2} \left[q^2 \mathbf{Z}(q', q) \tilde{\tau}(E_i - \frac{q^2}{2M}) \mathbf{d}^{-1}(E_i - \frac{q^2}{2M}) \mathbf{X}^{(n)}(q, q_i) \right. \\ &\quad \left. - q_i^2 \mathbf{Z}(q', q_i) \tilde{\tau}(e_d) \mathbf{d}^{-1}(e_d) \mathbf{X}^{(n)}(q_i, q_i) \right]. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Die Regularisierung des Integranden im zweiten Term von Gl. (5.37) macht die Hauptwertvorschrift überflüssig. Nach Diskretisierung des Integralen in Gl. (5.37) läßt sich der erste Summand formal als Beitrag der zusätzlichen Stützstelle q_i mit dem Gewicht $\left[i\pi + \log \frac{q_i + q_{I,II}}{q_i - q_{I,II}} \right] q_i M$ auffassen und auf diese Weise in der Numerik bequem verarbeiten. Damit wird auch verständlich, weshalb der spezielle Impuls $q' = q_i$ in die Menge $\{q'\}$ aufgenommen wurde: Der iterierte Vektor ist an dieser Stelle exakt bekannt und braucht nicht interpoliert zu werden.

5.5 Berechnung von Neutron-Deuteron Aufbruch-Streuung

Die Berechnung der Aufbruchamplitude vollzieht sich unter Benutzung von Gl. (3.26). Sie setzt die Kenntnis der *half-shell* Elemente des Operators $(i'q'\chi'(I'j')|X^{\Pi j'T}(Z)|iq\chi(Ij))$ im Intervall $[0, q_{\max}]$ voraus. Es ist jedoch nach den gegebenen Erklärungen unmittelbar klar, daß die Padé Iteration *alle* gesuchten *half-shell* Elemente liefert. Als Konsequenz hat man zur Berechnung der Aufbruch-Übergangsmatrix allein die Quadratur Gl. (3.26) auszuführen. Diese Eigenschaft steht im Gegensatz zu der Technik der *Contour Deformation*, die es prinzipiell nicht erlaubt, in einem Schritt sämtliche *half-shell* Elemente des Operators $(i'q'\chi'(I'j')|X^{\Pi j'T}(Z)|iq\chi(Ij))$ zu berechnen.

5.6 Vergleich numerischer Methoden

Nachdem wir bereits einige Anmerkungen über die verschiedenen numerischen Techniken zur Behandlung der Singularitäten in den Text eingeflochten haben, wollen wir in diesem

Kapitel noch einige allgemeine vergleichende Betrachtungen anstellen. Dazu gehen wir kurz auf die Idee ein, die sich hinter der *Contour Deformation* verbirgt. Detailliertere Informationen finden sich in Ref. [32]. Im wesentlichen handelt es sich um eine Anwendung des Cauchy Integralsatzes: Die Integrationsvariable q wird als komplexe Zahl aufgefaßt und der Integrationsweg so deformiert, daß er die Singularitäten umgeht und gleichzeitig im Gebiet zwischen der positiven reellen Achse und dem Integrationweg keinerlei Singularitäten liegen. Die Integralgleichung wird auf dem deformierten Pfad gelöst und anschließend auf die reelle Achse zurücktransformiert.

An dieser simplen Beschreibung läßt sich sogleich der wesentliche Vorteil der Methode der *Contour Deformation* ablesen: Sie ist mit relativ geringem Aufwand zu implementieren. Dem stehen allerdings eine Reihe von Nachteilen gegenüber:

- Stillschweigend wird angenommen, daß die Formfaktoren der separablen Entwicklung im Gebiet zwischen dem komplexen Pfad und der reellen Achse frei von Singularitäten sind.
- Der Integrationspfad ist gekrümmt. Die Integration entlang eines gekrümmtes Weges verlangt aber mit Notwendigkeit mehr Stützstellen als die Integration entlang eines geraden Weges. Mathematisch kommt eine ganze Kurvenschar als mögliche Integrationswege in Betracht, die Praxis erweist jedoch, daß in der Regel nur ganz bestimmte, sorgfältig ausgewählte Pfade stabile Resultate liefern. Diese optimalen Pfade hängen dabei über die Lage der Singularitäten noch von der Streuenergie E_i ab, so daß für jede gewünschte Energie ein neuer Pfad empirisch bestimmt werden muß.
- Der aber schwerwiegendste Nachteil dürfte sein, daß die *Contour Deformation* nicht unmittelbar die Berechnung der *half-shell* Elemente $(\langle q' \chi'(I' j') | X^{\Pi j T}(Z) | i q_i \chi(I j) \rangle)$ zuläßt. Vielmehr kann man zeigen [47], daß zu diesem Zweck mindestens zwei qualitativ verschiedene Pfade notwendig sind, wodurch sich die Arbeit zumindest verdoppelt. In der Praxis ist aber nicht auszuschließen, daß sogar mehr als zwei Pfade gewählt werden müssen, um die Ergebnisse zu stabilisieren.

Es sei nicht verschwiegen, daß der Versuch einer konkurrierenden Forschungsgruppe, auf dem Wege der *Contour Deformation* Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch zu berechnen, nicht von Erfolg gekrönt war. In der Tat ist mir nur eine Forschungsgruppe bekannt, die ebenfalls mit einer *Real-Axis Integration* Methode Aufbruchrechnungen durchführt [16]. In Ref. [16] werden die Dreiteilchen-Streugleichungen für rein nukleonische Wechselwirkungen ohne separable Entwicklung gelöst. Die vorliegende Arbeit ist an den Effekten interessiert, die sich durch die explizite Berücksichtigung des Δ -Isobars ergeben. Eine Lösung der Dreiteilchen-Streugleichungen mit Δ -Isobar Anregung *ohne* separable Entwicklung halten wir zum gegenwärtigen Zeitpunkt für kaum durchführbar.

6

Observablen für Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch

In diesem Kapitel beschreiben wir die Berechnung von Observablen für Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch. Die Formulierung für elastische Neutron-Deuteron Streuung findet sich in Refs. [31, 32].

6.1 Aufbruch-Übergangsamplitude

Im Fall der Streuung mit Aufbruch befinden sich drei freie Nukleonen im Endzustand. Prinzipiell können die Spinprojektionen aller drei Nukleonen im Endzustand vermessen werden. Dieser Endzustand

$$|\mathbf{p}_f \mathbf{q}_f \nu_0(m_f)\rangle = |\mathbf{p}_f \mathbf{q}_f \alpha\rangle |s_\alpha m_{s_\alpha} t_\alpha m_{t_\alpha}\rangle |s_\beta m_{s_\beta} t_\beta m_{t_\beta}\rangle |s_\gamma m_{s_\gamma} t_\gamma m_{t_\gamma}\rangle \quad (6.1)$$

steht zu den Aufbruchzuständen $|\phi_0(\mathbf{p}\mathbf{q})\nu_0\rangle$ und den Dreiteilchen-Basiszuständen $|pq\nu(Ij)\rangle_\alpha$ aus Gl. (2.2) in folgender Beziehung

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}_f \mathbf{q}_f \nu_0(m_f)\rangle &= \sum_{S_f M_{S_f} T_f M_{T_f}} |\phi_0(\mathbf{p}_f \mathbf{q}_f) \nu_0\rangle \langle s_\beta m_{s_\beta} s_\gamma m_{s_\gamma} | S_f M_{S_f} \rangle \langle t_\beta m_{t_\beta} t_\gamma m_{t_\gamma} | T_f M_{T_f} \rangle \\ &= \sum_{\mathcal{J} M_{\mathcal{J}} \mathcal{T} M_{\mathcal{T}} L_f M_{L_f} S_f M_{S_f} I_f M_{I_f} T_f M_{T_f} l_f m_{l_f} j_f m_{j_f}} |p_f q_f [(L_f S_f) I_f (l_f s_\alpha) j_f] \mathcal{J} M_{\mathcal{J}} (T_f t_\alpha) \mathcal{T} M_{\mathcal{T}} B b\rangle_\alpha \\ &\quad \times \langle I_f M_{I_f} j_f m_{j_f} | \mathcal{J} M_{\mathcal{J}} \rangle \langle L_f M_{L_f} S_f M_{S_f} | I_f M_{I_f} \rangle Y_{L_f M_{L_f}}^*(\hat{p}_f) \\ &\quad \times \langle s_\beta m_{s_\beta} s_\gamma m_{s_\gamma} | S_f M_{S_f} \rangle \langle l_f m_{l_f} s_\alpha m_{s_\alpha} | j_f m_{j_f} \rangle Y_{l_f m_{l_f}}^*(\hat{q}_f) \\ &\quad \times \langle T_f M_{T_f} t_\alpha m_{t_\alpha} | \mathcal{T} M_{\mathcal{T}} \rangle \langle t_\beta m_{t_\beta} t_\gamma m_{t_\gamma} | T_f M_{T_f} \rangle. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Für die Beschreibung von spingemittelten und spinabhängigen Wirkungsquerschnitten wird die *on-shell* Aufbruch-Übergangsamplitude $U_0(E_i + i0)$ somit in der Form

$$\begin{aligned} &\langle \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f \nu_0(m_f) | U_0(E_i + i0) | \phi_\alpha(\mathbf{q}_i) \nu_{\alpha i} \rangle \\ &= \sum_{S_f M_{S_f} T_f M_{T_f}} \langle s_\beta m_{s_\beta} s_\gamma m_{s_\gamma} | S_f M_{S_f} \rangle \langle t_\beta m_{t_\beta} t_\gamma m_{t_\gamma} | T_f M_{T_f} \rangle \langle \phi_0(\mathbf{p}_f \mathbf{q}_f) \nu_0 | U_0(E_i + i0) | \phi_\alpha(\mathbf{q}_i) \nu_{\alpha i} \rangle \\ &= \langle m_{s_\alpha} m_{s_\beta} m_{s_\gamma} | M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f) | M_{I_i} m_{s_i} \rangle \end{aligned} \quad (6.3)$$

benötigt. Der Relativimpuls \mathbf{q}_i des Anfangszustandes definiert die z -Achse. Die Abhängigkeit des Matrixelementes von den Spinprojektionen im Anfangs- und Endzustand wird in der Notation explizit gemacht. Die Natur des einlaufenden Nukleons und der auslaufenden Nukleonen ($\alpha\beta\gamma$) ist durch das Experiment fixiert.

6.2 Berechnung von Observablen

Wir beschreiben den differentiellen Wirkungsquerschnitt im Laborsystem. Das Deuteron befindet sich in Ruhe, das einfallende Nukleon hat dem Impuls $\mathbf{k}_{\alpha i}$. Der Wirkungsquerschnitt $d\sigma$ hat die allgemeine Gestalt

$$\begin{aligned} d\sigma_{i \rightarrow f} &= (2\pi)^2 |\langle m_{s_{\alpha f}} m_{s_{\beta f}} m_{s_{\gamma f}} | M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f) | M_{I_i} m_{s_i} \rangle|^2 \\ &\times \delta \left(\frac{\mathbf{k}_{\alpha f}^2}{2m_N} + \frac{\mathbf{k}_{\beta f}^2}{2m_N} + \frac{\mathbf{k}_{\gamma f}^2}{2m_N} - E_i - \frac{\mathbf{k}_{\alpha i}^2}{6m_N} \right) \delta(\mathbf{k}_{\alpha f} + \mathbf{k}_{\beta f} + \mathbf{k}_{\gamma f} - \mathbf{k}_{\alpha i}) \\ &\times d^3 k_{\alpha f} d^3 k_{\beta f} d^3 k_{\gamma f} \left(\frac{k_{\alpha i}}{m_N} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Die Impulse im Anfangs- und Endzustand unterliegen der Impuls- und Energieerhaltung. Aufgrund dieser Erhaltungsgrößen sind von den insgesamt neun Komponenten der Impulse \mathbf{k}_{α} , \mathbf{k}_{β} und \mathbf{k}_{γ} vier redundant. Streuwinkel werden in bezug zur Strahlrichtung $\mathbf{k}_{\alpha i}$ definiert. Die Energie im Schwerpunktsystem ist E_i , $k_{\alpha i}/m_N$ ist der einfallende Fluß im Laborsystem. Die Erhaltungssätze schränken die möglichen Werte der Energien $\mathbf{k}_{\beta f}^2/2m_N$ und $\mathbf{k}_{\gamma f}^2/2m_N$ der Nukleonen im Endzustand auf eine Ellipse ein. Anstelle der physikalisch gemessenen Energie $\mathbf{k}_{\beta f}^2/2m_N$ wird die Bogenlänge S entlang der Ellipse, definiert durch

$$S = \int_0^S dS \quad (6.5)$$

$$= \int_{0=S(k_{\beta f 0}, k_{\gamma f 0})}^{S=S(k_{\beta f}, k_{\gamma f})} dk_{\beta f} \frac{k_{\beta f}}{m_{\beta}} \sqrt{1 + \left(\frac{m_{\beta} k_{\gamma f} dk_{\gamma f}}{m_{\gamma} k_{\beta f} dk_{\beta f}} \right)^2}, \quad (6.6)$$

zur Charakterisierung des Endzustandes herangezogen. Der Anfangspunkt der Bogenlänge wird je nach der Kinematik unterschiedlich festgelegt. Der Wirkungsquerschnitt (6.4) bekommt damit die kompakte Form

$$d\sigma_{i \rightarrow f} = (2\pi)^2 |\langle m_{s_{\alpha f}} m_{s_{\beta f}} m_{s_{\gamma f}} | M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f) | M_{I_i} m_{s_i} \rangle|^2 \otimes \text{fps} dS d^2 \widehat{k}_{\beta f} d^2 \widehat{k}_{\gamma f} \quad (6.7)$$

mit der Abkürzung fps für den Phasenraumfaktor

$$\begin{aligned} \text{fps} &= (2\pi)^2 \frac{m_N}{k_{\alpha i}} \int d^3 k_{\alpha f} k_{\gamma f}^2 dk_{\gamma f} \delta \left(\frac{\mathbf{k}_{\alpha f}^2}{2m_N} + \frac{\mathbf{k}_{\beta f}^2}{2m_N} + \frac{\mathbf{k}_{\gamma f}^2}{2m_N} - E_i - \frac{\mathbf{k}_{\alpha i}^2}{6m_N} \right) \\ &\times \delta(\mathbf{k}_{\alpha f} + \mathbf{k}_{\beta f} + \mathbf{k}_{\gamma f} - \mathbf{k}_{\alpha i}) \left(\frac{k_{\beta f}^2 dk_{\beta f}}{dS} \right). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Die Matrixelemente der Streuamplitude $M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f)$ werden numerisch im Schwerpunktsystem berechnet. Die verfügbare Energie E_i ist $e_d + \mathbf{k}_{\alpha i}^2 / 3m_N$ und die Jacobi-Impulse sind

$$\mathbf{p}_f = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_{\beta f} - \mathbf{k}_{\gamma f}), \quad (6.9a)$$

$$\mathbf{q}_f = \frac{1}{3}(\mathbf{k}_{\beta f} + \mathbf{k}_{\gamma f}) - \frac{2}{3}\mathbf{k}_{\alpha i}. \quad (6.9b)$$

In den Beziehungen (6.9a) ist die Impulserhaltung bereits berücksichtigt, nicht jedoch die Energieerhaltung, die den Impulsbetrag $k_{\gamma f}$ durch die gemessenen unabhängigen Impulse festlegt.

Der spingemittelte fünffache differentielle Streuquerschnitt ist

$$\frac{\overline{d^5\sigma}}{dS d^2\widehat{k}_{\beta f} d^2\widehat{k}_{\gamma f}} = \frac{1}{6} \text{Tr} [M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f) M^+(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f)]. \quad (6.10)$$

Die Spinabhängigkeit des präparierten Anfangs- und vermessenen Endzustandes wird jeweils durch Dichtematrizen ρ zum Ausdruck gebracht. Sie sind Hermitesch $\rho^\dagger = \rho$ und normiert gemäß $\text{Tr} \rho = 1$. Die Dichtematrix ρ_i des präparierten Anfangszustandes ist das Tensorprodukt der Dichtematrizen von Nukleon und Deuteron ρ^n und ρ^d

$$\rho_i = \rho^n \otimes \rho^d. \quad (6.11)$$

Ihre individuelle Spinabhängigkeit wird von den Spin- $\frac{1}{2}$ Operatoren S^{a_2} und den Spin-1 Operatoren S^{a_3} getragen, deren explizite Form in Ref. [32] definiert wird. Wie in Ref. [32] führen wir auch das Tensorprodukt der Operatoren $\{S^{a_i}\} = \{S^{a_2} \otimes S^{a_3}\}$ ein. Sie sind normiert nach

$$\text{Tr} [S^{a_i} S^{b_i}] = 6 \delta_{a_i b_i} \quad (6.12)$$

Mit diesen Tensoroperatoren S^{a_i} schreiben wir die Dichtematrix des Anfangszustandes als

$$\rho_i = \frac{1}{6} \sum_{a_i} \text{Tr} [\rho_i S^{a_i}] S^{a_i}. \quad (6.13)$$

Die Dichtematrix ρ_f der vermessenen Endzustände ist ein Produkt der Dichtematrizen der drei Nukleonen

$$\rho_f = \rho^n \otimes \rho^n \otimes \rho^n. \quad (6.14)$$

Ihre jeweilige Spinabhängigkeit wird von den Spin- $\frac{1}{2}$ Operatoren S^{a_2} getragen. Die Menge der Tensoroperatoren $\{S^{a_f}\} = \{S^{a_2} \otimes S^{a_2} \otimes S^{a_2}\}$ wird gebildet mit der Normierungsbedingung

$$\text{Tr} [S^{a_f} S^{b_f}] = 8 \delta_{a_f b_f}. \quad (6.15)$$

Mit diesen Tensoroperatoren S^{a_f} schreiben wir die Dichtematrix des Endzustands als

$$\rho_f = \frac{1}{8} \sum_{a_f} \text{Tr} [\rho_f S^{a_f}] S^{a_f}. \quad (6.16)$$

Der spinabhängige differentielle Wirkungsquerschnitt läßt sich damit durch die Streuamplitude $M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f)$ und die Dichtematrizen ρ_i und ρ_f im Anfangs- und Endzustand ausdrücken

$$\frac{d^5\sigma}{dS d^2\widehat{k}_{\beta f} d^2\widehat{k}_{\gamma f}} = 8 \text{Tr} [M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f) \rho_i M(E_i \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f)^\dagger \rho_f] \text{fps}. \quad (6.17)$$

Der Faktor 8 trägt der Tatsache Rechnung, daß ρ_f nach $\text{Tr} \rho_f = 1$ normiert ist, während in dem Fall, in dem die ausgehenden Polarisationen nicht vermessen werden, über alle nicht beobachteten Spins summiert wird. Mit Hilfe der Beziehungen (6.10) und (6.15) nehmen die spinabhängigen Streuquerschnitte folgende endgültige Form an

$$\frac{d^5\sigma}{dS d^2\widehat{k}_{\beta f} d^2\widehat{k}_{\gamma f}} = \frac{\overline{d^5\sigma}}{dS d^2\widehat{k}_{\beta f} d^2\widehat{k}_{\gamma f}} 6 \sum_{a_i, a_f} \text{Tr} [\rho_i S^{a_i}] \text{Tr} [\rho_f S^{a_f}] \frac{\text{Tr} [M(E_i \widehat{\mathbf{p}}_f \widehat{\mathbf{q}}_f) S^{a_i} M^\dagger(E_i \widehat{\mathbf{p}}_f \widehat{\mathbf{q}}_f) S^{a_f}]}{\text{Tr} [M(E_i \widehat{\mathbf{p}}_f \widehat{\mathbf{q}}_f) M^\dagger(E_i \widehat{\mathbf{p}}_f \widehat{\mathbf{q}}_f)]}. \quad (6.18)$$

7

Resultate

7.1 Vergleich der Methoden

In diesem Kapitel zeigen wir Resultate für elastische Neutron-Deuteron Streuung, die mit der in der vorliegenden Arbeit entwickelten Methode der *Real-Axis Integration* gewonnen wurden. Wir vergleichen sie mit Resultaten, die aus Rechnungen mit der bekannten Technik der *Contour Deformation* stammen [32, 33]. Die Übereinstimmung der Ergebnisse demonstriert die Äquivalenz beider Methoden in Anwendung auf elastische Neutron-Deuteron Streuung. Eine Gegenüberstellung der Vor- und Nachteile beider Methoden findet sich in Kapitel 5.6.

7.1.1 Elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 10 MeV

In Tabelle 7.1 und Abb. 7.1 sind Resultate für elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 10 MeV Neutron Laborenergie zusammengestellt.

	<i>Real-Axis Integration</i>	<i>Contour Deformation</i>
$\sigma_{\text{elastic}}^{\text{Dublett}} \text{ (mb)}$	129.50	128.92
$\sigma_{\text{elastic}}^{\text{Quartett}} \text{ (mb)}$	770.55	771.37
$\sigma_{\text{elastic}} \text{ (mb)}$	900.05	900.29

Tabelle 7.1: Totale elastische Wirkungsquerschnitte für Neutron-Deuteron Streuung bei 10 MeV Neutron Laborenergie. Der totale elastische Wirkungsquerschnitt ist separat für die beiden möglichen Werte der Summe aus Neutron- und Deuteronspin im Anfangszustand, nämlich $\frac{1}{2}$ (Dublett) und $\frac{3}{2}$ (Quartett), aufgeführt.

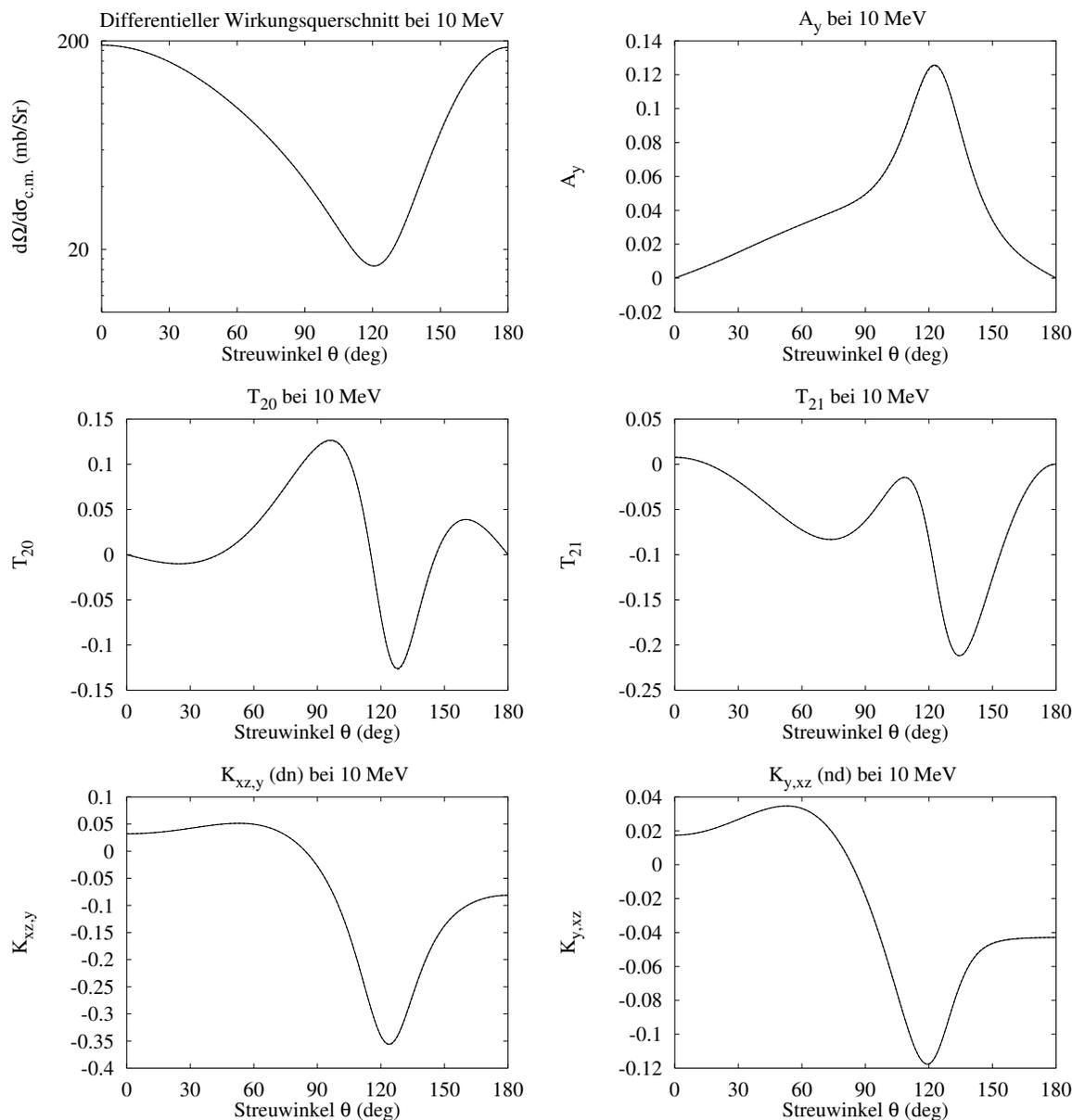


Abbildung 7.1: Vergleich der Methoden der *Real-Axis Integration* (durchgezogene Linien) und der *Contour Deformation* (gestrichelte Linien) für elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 10 MeV Neutron Laborenergie für das Potential mit Δ -Isobar Anregung. Zweinukleonen-Wechselwirkungen bis zu einem Paardrehimpuls $I = 2$ wurden berücksichtigt. Gezeigt ist eine repräsentative Auswahl an Observablen in Abhängigkeit von dem Streuwinkel $\theta_{c.m.}$ im Schwerpunktsystem. Die beiden zuletzt abgebildeten Observablen, der Spintransfer $K_y^{xx}(nd)$ vom Neutron auf das Deuteron und der Spinkorrelationskoeffizient $C_{x,xy}$, zeigen die schlechteste Übereinstimmung aller Observablen der betrachteten Energie.

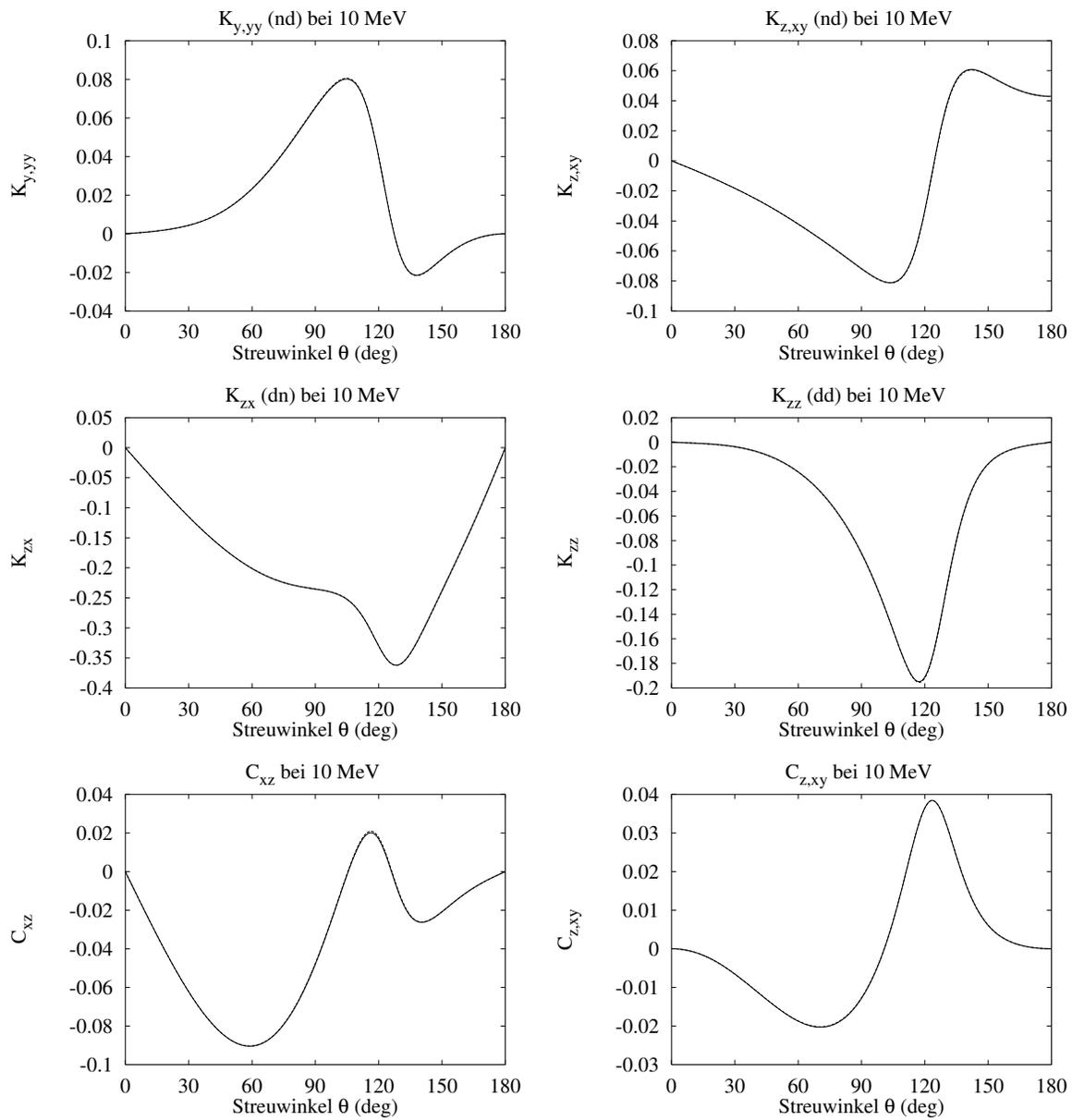


Abbildung 7.1: Fortsetzung.

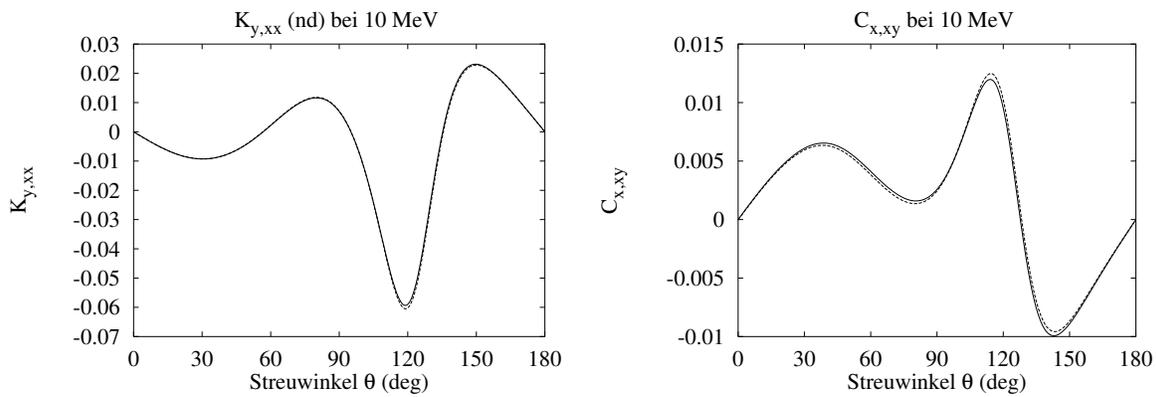


Abbildung 7.1: Fortsetzung.

7.1.2 Elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 67 MeV

In Tabelle 7.2 und Abb. 7.2 sind Resultate für elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 67 MeV Neutron Laborenergie zusammengestellt.

	<i>Real-Axis Integration</i>	<i>Contour Deformation</i>
$\sigma_{\text{elastic}}^{\text{Dublett}} (\text{mb})$	16.70	17.04
$\sigma_{\text{elastic}}^{\text{Quartett}} (\text{mb})$	49.92	49.88
$\sigma_{\text{elastic}} (\text{mb})$	66.62	66.92

Tabelle 7.2: Totale elastische Wirkungsquerschnitte für Neutron-Deuteron Streuung bei 67 MeV Neutron Laborenergie. Der totale elastische Wirkungsquerschnitt ist separat für die beiden möglichen Werte der Summe aus Neutron- und Deuteronspin im Anfangszustand, nämlich $\frac{1}{2}$ (Dublett) oder $\frac{3}{2}$ (Quartett), aufgeführt.

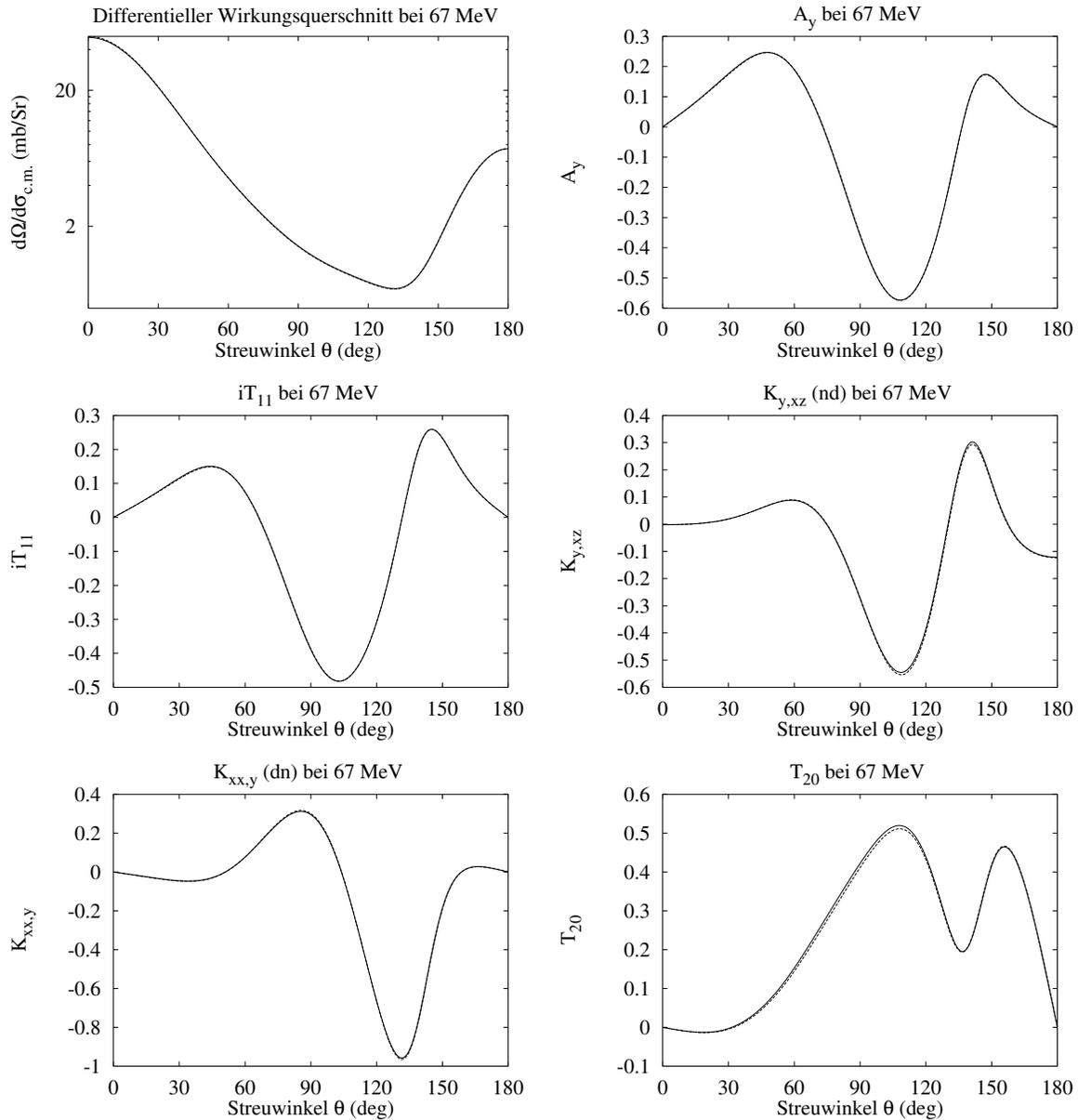


Abbildung 7.2: Vergleich der Methoden der *Real-Axis Integration* (durchgezogene Linien) und der *Contour Deformation* (gestrichelte Linien) für elastische Neutron-Deuteron Streuung bei 67 MeV Neutron Laborenergie für das Potential ohne Δ -Isobar Anregung. Zweinukleonen-Wechselwirkungen bis zu einem Paardrehimpuls $I = 3$ wurden berücksichtigt. Gezeigt ist eine repräsentative Auswahl an Observablen in Abhängigkeit von dem Streuwinkel $\theta_{c.m.}$ im Schwerpunktsystem. Die zuletzt abgebildete Observable, die Deuteron Tensor Analysierstärke T_{20} , zeigt die schlechteste Übereinstimmung aller untersuchten Observablen der betrachteten Energie.

7.2 Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch

Resultate für Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch sind für die ausgewählten Neutron Energien von 13 und 65 MeV im Laborsystem zusammengestellt. Alle Abbildungen enthalten Resultate für die Wechselwirkung mit Δ -Isobar (durchgezogene Kurven) und die rein nukleonische Wechselwirkung (gestrichelte Kurven). Die Rechnungen schließen Partialwellen bis zu einem Paardrehimpuls $I = 2$ ein. Aufgetragen sind spinabhängige und spinunabhängige Observable gegen den Bogenlängenparameter S . Die experimentellen Daten entstammen Refs. [39, 49, 50].

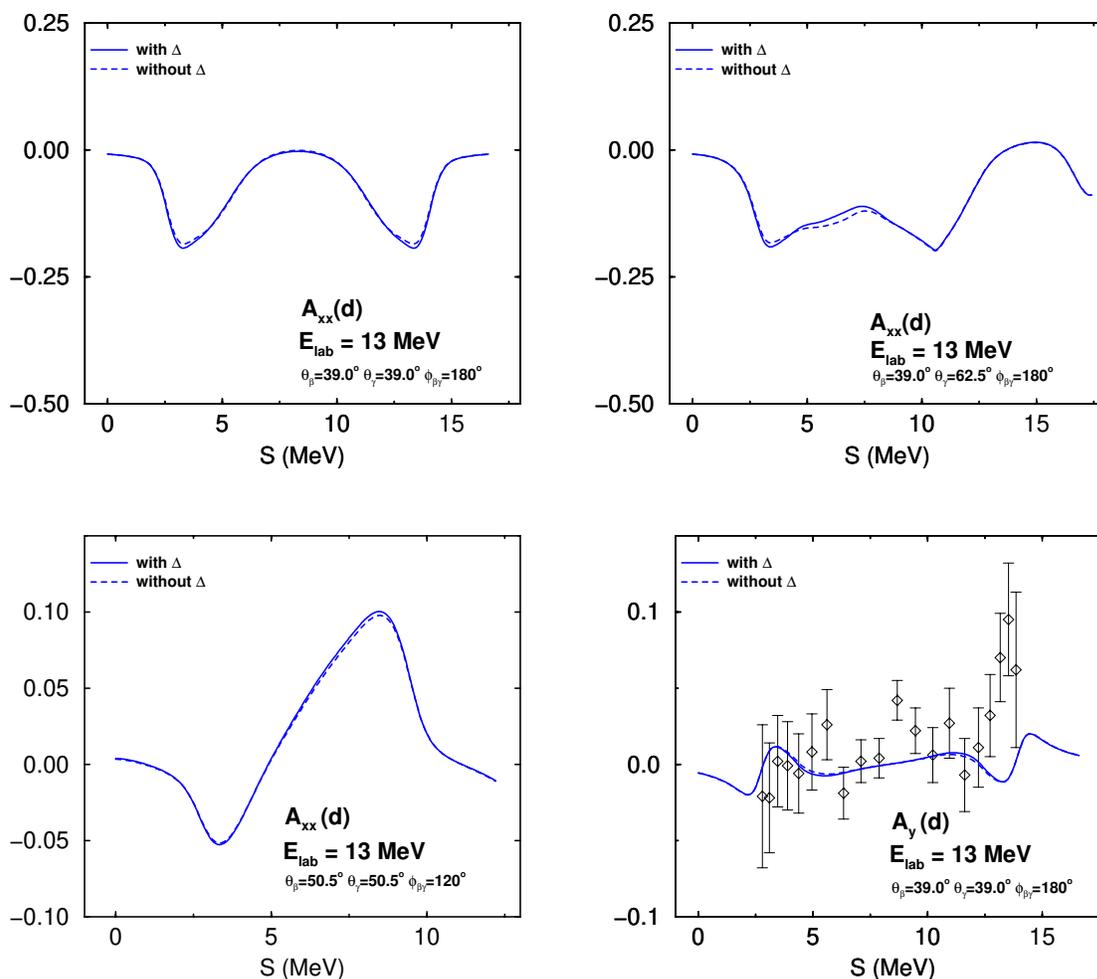


Abbildung 7.3: Spinabhängige Observable bei 13 MeV Neutron Laborenergie für unterschiedliche kinematische Konfigurationen in Abhängigkeit des Bogenlängenparameters S .

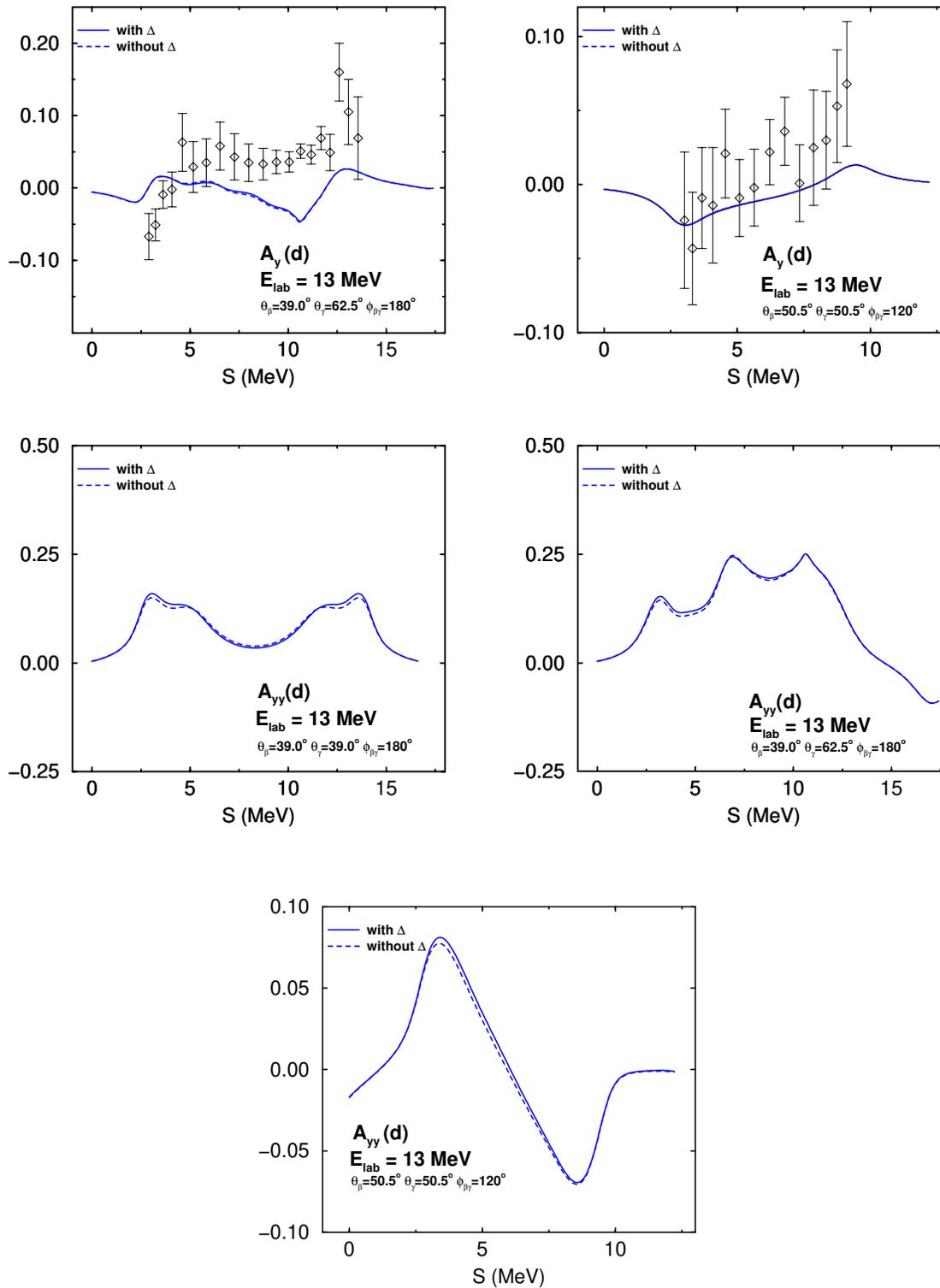


Abbildung 7.4: Fortsetzung.

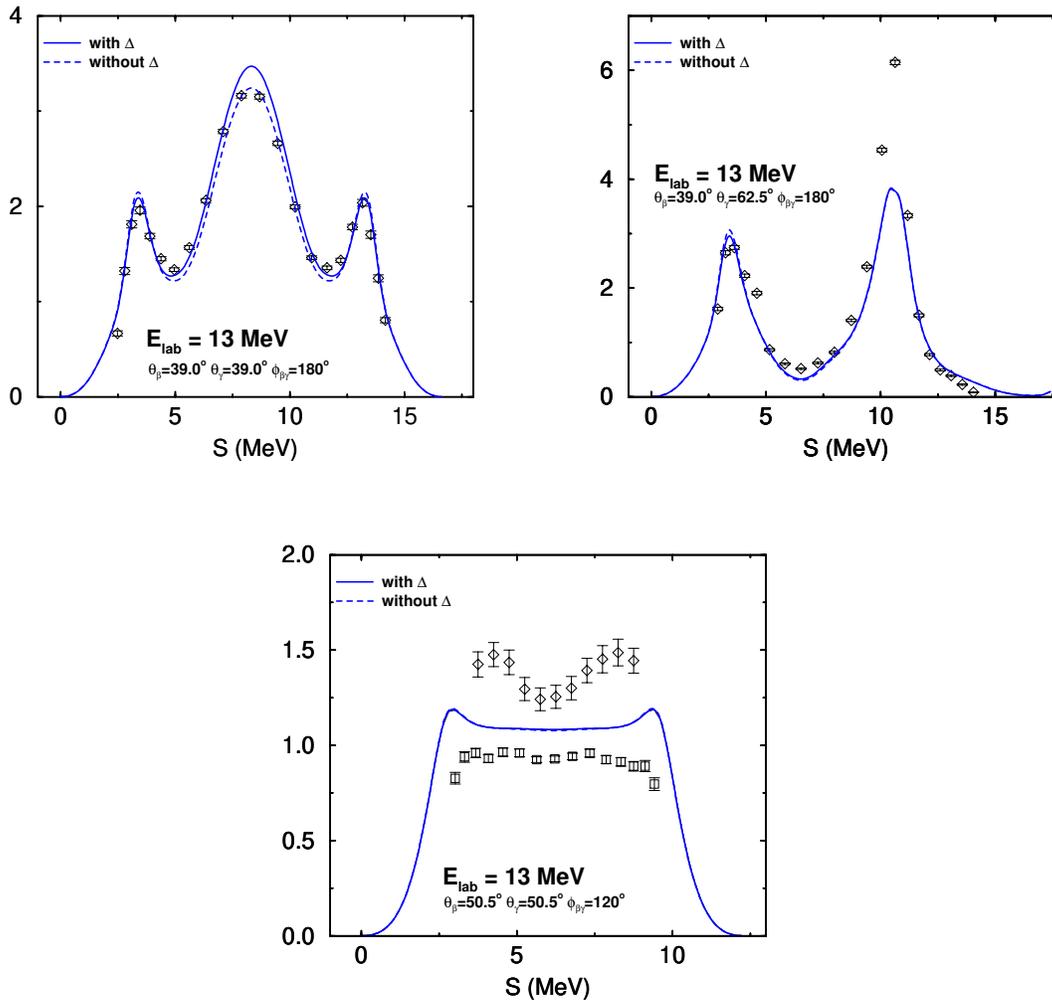


Abbildung 7.5: Differenzieller Wirkungsquerschnitt bei 13 MeV Neutron Laborenergie für unterschiedliche kinematische Konfigurationen in Abhängigkeit des Bogenlängenparameters S .

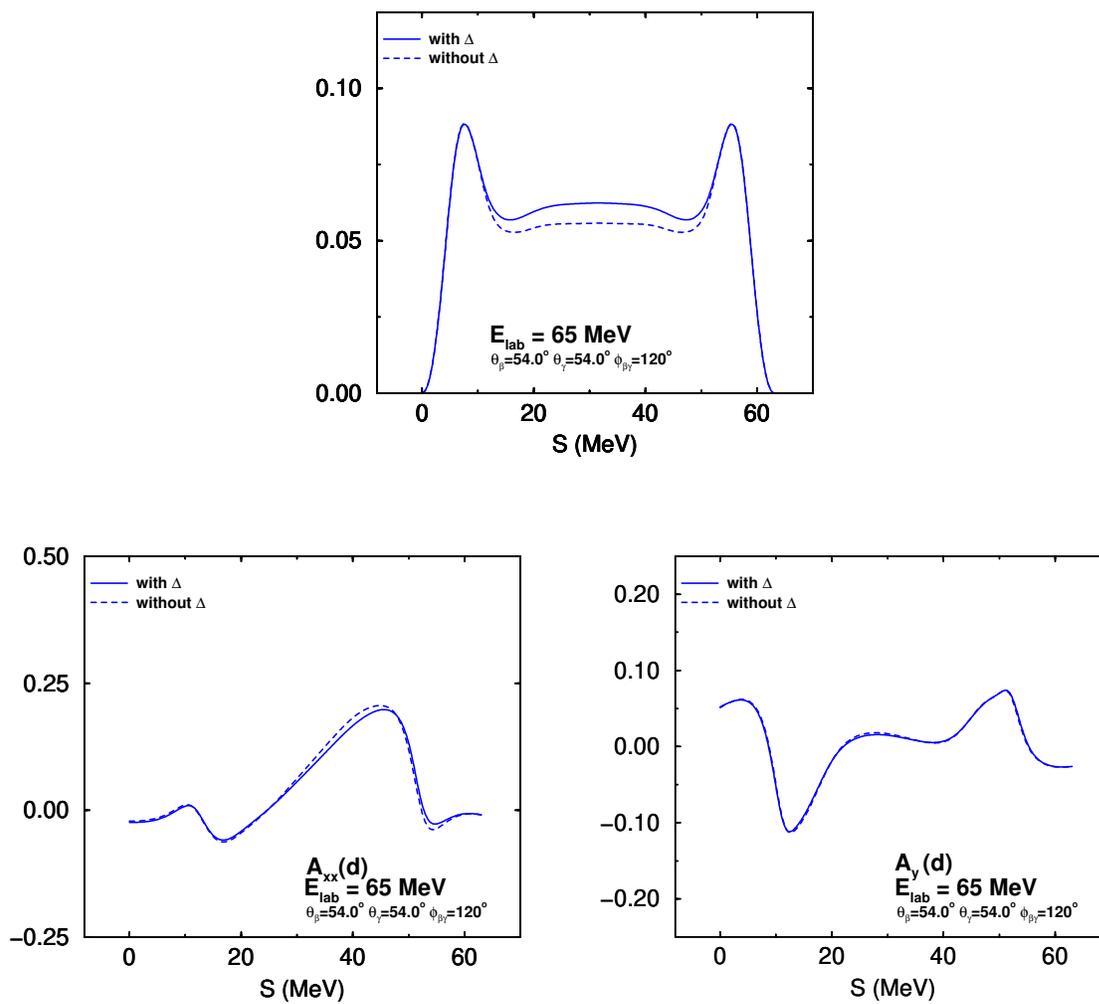


Abbildung 7.6: Aufbruchobservable bei 65 MeV Neutron Laborenergie für unterschiedliche kinematische Konfigurationen in Abhängigkeit des Bogenlängenparameters S .

8

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit hat Neutron-Deuteron Streuung untersucht. Als Baryon-Baryon Wechselwirkung wurde ein Kraftmodell mit expliziter Δ -Isobar Anregung zugrunde gelegt. Zur Lösung der AGS Gleichung wurde eine separable Entwicklung der Zweibaryonen-Übergangsmatrix durchgeführt und die resultierende Entwicklung einem Test im Zweinukleonen-Sektor unterzogen.

Als zentralen Punkt der Arbeit habe ich ein effizientes numerisches Verfahren zur Lösung der AGS Gleichung vorgestellt, das sich gleichermaßen zur Berechnung von elastischer Neutron-Deuteron Streuung und Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch eignet. Es basiert auf der Integration über reelle physikalische Impulse, es ist die Methode der *Real-Axis Integration*. Bei dem Entwurf des Verfahrens stand seine Eignung für Potentiale mit vielen Partialwellen und hohem Rang in der separablen Entwicklung der Wechselwirkung, d. h. für aufwendige Rechnungen, im Vordergrund. Gleichbedeutend mit diesem Anspruch war das Bemühen, die AGS Integralgleichung mit einer möglichst geringen Anzahl an Stützstellen zu lösen. Zu der Verwirklichung dieses Zieles führte kein direkter Weg. Vielmehr spiegelt sich in den einzelnen Aspekten des numerischen Verfahrens letztlich die Erfahrung wider, die ich bei der Erprobung unterschiedlicher Ansätze zur Behandlung der Singularitäten gewonnen habe.

Zum Erweis der Tauglichkeit der *Real-Axis Integration* wurde für die elastische Neutron-Deuteron Streuung die Äquivalenz des beschriebenen Verfahrens zu der etablierten Methode der *Contour Deformation* demonstriert. Die praktischen Vorteile der vorgeschlagenen Methode wurden hervorgehoben.

In Anwendung auf Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch wurden Resultate für das rein nukleonische Paris Potential sowie das Potential mit Δ -Isobar Anregung gezeigt. In den bisher betrachteten Observablen niedriger Energie trat kein nennenswerter Einfluß des Δ -Isobars auf. Wir erwarten, daß das Δ -Isobar und die von ihm vermittelte Dreinukleonenkraft für die Beschreibung von Observablen höherer Energie wichtig wird. Diese Erwartung wird partiell durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt bei 65 MeV eingelöst. Allerdings ist aufgrund der Beschränkung in der Anzahl der berücksichtigten Partialwellen zu diesem Punkt noch kein abschließendes Urteil möglich. Gemessen an der Fülle von Observablen der Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch, die sich hinsichtlich der kinematischen Konfiguration unterscheiden, konnte lediglich eine kleine Auswahl präsentiert werden. Sie diente vor allem als Demonstration der Funktionsfähigkeit des numerischen Apparates. Eine eingehendere Untersuchung von Aufbruchobservablen bleibt zukünftigen Projekten vorbehalten.

Mit der Möglichkeit zur verlässlichen Berechnung von Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch eröffnen sich vielfältige Anwendungsgebiete. Darunter sind auch Prozesse wie inelastische Elektronenstreuung am gebundenen Dreinukleonen-System zu zählen. Neben dem Operator des elektromagnetischen bzw. schwachen Stroms ist für die Berechnung der entsprechenden Matrixelemente des Zweikörper-Aufbruchs die Kenntnis der hadronischen *half-shell* Übergangsamplitude notwendig. Auf diese Weise ist die Neutron-Deuteron Streuung mit Aufbruch ein notwendiger Schritt zur Einbeziehung von Endzustandswechselwirkungen in die Untersuchungen zur Elektronenstreuung am Dreinukleonen-System.

A

Spline Interpolation

Die iterative Lösung der AGS Gleichung gemäß der *Real-Axis Integration* benötigt in jedem Iterationsschritt eine Interpolation des iterierten Vektors bezüglich des Impulses. Aufgrund der Vielzahl der anfallenden Interpolationen verbraucht dieser Rechenschritt einen Großteil der Gesamtrechnenzeit für die Iteration. Herkömmliche Interpolationsroutinen, wie sie beispielsweise in der NAG Bibliothek bereitgestellt werden, sind aus Effizienzgründen ungeeignet. In diesem Kapitel entwickeln wir ein alternatives, effektives Interpolationsverfahren, das zur Berechnung eines Interpolationswertes lediglich eine Matrixmultiplikation sowie eine Polynomauswertung verlangt.

A.1 Kubische Spline Funktionen

Eine Funktion $S(x) : [x_0, x_n] \subset \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ heißt *kubisches Spline* für die Partition $\{x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_{n-1} \leq x_n\}$, wenn sie (a) eine stetige zweite Ableitung besitzt und (b) auf jedem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ mit einem Polynom dritten Grades übereinstimmt. Spline Funktionen besitzen im Hinblick auf die Interpolation sehr günstige Eigenschaften [9].

Nach Definition ist die kubische Spline Funktion $S(x)$ in jedem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ von der Form

$$S_i(x) := S(x) | [x_i, x_{i+1}] = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \quad (\text{A.1})$$

mit Koeffizienten a_i, b_i, c_i und d_i . $S_i(x)$ bezeichnet die Restriktion von $S(x)$ auf das Intervall $[x_i, x_{i+1}]$. Wir konstruieren jetzt die Spline Funktion $S(x)$ als Interpolant einer gegebenen Funktion $f(x)$ zu der Partition $\{x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n\}$, d. h. wir verlangen

$$S(x_i) = f(x_i) \quad (\text{A.2})$$

und fragen nach dem Zusammenhang der Koeffizienten a_i, b_i, c_i und d_i mit der Funktion $f(x)$. Gleichung (A.2) liefert für $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, n-1$

$$S_i(x_i) = f(x_i) \Rightarrow a_i = f(x_i) \quad (\text{A.3})$$

$$S_i(x_{i+1}) = f(x_{i+1}) \Rightarrow \quad (\text{A.4})$$
$$a_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 = f(x_{i+1}).$$

Darüber hinaus gelten an den inneren Intervallpunkten $x_i, i = 1, \dots, n-1$ die Anschlußbedingungen

$$S'_{i-1}(x_i) = S'_i(x_i) \Rightarrow b_{i-1} + 2c_{i-1}(x_i - x_{i-1}) + 3d_{i-1}(x_i - x_{i-1})^2 = b_i \quad (\text{A.5})$$

$$S''_{i-1}(x_i) = S''_i(x_i) \Rightarrow 2c_{i-1} + 6d_{i-1}(x_i - x_{i-1}) = c_i. \quad (\text{A.6})$$

Die Gln. (A.3)–(A.6) stellen ein System von $4 \times (n-1) + 2 = 4n - 2$ linearen Gleichungen für die $4n$ Koeffizienten $\{a_i, b_i, c_i, d_i\}$ dar. Aus diesem Grund können wir das Gleichungssystem durch zwei weitere beliebige Bedingungen ergänzen, um die Koeffizienten eindeutig zu bestimmen. Wir treffen zunächst die Wahl, die der sogenannten *natürlichen Spline Funktion** entspricht, und besagt, daß die zweiten Ableitungen der Spline Funktionen an den Randpunkten x_0 und x_n verschwinden:

$$S''_0(x_0) = 0 \quad \text{and} \quad S''_{n-1}(x_n) = 0. \quad (\text{A.7})$$

Daraus ergibt sich $c_0 = 0$ und $2c_{n-1} + 6d_{n-1}(x_n - x_{n-1}) = 0$. Andere Randbedingungen werden wir später diskutieren.

A.2 Bestimmung der Koeffizienten

Zunächst bringen wir die Gln. (A.5)–(A.6) in übersichtliche Matrixform. Dazu führen wir die Abkürzungen $h_i := x_{i+1} - x_i, i = 0, \dots, n-1$ für die Intervalllängen ein und bringen nur Terme, die die Funktionswerte $f(x_i)$ enthalten, auf die rechte Seite. Für $i \neq n-1$ bekommen wir

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & h_i & h_i^2 & h_i^3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2h_i & 3h_i^2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 6h_i & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}}_{=: M_i} \underbrace{\begin{pmatrix} a_i \\ b_i \\ c_i \\ d_i \\ a_{i+1} \\ b_{i+1} \\ c_{i+1} \\ d_{i+1} \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{v}_i} = \underbrace{\begin{pmatrix} f(x_i) \\ f(x_{i+1}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{f}_i}. \quad (\text{A.8})$$

Wir haben die Abkürzungen M_i für die Matrix und \mathbf{v}_i für den Vektor, aufgebaut aus den Koeffizienten, auf der linken Seite sowie \mathbf{f}_i für den Vektor auf der rechten Seite eingeführt. Damit läßt sich Gl. (A.8) einfach als $M_i \mathbf{v}_i = \mathbf{f}_i$ schreiben.

Gleichung (A.8) enthält noch nicht die in Gl. (A.7) gegebenen Randbedingungen. Gleichfalls sind die Gln. (A.3)–(A.4) für $i = n-1$ noch nicht benutzt worden. Wie kombinieren diese

*Die natürliche Spline Funktion beschreibt die Lage, die ein in den Punkten $(\bar{x}_i, S(x_i)), i = 0, \dots, n$ fixierter Metallstreifen einnimmt.

zu einer weiteren Matrixgleichung

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & h_{n-1} & h_{n-1}^2 & h_{n-1}^3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 6h_{n-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=: M_{n-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \\ c_{n-1} \\ d_{n-1} \\ a_0 \\ b_0 \\ c_0 \\ d_0 \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{v}_{n-1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} f(x_{n-1}) \\ f(x_n) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{f}_{n-1}}. \quad (\text{A.9})$$

In einer abgekürzten Schreibweise, analog zu der nach Gl. (A.8) gebrauchten, kann dies als $M_{n-1}\mathbf{v}_{n-1} = \mathbf{f}_{n-1}$ geschrieben werden.

Die linearen Gln. (A.8)–(A.9) legen zusammen die Koeffizienten $\{a_i, b_i, c_i, d_i\}$ eindeutig fest. Um die Struktur dieser Gleichungen herauszustellen vereinen wir sie in einer einzigen Matrixgleichung, wobei wir zunächst Gl. (A.9) vor Gl. (A.8) verarbeiten

$$M \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{n-1} \\ \mathbf{v}_0 \\ \mathbf{v}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{n-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{n-1} \\ \mathbf{f}_0 \\ \mathbf{f}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{n-2} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Die Matrix M hat folgende Blockdiagonalstruktur

$$M = \begin{pmatrix} M_{n-1} & & & & \\ & M_0 & & & \\ & & M_1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & M_{n-2} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Gemäß der Gln. (A.8)–(A.9) ist jeder Block M_i eine 4×8 Matrix.[†] Die numerische Lösung eines solchen linearen Systems stellt kein Problem dar. Als wichtige Schlußfolgerung halten wir fest, daß die Koeffizienten in linearer Form von den Funktionswerten $f(x_i)$ abhängen. Tatsächlich haben wir

$$\mathbf{v} = M^{-1}\mathbf{f}. \quad (\text{A.12})$$

Diese Gleichung läßt sich noch vereinfachen, da der Vektor \mathbf{f} nur $n+1$ von Null verschiedene Elemente besitzt. Unter Streichung irrelevanter Einträge kann man mit einer neuen Matrix A schreiben

$$\mathbf{v} = A \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

[†]Dabei werden aufgrund der zyklischen Anordnung die Spalten 5-8 der Matrix M_{n-2} in den Spalten 1-4 der Matrix M untergebracht.

Weiterhin hängen die Matrizen M und damit auch A ausschließlich von den Stützstellen $\{x_i\}$ ab. Bei bekanntem A läßt sich die Interpolation einer zweiten Funktion $g(x)$, gegeben an denselben Stützstellen $\{x_i\}$, leicht bewerkstelligen. Es sind lediglich die zu $g(x)$ gehörenden Koeffizienten auf dem Weg einer einfachen Matrixmultiplikation

$$\mathbf{v}' = A \begin{pmatrix} g(x_0) \\ g(x_1) \\ g(x_2) \\ \vdots \\ g(x_n) \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

zu berechnen. An dieser Stelle haben wir angenommen, daß nach obigem Beispiel die Koeffizienten $\{a'_i, b'_i, c'_i, d'_i\}$, $i = 0, \dots, n-1$ der kubischen Spline Funktion zu g zu einem neuen Vektor \mathbf{v}' zusammengestellt wurden.

Die lineare Abhängigkeit der Koeffizienten von den Funktionswerten wurde bereits in Ref. [15] bemerkt. Allerdings findet sich dort kein Hinweis auf den einfachen Zusammenhang (A.13), vielmehr wird nur ein Verfahren angegeben, die Koeffizienten über mehrere rekursiv definierte Größen zu berechnen.

A.3 Wahl der Randbedingungen

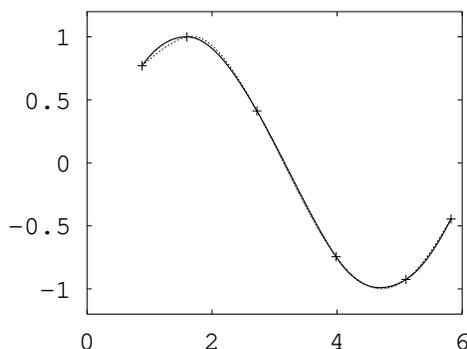


Abbildung A.1: Einfluß unterschiedlicher Randbedingungen auf die Qualität der Spline Approximation.

In diesem Abschnitt wollen wir kurz die Frage nach möglichen Randbedingungen streifen. Die Wahl der natürlichen Spline Funktion hat—im Gegensatz zu ihrem Namen—den Nachteil, willkürlich die zweiten Ableitungen an den Endpunkten zu fixieren. Diese Vorschrift läßt damit die Eigenschaften der zu interpolierenden Funktion vollständig außer acht. Eine weitaus befriedigendere Wahl ist durch die Forderung nach Stetigkeit der dritten Ableitungen der Spline Funktion $S(x)$ in den Punkten x_1 und x_{n-1} gegeben.

$$S_0'''(x_1) = S_1'''(x_1) \quad \text{and} \quad S_{n-2}'''(x_{n-1}) = S_{n-1}'''(x_{n-1}). \quad (\text{A.15})$$

Abbildung A.1 zeigt den Einfluß der unterschiedlichen Randbedingungen auf die Güte der Approximation. Während die natürliche Spline Funktion (gepunktete Linie) in den Rand-

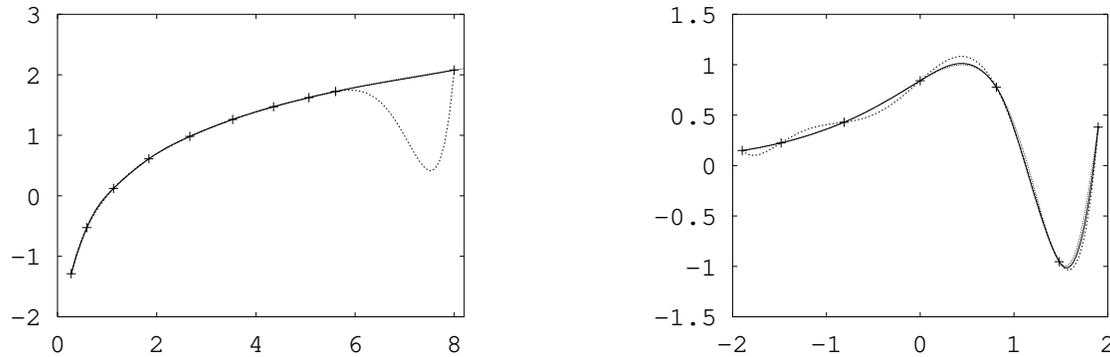


Abbildung A.2: Vergleich zwischen der kubischen Spline Interpolation (gestrichelte Kurve) und Polynom Interpolation (gepunktete Kurve).

zonen des Intervalls sichtbar von der vorgegebenen Sinus Funktion (ausgezogene Linie) abweicht, ist eine solche Abweichung zwischen der Sinus Funktion und der Spline Funktion mit den Randbedingungen nach Gl. (A.15) (gestrichelte Linie) nicht auszumachen. Es ist bemerkenswert, daß die bereits erwähnte Ref. [15] dennoch die Randbedingungen der natürlichen Spline Funktion wählt.

A.4 Vergleich zur Polynom Interpolation

Abbildung A.2 stellt für zwei gewählte Kurven die Spline Interpolation der Polynom Interpolation gegenüber. In beiden Fällen wird die Ausgangskurve (durchgezogen gezeichnet) durch die Spline Interpolation wesentlich glatter wiedergegeben als durch die Polynom Interpolation (gepunktete Kurve).

B

Padé Approximation

Wie in Kapitel 3.2 gezeigt wurde, führt die AGS Gleichung auf ein lineares Gleichungssystem. Als solches kann es prinzipiell mit Hilfe bekannter numerischer Verfahren gelöst werden. Die Anzahl der benötigten Rechenoperationen steigt dabei allerdings mit der dritten Potenz der Dimension N des Gleichungssystems an [17]. Damit überschreitet der Bedarf an Rechenzeit selbst auf Höchstleistungsrechnern ein realistisches Maß. Dieses Kapitel erörtert die Padé Approximation als Alternative zur direkten Lösung des linearen Gleichungssystems. Ihre Attraktivität verdankt die Padé Approximation dem Umstand, daß die Anzahl der Rechenoperationen nur quadratisch mit der Dimension N des Gleichungssystems steigt.

B.1 Einführung

Die AGS Gleichung (3.16b) läßt sich vereinfacht in der Gestalt

$$\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{K}\mathbf{x} \quad (\text{B.1})$$

schreiben. Dabei bedeutet die Matrix \mathbf{K} den Kern der Integralgleichung. Gleichung (B.1) hat folgende symbolische Lösung:

$$(1 - \mathbf{K})\mathbf{x} = \mathbf{y} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x} = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{K}^k \mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{K}\mathbf{y} + \mathbf{K}^2\mathbf{y} + \dots \quad (\text{B.2})$$

Im allgemeinen ist die Entwicklung (B.2), die Neumannsche Reihe, nicht konvergent. Wir führen deshalb für den Kern \mathbf{K} einen Stärkefaktor λ ein,

$$\mathbf{K} \rightarrow \lambda\mathbf{K}, \quad (\text{B.3})$$

und bekommen einen von λ abhängigen Lösungsvektor $\mathbf{x}(\lambda)$

$$\mathbf{x}(\lambda) = \mathbf{y} + (\mathbf{K}\mathbf{y})\lambda + (\mathbf{K}^2\mathbf{y})\lambda^2 + \dots \quad (\text{B.4})$$

Die gewünschte Lösung ergibt sich für den Stärkefaktor $\lambda = 1$, d. h. $\mathbf{x} = \mathbf{x}(1)$. Die Klammerung in Gl. (B.4) unterstreicht den Charakter als Potenzreihe in λ .

B.2 Padé Approximanten

Bei der Padé Approximation nimmt man an, daß der Lösungsvektor $\mathbf{x}(\lambda)$ eine analytische Funktion in λ ist und approximiert $\mathbf{x}(\lambda)$ durch rationale Funktionen in λ , die sogenannten

Padé Approximanten. Schließlich wertet man die Padé Approximanten an der Stelle $\lambda = 1$ aus. Dies ist möglich, da das Definitionsgebiet der Padé Approximanten nicht auf den Konvergenzkreis der Taylorreihe (B.2) beschränkt ist.

Zur Vereinfachung der Diskussion werden wir im folgenden jedoch nicht von dem Vektor $\mathbf{x}(\lambda)$ sondern von einer skalaren Funktion $f(\lambda)$ ausgehen. Alle daran gewonnenen Erkenntnisse können mittels komponentenweiser Verallgemeinerung unmittelbar auf die $x_k(\lambda)$ übertragen werden. Die Funktion $f(\lambda)$ selbst sei eine im Ursprung analytische Funktion mit der Taylorentwicklung $f(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \lambda^k$, die an die Stelle der Neumannschen Reihe (B.2) tritt.

Die Padé Approximanten an $f(\lambda)$ schreiben wir in der Form

$$[L/M] = \frac{P_L(\lambda)}{Q_M(\lambda)} \quad (\text{B.5})$$

mit Polynomen $P_L(\lambda)$ und $Q_M(\lambda)$ von höchstens L -ter beziehungsweise M -ter Ordnung. An $Q_M(\lambda)$ stellen wir die Normierungsbedingung $Q_M(0) = 1$, die immer durch etwaiges Kürzen erfüllt werden kann. Weiterhin verlangen wir, daß $P_L(\lambda)$ und $Q_M(\lambda)$ teilerfremd sind. Unter diesen Bedingungen ist der $[L/M]$ Approximant an $f(\lambda)$ eindeutig bestimmt [4].

Die formale Reihe

$$f(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \lambda^k \quad (\text{B.6})$$

bestimmt die Koeffizienten von $P_L(\lambda)$ und $Q_M(\lambda)$ gemäß

$$f(\lambda) - \frac{P_L(\lambda)}{Q_M(\lambda)} = O(L+M+1), \quad (\text{B.7})$$

das heißt der $[L/M]$ Approximant stimmt mit $f(\lambda)$ bis zur Ordnung $L+M$ in λ überein. Wir führen $f^{(n)}(\lambda)$ als das Polynom der Ordnung n ein, das der Taylorreihe (B.6) von $f(\lambda)$ bis zur Ordnung n entspricht, also $f^{(n)}(\lambda) := \sum_{k=0}^n a_k \lambda^k$. Damit wird aus Gl. (B.7)

$$f^{(L+M)}(\lambda) = \frac{P_L(\lambda)}{Q_M(\lambda)}. \quad (\text{B.8})$$

Koeffizientenvergleich in Gl. (B.8) führt auf ein lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten des Padé Approximanten. Aus mathematischer Sicht ist das Problem der Berechnung des Padé Approximanten $[L/M]$ aus den Koeffizienten a_k der Taylorreihe zu $f(\lambda)$ damit gelöst. Die numerische Lösung des entstehenden Gleichungssystems hingegen bereitet Schwierigkeiten [4, 38]. In der Praxis wähle ich aus diesem Grund den Umweg über Kettenbrüche, die wir im nächsten Abschnitt untersuchen.

B.3 Beziehung der Padé Approximanten zu Kettenbrüchen

Wir setzen die Entwicklung der Funktion $f(\lambda)$ in einen Kettenbruch in der Form

$$f(\lambda) = \frac{\alpha_0}{1 + \frac{\alpha_1 \lambda}{1 + \frac{\alpha_2 \lambda}{1 + \frac{\alpha_3 \lambda}{1 + \ddots}}}} \quad (\text{B.9})$$

mit Koeffizienten α_k an [4, 11, 14], die wir aus den Koeffizienten a_k der Taylorreihe (B.6) berechnen wollen. Dazu transformieren wir $f(\lambda)$ wie folgt:

$$\begin{aligned}
f(\lambda) &= a_0 + a_1\lambda + a_2\lambda^2 + a_3\lambda^3 + \dots \\
&= a_0 \left(1 + \frac{a_1}{a_0}\lambda + \frac{a_2}{a_0}\lambda^2 + \frac{a_3}{a_0}\lambda^3 + \dots \right) \\
&= \frac{a_0}{1 + \frac{1}{\left(1 + \frac{a_1}{a_0}\lambda + \frac{a_2}{a_0}\lambda^2 + \frac{a_3}{a_0}\lambda^3 + \dots\right)} - 1} \\
&= \frac{a_0}{1 + \frac{-\frac{a_1}{a_0}\lambda \left(1 + \frac{a_2}{a_1}\lambda + \frac{a_3}{a_1}\lambda^2 + \frac{a_4}{a_1}\lambda^3 + \dots\right)}{\left(1 + \frac{a_1}{a_0}\lambda + \frac{a_2}{a_0}\lambda^2 + \frac{a_3}{a_0}\lambda^3 + \dots\right)}} \tag{B.10} \\
&= \frac{a_0}{1 + \frac{-\frac{a_1}{a_0}\lambda}{\frac{\left(1 + \frac{a_1}{a_0}\lambda + \frac{a_2}{a_0}\lambda^2 + \frac{a_3}{a_0}\lambda^3 + \dots\right)}{\left(1 + \frac{a_2}{a_1}\lambda + \frac{a_3}{a_1}\lambda^2 + \frac{a_4}{a_1}\lambda^3 + \dots\right)}}}.
\end{aligned}$$

Dieser Prozeß kann iteriert werden und liefert sukzessiv die Koeffizienten α_k des zu $f(\lambda)$ gehörigen Kettenbruchs. Die vorgeführte Transformation (B.10) wird Viskovatov zugeschrieben [11]. Das skizzierte Verfahren (B.10) fasse ich zu einer rekursiven Vorschrift zusammen. Mit den Definitionen

$$p_i^{(-1)} := \begin{cases} 1 & \text{für } i = 0, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{und} \quad p_i^{(0)} := a_i \tag{B.11}$$

führt folgende Rekursion auf die gesuchten Koeffizienten α_k ,

$$\alpha_k = p_i^{(k)}, \quad i = \min\{j \mid p_j^{(k)} \neq 0\} \tag{B.12a}$$

$$p_i^{(n)} = \frac{p_i^{(n-2)}}{\alpha_{n-2}} - \frac{p_i^{(n-1)}}{\alpha_{n-1}}, \quad \forall i \wedge n \geq 1. \tag{B.12b}$$

Aus den Koeffizienten α_k lassen sich schließlich die Padé Approximanten ebenfalls rekursiv berechnen. Und zwar bekommt man mit Polynomen $P^{(k)}(\lambda)$ und $Q^{(k)}(\lambda)$ —nicht zu verwechseln mit den Polynomen $P_L(\lambda)$ und $Q_M(\lambda)$ aus Gl. (B.5)—und den Startwerten

$$P^{(-1)}(\lambda) = 1, \quad Q^{(-1)}(\lambda) = 0, \tag{B.13a}$$

$$P^{(0)}(\lambda) = a_0, \quad Q^{(0)}(\lambda) = 1, \tag{B.13b}$$

sowie den Rekursionsbeziehungen

$$P^{(n)}(\lambda) = P^{(n-1)}(\lambda) + \alpha_n \lambda P^{(n-2)}(\lambda) \tag{B.14a}$$

$$Q^{(n)}(\lambda) = Q^{(n-1)}(\lambda) + \alpha_n \lambda Q^{(n-2)}(\lambda) \tag{B.14b}$$

Padé Approximanten zu $f(\lambda)$ der Form

$$\frac{P^{(k)}(\lambda)}{Q^{(k)}(\lambda)}. \quad (\text{B.15})$$

Die Rekursionsbeziehung (B.14) wurde von Wallis bereits im Jahr 1655 angegeben. Man kann zeigen [4], daß die gegen die Funktion $f(\lambda)$ strebende Folge der $P^{(k)}(\lambda)/Q^{(k)}(\lambda)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, Padé Approximanten $[L/M]$ der Ordnungen $[0/0]$, $[1/0]$, $[1/1]$, $[2/1]$, $[2/2]$, ... entspricht.

Die Padé Approximanten in Gl. (B.15) sind die gesuchte Lösung. Ihre Berechnung nach der vorgestellten Methode birgt folgende Vorteile im Hinblick auf die Numerik. Wie bereits dargelegt, vermeidet die rekursive Berechnung numerische Schwierigkeiten bei der direkten Lösung des linearen Gleichungssystems. Weiterhin möchte man in der Praxis die Funktion $f(\lambda)$ mit einer vorgegebenen Genauigkeit approximieren. Es ist jedoch im vorhinein nicht klar ab welcher Ordnung k in den Padé Approximanten dies erreicht wird. Die rekursive Berechnung gestattet, für jeden Iterationsschritt k den Abstand

$$d_{(k,k-1)}(\lambda) := \left\| \frac{P^{(k)}(\lambda)}{Q^{(k)}(\lambda)} - \frac{P^{(k-1)}(\lambda)}{Q^{(k-1)}(\lambda)} \right\| \quad (\text{B.16})$$

der Approximanten zweier aufeinanderfolgender Ordnungen $k-1$, k zu berechnen und als Abbruchkriterium für die Padé Approximation zu verwenden. In bezug auf die Lösung der AGS Gleichung mit Hilfe der Padé Approximation erleichtert dieser vom Algorithmus selbstgesteuerte Abbruch der Iteration die praktische Rechnung wesentlich. Die benötigte Anzahl der Iterationen variiert nämlich, der physikalischen Intuition entsprechend, je nach Gesamtenergie und Gesamtdrehimpuls des Dreiteilchensystems. Darüber hinaus hängt diese Anzahl auch schwach von der verwandten Zweiteilchenwechselwirkung ab. Die Verwendung eines auf dem Abstand $d_{(k,k-1)}(\lambda)$ beruhenden Abbruchkriteriums für die Padé Iteration stellt sicher, daß die gewünschte Genauigkeit immer mit einer minimalen Anzahl von Iterationen erreicht wird.

B.4 Beispiel zur Padé Approximation

Als Beispiel für die Padé Approximation betrachten wir die Funktion $\arctan(x)$. Es ist bekannt [11, 38], daß ihre Taylor Entwicklung

$$\arctan(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} \quad (\text{B.17})$$

bedingt durch die alternierenden Vorzeichen sehr langsam konvergiert. In einem solchen Fall kann man sich der Padé Approximation als Konvergenzbeschleuniger bedienen wie Abb. B.1 darlegt. Dort wird die $\arctan(x)$ -Funktion mit den Padé Approximanten und der Taylorreihe (B.17) bis zur 3. bzw. 7. Ordnung verglichen. Für Argumente $x > 1$ liefert die Taylorreihe im Gegensatz zu den Padé Approximanten in den betrachteten Ordnungen praktisch keine Übereinstimmung. Bemerkenswert daran ist, daß die Padé Approximanten lediglich die bereits in den Koeffizienten der Taylorreihe angelegte Information nutzen.

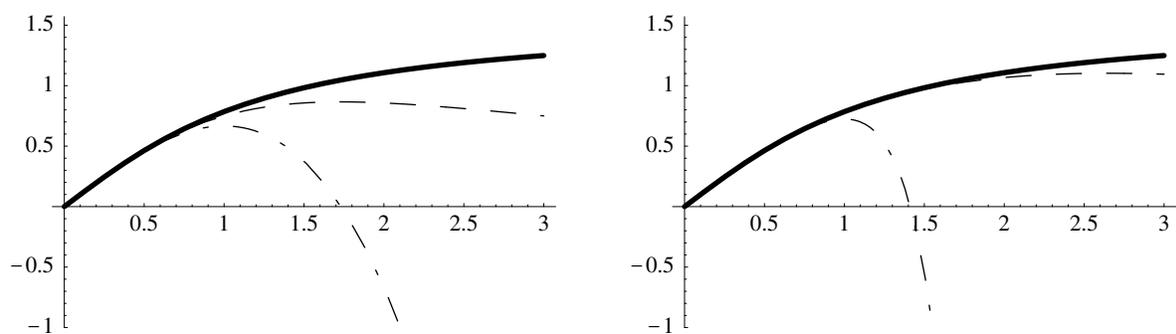


Abbildung B.1: Beispiel zur Padé Approximation. Verglichen wird die Funktion $\arctan(x)$ (durchgezogene Kurve) mit ihrer Näherung durch Padé Approximanten (gestrichelte Kurve) und Taylorreihe (gepunktete Kurve) bis zur 3. Ordnung (linkes Bild) und bis zur 7. Ordnung (rechtes Bild).

C

Spezielle Numerische Methoden

Numerische Berechnungen mit großen Anforderungen an Rechenzeit und Speicherkapazität verlangen nicht nur sorgsam entwickelte Algorithmen sondern auch eine Berücksichtigung der Rechnerarchitektur bei deren Implementierung. In diesem Kapitel beschreibe ich einige der numerischen Methoden, die meine numerischen Rechnungen zur Dreiteilchenstreuung zum Teil erst ermöglicht haben. Dazu gehören

- *Blocking* Technik zur Multiplikation großer Matrizen
- Multiple Präzision
- Numerische Berechnung singulärer Integrale

C.1 *Blocking* Techniken

In diesem Kapitel möchte ich auf die Tatsache eingehen, daß bei Berechnungen mit großen Datenfeldern auf modernen, Cache-basierten Rechnern der Fluß der Daten im Rechner einen sehr großen Einfluß auf die Geschwindigkeit hat. Es wird erörtert, welche Konsequenzen aus dieser Tatsache für die numerische Handhabung zu ziehen sind.

Es ist bekannt, daß der Transport der Daten im Rechner zu den zeitaufwendigsten Prozessen zum Beispiel bei der Ausführung einer Matrixmultiplikation gehört, sofern es sich um hinreichend große Matrizen handelt [17]. Ab welcher Größe ein Datenfeld als „hinreichend groß“ in diesem Sinne zu gelten hat, ist natürlich ein Spezifikum des jeweiligen Rechners. Die Forderung nach einer Minimierung des Datenflusses im Rechner ist zu der Forderung nach einer maximalen Wiederbenutzung* der einmal im Prozessor vorliegenden Daten äquivalent.

Die Lösung besteht darin, die Operationen bei der Matrixmultiplikation so umzuordnen, daß bei aufeinanderfolgenden Rechenoperationen möglichst auch im Speicher aufeinanderfolgende Elemente verwandt werden. Dies wird durch die Zerlegung, das sogenannte *Blocking*, der betreffenden Datenfelder in kleinere Unterfelder geeigneter Dimensionierung erreicht. Wir wollen dies exemplarisch für die Multiplikation zweier Matrizen demonstrieren.

*Im Englischen: „Data re-use“

Gegeben seien eine $m \times p$ Matrix A sowie eine $p \times n$ Matrix B , die wir wie folgt partitionieren

$$A = \begin{array}{ccc} \left[\begin{array}{ccc} A_{11} & \dots & A_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{q1} & \dots & A_{qs} \end{array} \right] & \begin{array}{c} m_1 \\ \vdots \\ m_q \end{array} , & B = \begin{array}{ccc} \left[\begin{array}{ccc} B_{11} & \dots & B_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ B_{s1} & \dots & B_{sr} \end{array} \right] & \begin{array}{c} p_1 \\ \vdots \\ p_s \end{array} . \\ p_1 & \dots & p_s & n_1 & \dots & n_r \end{array}$$

Dabei steht A_{ij} für eine $m_i \times p_j$ Untermatrix von A . Entsprechend bedeutet B_{ij} eine $p_i \times n_j$ Untermatrix von B , wobei gilt

$$m = m_1 + \dots + m_q, \quad (\text{C.1a})$$

$$p = p_1 + \dots + p_s, \quad (\text{C.1b})$$

$$n = n_1 + \dots + n_r. \quad (\text{C.1c})$$

Wir betrachten das Matrixprodukt $C = AB$, wobei wir die $m \times n$ Produktmatrix C gleichfalls partitionieren

$$C = \begin{array}{ccc} \left[\begin{array}{ccc} C_{11} & \dots & C_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ C_{q1} & \dots & C_{qr} \end{array} \right] & \begin{array}{c} m_1 \\ \vdots \\ m_q \end{array} . \\ n_1 & \dots & n_r \end{array}$$

Die Untermatrizen C_{ij} berechnen sich wie folgt

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^s A_{ik} B_{kj}. \quad (\text{C.2})$$

mit dem gewöhnlichen Matrixprodukt $A_{ik} B_{kj}$ der Matrizen A_{ik} und B_{kj} .

Die *Blocking*-Technik besteht darin, das Matrixprodukt AB gemäß Gl. (C.2) blockweise zu berechnen. Dadurch wird eine maximale Wiederbenutzung von in den Registern befindlichen Matrixelementen erreicht und der langsame Datentransport vom Speicher in die funktionalen Einheiten des Rechners auf ein Mindestmaß begrenzt. Die optimale Blockgröße, i. e. die Dimensionierung der Untermatrizen, ist den jeweiligen Gegebenheiten der Computer-Hardware anzupassen. Die durch die *Blocking* Technik bewirkten Geschwindigkeitsvorteile betragen für Matrixmultiplikationen leicht einen Faktor 10-30 gegenüber ungeblockten Algorithmen. Selbst bei nicht-optimalen Blockgrößen ist dieser Faktor noch erheblich, so daß dem geblockten Algorithmus grundsätzlich der Vorzug gegeben werden sollte.

C.2 Multiple Präzision

Reelle Zahlen können auf Computern nur näherungsweise dargestellt werden. Gerade diese Tatsache macht den Unterschied zwischen numerischer und reiner Mathematik aus. Bei bestimmten numerischen Anwendungen stößt man daher selbst bei sorgfältiger Algorithmenwahl an die Grenzen des Berechenbaren. Die Technik, die ich zur Berechnung singulärer

Integrale als Teil der numerischen Lösung der AGS Gleichung verwende, gibt hierfür ein Beispiel.

Bei der Darstellung der reellen Zahlen ist man jedoch keineswegs auf die von der Computer-Hardware vorgegebenen Genauigkeiten beschränkt. Vielmehr lassen sich per Software reelle Zahlen beliebiger Genauigkeit implementieren [2,3]. Eine detaillierte Schilderung der involvierten Konzepte ist an dieser Stelle nicht möglich. Neben den zitierten Forschungsberichten bietet [38] eine erste Einführung in diese Materie. Gestützt auf die in [2,3] entworfenen Programmpakete lassen sich Rechnungen mit einer wählbaren Genauigkeit bis zu mehreren Millionen (!) Stellen verwirklichen. Obwohl die Pakete für parallele Höchstleistungsrechner ausgelegt sind, ist jedoch klar, daß bei einer derart hohen Genauigkeitsstufe die Anforderungen an Speicher und Rechenzeit gewaltig ansteigen. Insbesondere ist natürlich der Verzicht auf die rechnerinterne Darstellung von reellen Zahlen mit mehr oder weniger starken Leistungseinbußen verbunden. Aus diesen Gründen mache ich von den Möglichkeiten der Rechnung mit beliebiger Präzision nur Gebrauch, wenn ein Algorithmus mit „normaler“ Genauigkeit versagt.

Ein weiterer Punkt in diesem Zusammenhang betrifft den Aufwand, den es bereitet, anstelle von vordefinierten Datentypen – wie z. B. *integer*, *real* – benutzerdefinierte Strukturen zu implementieren. Entsprechende Konzepte werden erst durch moderne Programmiersprachen wie FORTRAN 90 bereitgestellt. In FORTRAN 90 läßt sich beispielsweise bei Verwendung der Module [2,3] ein vorhandenes Programm mit minimalen Änderungen auf beliebige Genauigkeit erweitern. Dazu sind Konzepte wie benutzerdefinierte Strukturen und das sogenannte Überladen von Funktionen und Operatoren eine entscheidende Voraussetzung.

C.3 Numerische Berechnung singulärer Integrale

Zur numerischen Lösung der AGS Gleichung verwende ich ein spezielles Verfahren, mit dem die integrierbaren Singularitäten im Kern der Integralgleichung behandelt werden. In diesem Kapitel möchte ich dieses Verfahren vorstellen. Es nutzt aus, daß der Integrand in faktorisierten Form vorliegt, wie dies in den Kapiteln 5.4 sowie D.2 für den Kern der AGS Gleichung erzielt wurde.

Sei $f(x)$ eine glatte Funktion im Intervall $[a, b]$ und $w(x)$ eine Funktion mit einer integrierbaren Singularität in $[a, b]$. Wir betrachten das Integral

$$\int_a^b dx w(x) f(x). \quad (\text{C.3})$$

Unser Ziel ist, dieses Integral durch eine diskrete Summe, d. h.

$$\int_a^b dx w(x) f(x) \approx \sum_{i=1}^N W_i f_i \quad (\text{C.4})$$

mit N Stützstellen zu approximieren. Die Gewichte W_i sind zu bestimmen. Die Größen f_i sind die Funktionswerte $f_i = f(x_i)$, ausgewertet an Stützstellen x_i . Wie in Kapitel 5.4 dargestellt, ist es für die Lösung der AGS Gleichung sehr vorteilhaft, die x_i als die Stützstellen der gewöhnlichen N -Punkt Gauß-Legendre Integrationsregel anzunehmen.

Weiterhin setzen wir voraus, daß die Momente

$$\mu_n = \int_a^b dx w(x) x^n, \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{C.5})$$

analytisch berechnet werden können. Diese Voraussetzung ist für die Singularität des Kernes der AGS Gleichung gegeben, falls die Faktorisierung wie in den Kapiteln 5.4 sowie D.2 durchgeführt wird. Wir wenden auf das Integral (C.5) die Approximation (C.4) an und bekommen

$$\mu_n = \sum_{i=1}^N W_i x_i^n, \quad n = 0, 1, \dots, N-1.$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem für die N unbekanntenen Gewichte W_i

$$\mu = \mathbf{V} \mathbf{W} \quad (\text{C.6})$$

mit der Vandermondeschen Matrix

$$V_{ij} = x_j^i. \quad (\text{C.7})$$

Leider ist das lineare Gleichungssystem mit bekannten numerischen Verfahren *nicht* zu lösen. Die Ursache sind die Potenzen x_j^i der Vandermondeschen Matrix V . Für N Stützstellen ist die höchste eingehende Potenz ebenfalls N . Folglich erstrecken sich die Matrixelemente von V in der Regel über mehrere Größenordnungen. In der Literatur existieren zwar spezielle Verfahren zur numerischen Lösung Vandermondescher Gleichungssysteme (siehe z. B. [38]), dennoch versagen sogar diese Algorithmen bei Anwendung auf Gl. (C.6) bereits bei einer moderaten Anzahl von Stützstellen $N \gtrsim 8$. Deshalb löse ich Gl. (C.6) mit der in Kapitel C.2 geschilderten erweiterten Präzision und einem speziellen Algorithmus für Vandermondesche Systeme. Konkret benutze ich 100 Stellen Genauigkeit. Die Gl. (C.6) kann damit bis zu einer Stützstellenanzahl $N \approx 30$ problemlos gelöst werden. Wohlgermerkt fließt die multiple Genauigkeit nur in die *Lösung* der Gl. (C.6) ein. In der weiteren Rechnung, i. e. bei Auswertung der Summe (C.4) können die resultierenden Gewichte W_i mit der üblichen Genauigkeit weiterverarbeitet werden.

C.3.1 Beispiele

Wir betrachten konkrete Beispiele für die vorgestellte Methode. Das Integral (C.3) soll für verschiedene singuläre Funktionen $w(x)$ und Testfunktionen $f(x)$ berechnet werden. Von der Funktion $w(x)$ setzen wir voraus, daß sie im betrachteten Integrationsintervall $[a, b]$ eine einzige integrable Singularität im Innern des Intervalls aufweist. Diese Forderung dient ausschließlich der Vereinfachung in diesem Kapitel und stellt keine allgemeine Bedingung der geschilderten Methode dar. Zum Vergleich berechnen wir dasselbe Integral (C.3) nach der gewöhnlichen Gauß-Legendre Integrationsregel, also

$$\int_a^b dx w(x) f(x) \approx \sum_{i=1}^N w_i^{\text{GL}} f_i, \quad (\text{C.8})$$

mit den Gauß-Legendre Gewichten w_i^{GL} für das betreffende Integrationsintervall. Die Gauß-Legendre Integration mißachtet die Singularität vollständig. Als weitere Methode verwenden wir eine Subtraktionstechnik der Form

$$\int_a^b dx w(x) f(x) = \int_a^b dx w(x) (f(x) - f(x_s)) + f(x_s) \int_a^b dx w(x) \quad (\text{C.9a})$$

$$\approx \sum_{i=1}^N w_i^{\text{GL}} (f_i - f(x_s)) + f(x_s) \int_a^b dx w(x), \quad (\text{C.9b})$$

wobei x_s die Singularitätsstelle von $w(x)$ bezeichnet. Das regularisierte Integral wird wiederum nach der Gauß-Legendre Integrationsregel, das Integral $\int_a^b dx w(x)$ hingegen analytisch berechnet.

Die Tabelle C.1 vergleicht die Methode der speziellen Gewichte mit den Integrationsregeln (C.8) und (C.9b). Als Referenz wurden die jeweiligen Integrale mit dem Computer-Algebra Programm *Mathematica* bei entsprechend hoher Genauigkeit ausgewertet. Wie zu erwarten liefert die naive Anwendung der Gauß-Legendre Integrationsregel die schlechtesten Ergebnisse. Die in der Literatur häufig empfohlene Subtraktionstechnik erzielt demgegenüber eine höhere Genauigkeit. Die mit Abstand genauesten Resultate werden jedoch mit der vorgestellten Methode der speziellen Gewichte erreicht. Auffällig ist insbesondere die schnelle Konvergenz mit der Stützstellenzahl N . Trotz des singulären Integranden reicht eine moderate Stützstellenzahl aus. Diese Eigenschaft ist im Hinblick auf die numerische Lösung der AGS Gleichung sehr positiv zu bewerten.

Worauf ist die bemerkenswerte Genauigkeit zurückzuführen? Sicherlich ist eine Ursache darin zu sehen, daß bei der Methode der speziellen Gewichte an keiner Stelle sehr große bzw. sehr kleine Zahlen auftreten. Vielmehr sind alle bei der Auswertung von Gl. (C.4) vorkommenden Größen aus numerischer Sicht harmlos. Hingegen regularisiert die Subtraktionstechnik zwar den Integranden, dieser wird aber als Produkt einer gegen Null strebenden und einer divergierenden Funktion gebildet, wodurch zwischenzeitlich sehr wohl Operanden entstehen können, die der Genauigkeit abträglich sind.

Wir merken noch an, daß die Methode der speziellen Gewichte auch eingesetzt werden kann, wenn im Integrationsbereich mehrere integrierbare Singularitäten vorhanden sind, wie es für den Kern der AGS Gleichung mit seinen logarithmischen Singularitäten der Fall ist.

Singuläre Funktion: $\frac{1}{\sqrt{x}}$ Testfunktion: $\exp(x)$			Integral: $\int_0^1 dx \frac{\exp(x)}{\sqrt{x}}$ Exaktes Resultat: $\text{erf}(1) \approx 2.9253034918143632176\dots$			
N	Gauss-Legendre	ΔI	Gauss-Legendre mit Subtraktion	ΔI	Spezielle Gewichte	ΔI
4	2.7327830896119383	$0.658121 \cdot 10^{+01}$	2.9264405492084160	$0.388697 \cdot 10^{-01}$	2.9251045358341994	$0.680121 \cdot 10^{-02}$
7	2.8094197715224816	$0.396143 \cdot 10^{+01}$	2.9255481307523623	$0.836286 \cdot 10^{-02}$	2.9253035038325903	$0.410837 \cdot 10^{-06}$
10	2.8424564832735237	$0.283208 \cdot 10^{+01}$	2.9253925412646837	$0.304411 \cdot 10^{-02}$	2.9253034918141387	$0.768157 \cdot 10^{-11}$
13	2.8608436098811758	$0.220353 \cdot 10^{+01}$	2.9253453695363096	$0.143157 \cdot 10^{-02}$	2.9253034918143630	$0.151810 \cdot 10^{-13}$
Singuläre Funktion: $\frac{1}{\sqrt{x}}$ Testfunktion: $\cos(x)$			Integral: $\int_0^1 dx \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}}$ Exaktes Resultat: ${}_2F_2\left(\left(\frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{5}{4}\right), -1/4\right) \approx 1.809048475800544162949577\dots$			
N	Gauss-Legendre	ΔI	Gauss-Legendre mit Subtraktion	ΔI	Spezielle Gewichte	ΔI
4	1.6154157691891489	$0.107036 \cdot 10^{+02}$	1.8090732287856266	$0.136829 \cdot 10^{-02}$	1.8089278035203218	$0.667048 \cdot 10^{-02}$
7	1.6929219173177907	$0.641921 \cdot 10^{+01}$	1.8090502765476719	$0.995411 \cdot 10^{-04}$	1.8090484790389429	$0.179011 \cdot 10^{-06}$
10	1.7261127465910009	$0.458449 \cdot 10^{+01}$	1.8090488045821609	$0.181743 \cdot 10^{-04}$	1.8090484758006711	$0.700852 \cdot 10^{-11}$
13	1.7445468090304292	$0.356550 \cdot 10^{+01}$	1.8090485686855633	$0.513447 \cdot 10^{-05}$	1.8090484758005441	$0.122741 \cdot 10^{-13}$
Singuläre Funktion: $\log(x)$ Testfunktion: $\exp(x)$			Integral: $\int_0^1 dx \log(x) \exp(x)$ Exaktes Resultat: $\gamma - \text{Ei}(1) \approx -1.317902151454403894860009\dots$			
N	Gauss-Legendre	ΔI	Gauss-Legendre mit Subtraktion	ΔI	Spezielle Gewichte	ΔI
4	-1.2870648058673284	$0.233988 \cdot 10^{+01}$	-1.3185288280127472	$0.475511 \cdot 10^{-01}$	-1.3178577288033850	$0.337071 \cdot 10^{-02}$
7	-1.3067211295894061	$0.848395 \cdot 10^{+00}$	-1.3179822065845117	$0.607444 \cdot 10^{-02}$	-1.3179021530613317	$0.121931 \cdot 10^{-06}$
10	-1.3121866060796679	$0.433685 \cdot 10^{+00}$	-1.3179229038634550	$0.157465 \cdot 10^{-02}$	-1.3179021514543825	$0.163429 \cdot 10^{-11}$
13	-1.3144418949527736	$0.262558 \cdot 10^{+00}$	-1.3179097326241300	$0.575245 \cdot 10^{-03}$	-1.3179021514544038	$0.168483 \cdot 10^{-13}$
Singuläre Funktion: $\log(x)$ Testfunktion: $\cos(x)$			Integral: $\int_0^1 dx \log(x) \cos(x)$ Exaktes Resultat: $\text{Si}(-1) \approx -0.946083070367183014941353\dots$			
N	Gauss-Legendre	ΔI	Gauss-Legendre mit Subtraktion	ΔI	Spezielle Gewichte	ΔI
4	-0.9146426635469119	$0.332322 \cdot 10^{+01}$	-0.9461066856923308	$0.249612 \cdot 10^{-02}$	-0.9460558516080891	$0.287699 \cdot 10^{-02}$
7	-0.9348229810762806	$0.119018 \cdot 10^{+01}$	-0.9460840580713861	$0.104399 \cdot 10^{-03}$	-0.9460830707992313	$0.456670 \cdot 10^{-07}$
10	-0.9403468999222894	$0.606307 \cdot 10^{+00}$	-0.9460831977060763	$0.134596 \cdot 10^{-04}$	-0.9460830703671952	$0.127911 \cdot 10^{-11}$
13	-0.9426152605455731	$0.366544 \cdot 10^{+00}$	-0.9460830982169299	$0.294369 \cdot 10^{-05}$	-0.9460830703671831	$0.117349 \cdot 10^{-13}$

Tabelle C.1: Numerische Integration eines singulären Integrals. Die im Text beschriebenen Methoden werden auf verschiedene singuläre Integranden angewandt. Die Qualität der numerischen Ergebnisse ist in Abhängigkeit von der Stützstellenanzahl N angegeben. Als Maß der Abweichung wird der prozentuale relative Fehler $\Delta I = 100 \frac{|I_N - I_e|}{|I_e|}$ benutzt. Dabei bedeuten I_e und I_N den exakten und den numerischen Wert des jeweiligen Integrals.

D

Identitäten

D.1 Matricelemente des Permutationsoperators

Die Matricelemente des Permutationsoperators P in Gl. (3.22) werden in der Dreiteilchen-Basis $|pq\nu(Ij)\rangle_\alpha$ ausgedrückt. Obschon die Teilchenindizes β und γ in der Notation der Dreiteilchen-Basiszustände unterdrückt sind, werden sie in den Matricelementen des Permutationsoperators explizit angeführt, sofern es für das Verständnis notwendig ist.

Die Matricelemente des Permutationsoperators P werden in die folgende Form gebracht

$${}_\alpha \langle p'q'\nu'(I'j') | P | pq\nu(Ij) \rangle_\alpha = \int_{-1}^{+1} dx \frac{\delta(p' - \bar{p}'(q', q, x))}{p'^{L'+2}} \frac{\delta(p - \bar{p}(q', q, x))}{p^{L+2}} G_{\nu'\nu}(q', q, x) \quad (\text{D.1})$$

mit

$$\bar{p}'(q', q, x) = \sqrt{(c_{1\alpha}q')^2 + q^2 + 2c_{1\alpha}q'qx}, \quad (\text{D.2a})$$

$$\bar{p}(q', q, x) = \sqrt{q'^2 + (c_{2\alpha}q)^2 + 2c_{2\alpha}q'qx}, \quad (\text{D.2b})$$

$$x = \hat{\mathbf{q}}' \cdot \hat{\mathbf{q}}. \quad (\text{D.2c})$$

Die Konstanten $c_{1\alpha}$ und $c_{2\alpha}$ sind durch die Teilchenmassen gegeben, die von dem Baryoneninhalt der Zustände $|pq\nu(Ij)\rangle_\alpha$ abhängen, d. h.

$$c_{1\alpha} = \frac{m_\beta}{m_\beta + m_\gamma}, \quad (\text{D.3a})$$

$$c_{2\alpha} = \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_\gamma}. \quad (\text{D.3b})$$

Die Größe $G_{\nu'\nu}(q', q, x)$ in Gl. (3.22) ist

$$G_{\nu'\nu}(q', q, x) = \sum_k P_k(x) G_{\nu'\nu}^{(k)}(q', q) \quad (\text{D.4})$$

mit

$$\begin{aligned}
G_{\nu'\nu}^{(k)}(q', q) &= \delta_{\Pi'\Pi} \delta_{j'j} \delta_{\mathcal{M}'_j \mathcal{M}_j} \delta_{T'T} \delta_{\mathcal{M}'_T \mathcal{M}_T} \frac{1}{\sqrt{(1+B'^2)(1+B^2)}} \\
&\times \frac{1}{2} \sum_{L'_1+L'_2=L'} \sum_{L_1+L_2=L} q'^{L'_1+L_1} q^{L'_2+L_2} \\
&\times \left[g_{\nu'(\beta'\gamma')\nu(\beta\gamma)}^{kL'_1L_1L'_2L_2} \delta_{b'_\alpha b_\gamma} \delta_{b'_\beta b_\alpha} \delta_{b'_\gamma b_\beta} \right. \\
&\quad - (-)^{L'-S'-T'+s'_\beta+s'_\gamma+t'_\beta+t'_\gamma} g_{\nu'(\beta'\gamma')\nu(\beta\gamma)}^{kL'_1L_1L'_2L_2} \delta_{b'_\alpha b_\gamma} \delta_{b'_\beta b_\beta} \delta_{b'_\gamma b_\alpha} \\
&\quad - (-)^{L-S-T+s_\beta+s_\gamma+t_\beta+t_\gamma} g_{\nu'(\beta'\gamma')\nu(\beta\gamma)}^{kL'_1L_1L'_2L_2} \delta_{b'_\alpha b_\beta} \delta_{b'_\beta b_\alpha} \delta_{b'_\gamma b_\gamma} \\
&\quad \left. + (-)^{L'-S'-T'+s'_\beta+s'_\gamma+t'_\beta+t'_\gamma+L-S-T+s_\beta+s_\gamma+t_\beta+t_\gamma} g_{\nu'(\beta'\gamma')\nu(\beta\gamma)}^{kL'_1L_1L'_2L_2} \delta_{b'_\alpha b_\beta} \delta_{b'_\beta b_\gamma} \delta_{b'_\gamma b_\alpha} \right], \tag{D.5}
\end{aligned}$$

wobei die $P_k(x)$ die Legendre Polynome bedeuten. Wir haben die zusätzliche Größe $G_{\nu'\nu}^{(k)}$ eingeführt, um die Winkelabhängigkeit in Form der Legendre Polynome $P_k(x)$ explizit abzuspalten. Diese Definition wird sich im folgenden Abschnitt als bequem erweisen. Der Baryoneninhalt der Zustände und die Anordnung der Teilchen sind ausgeschrieben. Der rein geometrische Faktor $g_{\nu'(\beta'\gamma')\nu(\beta\gamma)}^{kL'_1L_1L'_2L_2}$ ist in der Ij -Kopplung gegeben durch

$$\begin{aligned}
g_{\nu'(\beta'\gamma')\nu(\beta\gamma)}^{kL'_1L_1L'_2L_2} &= (-)^{L'+S+T+s'_\alpha+s'_\gamma+2s'_\beta+t'_\alpha+t'_\gamma+2t'_\beta} \\
&\times \hat{L}' \hat{L} \hat{S}' \hat{S} \hat{T}' \hat{T} \hat{l}' \hat{l} \hat{j}' \hat{j} \hat{k}^2 c_{1\alpha}^{L'_1} c_{2\alpha}^{L_2} \sqrt{\frac{(2L'+1)!(2L+1)!}{(2L'_1)!(2L'_2)!(2L_1)!(2L_2)!}} \begin{Bmatrix} t'_\beta & t'_\gamma & T' \\ t'_\alpha & \mathcal{T} & T \end{Bmatrix} \\
&\times \sum_{LS} (\hat{L}\hat{S})^2 \begin{Bmatrix} s'_\beta & s'_\gamma & S' \\ s'_\alpha & S & S \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L' & l' & \mathcal{L} \\ S' & s'_\alpha & S \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l & \mathcal{L} \\ S & s_\alpha & S \end{Bmatrix} \\
&\times \sum_{f'f} \langle L'_1 0 l' 0 | f' 0 \rangle \langle L_2 0 l 0 | f 0 \rangle \langle k 0 L_1 0 | f' 0 \rangle \langle k 0 L_2 0 | f 0 \rangle \\
&\times \begin{Bmatrix} L'_1 & L'_2 & L' \\ \mathcal{L} & l' & f' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_2 & L_1 & L \\ \mathcal{L} & l & f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} f' & L'_2 & \mathcal{L} \\ f & L_1 & k \end{Bmatrix} \tag{D.6}
\end{aligned}$$

mit der Abkürzung $\hat{a} \equiv \sqrt{2a+1}$. Der Index $\nu(\beta\gamma)$ deutet die Anordnung der Teilchen β und γ in dem Paar α an.

D.2 Zerlegung des Operators Z

In diesem Kapitel wollen wir den Operator $Z(Z)$ auf eine Gestalt bringen, die die Singularitätsstruktur explizit macht. Wir übernehmen die Notation aus Kapitel 5.3. Durch Kombination von Gl. (5.18) mit der Definition (5.20) aus Kapitel 5.3.2 ergibt sich im Verbund mit

Gl. (D.5)

$$\begin{aligned}
& ({}^i q' \chi' (I' j') | Z^{\Pi j T} (E_i + i0) | i q \chi (I j)) \\
&= \frac{m}{q' q} \sum_k \sum_{L' S' B' LSB} G_{\nu' \nu}^{(k)}(q', q) \int_{-1}^{+1} dx P_k(x) \langle g^{(i' \pi' l' T')} | \bar{p}'(q', q, x) L' S' B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x) LSB | g^{(i \pi l T)} \rangle \\
& \quad \times \frac{1}{\bar{p}^{L'}(q', q, x)} \frac{1}{u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M}) + i0 - x} \frac{1}{\bar{p}^L(q', q, x)}. \quad (D.7)
\end{aligned}$$

Aus Gl. (D.7) lesen wir ab, daß der Integrand für $|u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M})| \leq 1$ singularär wird. Dieser Sachverhalt ist uns bereits aus Kapitel 5.3.2 vertraut. Gemäß der dort gegebenen Definition des Gebietes \mathcal{G} als der Menge aller Punkte q', q mit $|u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M})| \leq 1 + \varepsilon$ mit einem festen, positiven $\varepsilon \ll 1$ regularisieren wir den Integranden in Gl. (D.7) für $(q', q) \in \mathcal{G}$. Dazu machen wir erneut von der Identität

$$\frac{1}{x \pm i0} = \frac{\mathcal{P}}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (D.8)$$

Gebrauch und erhalten

$$\begin{aligned}
& ({}^i q' \chi' (I' j') | Z^{\Pi j T} (E_i + i0) | i q \chi (I j)) \\
&= \frac{m}{q' q} \sum_k \sum_{L' S' B' LSB} G_{\nu' \nu}^{(k)}(q', q) \\
& \quad \times \int_{-1}^{+1} dx \left[P_k(x) \frac{\langle g^{(i' \pi' l' T')} | \bar{p}'(q', q, x) L' S' B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x) LSB | g^{(i \pi l T)} \rangle}{\bar{p}^{L'}(q', q, x) (u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M}) - x) \bar{p}^L(q', q, x)} \right. \\
& \quad \left. - P_k(x_s) \frac{\langle g^{(i' \pi' l' T')} | \bar{p}'(q', q, x_s) L' S' B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x_s) LSB | g^{(i \pi l T)} \rangle}{\bar{p}^{L'}(q', q, x_s) (u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M}) - x) \bar{p}^L(q', q, x_s)} \right] \quad (D.9) \\
& + \frac{m}{q' q} \left(i\pi \theta(1 + x_s) \theta(1 - x_s) + \log \left| \frac{1 + u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M})}{1 - u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M})} \right| \right) \\
& \quad \times \sum_k \sum_{L' S' B' LSB} G_{\nu' \nu}^{(k)}(q', q) P_k(x_s) \frac{\langle g^{(i' \pi' l' T')} | \bar{p}'(q', q, x_s) L' S' B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x_s) LSB | g^{(i \pi l T)} \rangle}{\bar{p}^{L'}(q', q, x_s) \bar{p}^L(q', q, x_s)},
\end{aligned}$$

wobei wir

$$x_s = u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M}) \quad (D.10)$$

definiert haben. Aufgrund des regularisierten Integranden ist die Hauptwertvorschrift für das Integral im ersten Term überflüssig. Die θ -Funktionen im dritten Term machen Gl. (D.9) für alle Werte von q' und q zu einer Identität. Gleichung (D.9) erfüllt bereits die gestellte Aufgabe, denn die Singularitätsstruktur wird einzig von dem Logarithmus $\log \left| \frac{1 + u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M})}{1 - u(q', q; E_i, \delta \mathcal{M})} \right|$ getragen. Sämtliche von den Dreiteilchen-Quantenzahlen bzw. von den Rangindizes abhängigen Größen in Gl. (D.9) sind regulär. Weiterhin sind alle auftretenden Matrixelemente reellwertig, wodurch sich gegenüber komplexwertigen Matrixelementen der Speicherplatz halbiert. Allein die Multiplikation mit der imaginären Einheit i im dritten Term macht den Operator $Z(Z)$ komplexwertig.

Wir möchten schließlich noch die in Gl. (D.9) auftretenden Objekte mit den Abkürzungen identifizieren, die in Kapitel 5.4 eingeführt wurden. Wir bekommen

$$\begin{aligned}
Z^{(1)} &\equiv \frac{m}{q'q} \sum_k \sum_{L'S'B'} \sum_{LSB} G_{\nu'\nu}^{(k)}(q', q) \\
&\times \int_{-1}^{+1} dx \left[P_k(x) \frac{\langle g^{(i'\pi'I'T')} | \bar{p}'(q', q, x) L'S'B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x) LSB | g^{(i\pi IT)} \rangle}{\bar{p}'^{L'}(q', q, x) (u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M}) - x) \bar{p}^L(q', q, x)} \right. \\
&\quad \left. - P_k(x_s) \frac{\langle g^{(i'\pi'I'T')} | \bar{p}'(q', q, x_s) L'S'B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x_s) LSB | g^{(i\pi IT)} \rangle}{\bar{p}'^{L'}(q', q, x_s) (u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M}) - x) \bar{p}^L(q', q, x_s)} \right], \tag{D.11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{Z}^{(2)} &\equiv \frac{m}{q'q} \sum_k \sum_{L'S'B'} \sum_{LSB} G_{\nu'\nu}^{(k)}(q', q) \\
&\times P_k(x_s) \frac{\langle g^{(i'\pi'I'T')} | \bar{p}'(q', q, x_s) L'S'B' \rangle \langle \bar{p}(q', q, x_s) LSB | g^{(i\pi IT)} \rangle}{\bar{p}'^{L'}(q', q, x_s) \bar{p}^L(q', q, x_s)}, \tag{D.12}
\end{aligned}$$

$$w \equiv i\pi\theta(1+x_s)\theta(1-x_s) + \log \left| \frac{1+u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})}{1-u(q', q; E_i, \delta\mathcal{M})} \right| \tag{D.13}$$

Es folgen einige Anmerkungen.

- Mit der vorgeführten Abspaltung der Singularitäten in die skalare Funktion ist der Operator $Z(Z)$ der in Anhang C.3 beschriebenen Methode zur Berechnung singularer Integrale zugänglich geworden, zumal sich die dort definierten Momente für die singuläre Funktion w in Gl. (D.13) analytisch berechnen lassen.
- Die Fachliteratur, siehe z. B. [47], stützt sich vielfach auf die Identität

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx' \frac{P_k(x')}{x' + i0 - x} = Q_k(x) - i\pi P_k(x), \quad x \in [-1, +1], \tag{D.14}$$

mit der Legendre-Funktion zweiter Art $Q_k(x)$, zur Handhabung der Singularitäten. Es ist bei diesem Vorgehen als Nachteil anzusehen, daß der singuläre Term $Q_k(x)$ von der Quantenzahl k abhängt. Die Verknüpfung mit dem geometrischen Faktor $G_{\nu'\nu}^{(k)}(q', q)$ ergibt unausweichlich Matrixausdrücke in den Dreiteilchen-Quantenzahlen und den Rangindizes die *als Ganzes* das singuläre Verhalten aufweisen, im Gegensatz zu der in Gl. (D.9) vollzogenen Faktorisierung. Die Weiterverarbeitung einer singulären Matrix bei der Lösung der AGS Gleichung ist aber ungleich schwerer als in der hier vorgestellten Form.

Es stellt sich somit die Frage, warum in der Literatur diese Nachteile in Kauf genommen werden. Der Grund ist ebenfalls aus Gl. (D.9) abzulesen: Folgt man dem hier vorgeschlagenen Subtraktionsschema, so enthält die Gl. (D.14) mit den Legendre Polynomen $P_k(x_s)$ einen Anteil, der außerhalb des Gebietes \mathcal{G} , in dem $|x_s| > 1$ gilt, sehr groß werden kann und die Aufspaltung nach Gl. (D.14) verbietet, *falls* man sie in der ganzen q' - q -Ebene durchführt. Mit dieser Bemerkung verstehen wir nachträglich die Definition des Gebietes \mathcal{G} , in dem allein die Zerlegung des Operators $Z(Z)$ nach Gl. (D.9) vorgenommen wird, wie wir in Kapitel 5.4 erläuterten: Es ist so konstruiert, daß es zwar die Singularitäten vollständig umschließt, aber das kritische Argument x_s der Legendre Polynome $P_k(x_s)$ betragsmäßig nicht größer als $1 + \varepsilon$ wird. Im Lichte von Gl.

(D.9) erscheint die Definition des Gebietes \mathcal{G} als natürliche Konsequenz. An dieser Stelle verweisen wir auf die Arbeit [7], in der ein zu \mathcal{G} vergleichbares Gebiet definiert wird. Allerdings weicht die weitere numerische Behandlung der Singularitäten dort wesentlich von dem in der vorliegenden Arbeit geschilderten Verfahren ab.

E

Separable Entwicklung in rein nukleonischen Partialwellen

Dieser Anhang beschreibt die separable Entwicklung des Paris Potentials [30], das rein nukleonisch ist. Die hier benutzte Entwicklung ist gegenüber Refs. [8, 28] durch zusätzliche Ränge in den höheren Partialwellen verbessert worden. Sie wurde bereits in Refs. [32, 33] verwendet. Die Auflistung erfolgt nach den erhaltenen Quantenzahlen (πIT) der Partialwellen. In jeder Partialwelle bezeichnet i den separablen Term $|g^{(\pi IT)} M_I M_T\rangle$ der Entwicklung; z_i ist die verfügbare Schwerpunktsenergie und gibt die Art des Zustandes $|\psi^{(\pi IT)} M_I M_T\rangle$ an, der für die Definition von $|g^{(\pi IT)} M_I M_T\rangle$ benutzt wird. Die Spalte *Typ* listet diese Art des Zustandes auf, wobei S für einen Streuzustand und ein Leerzeichen für keinen Streuzustand steht. Der Impuls p_i und die verfügbare Energie z_i werden durch die gewählte Beziehung $p_i = \sqrt{m_N |z_i|}$ verknüpft. Jede Tabelle gibt in der Kopfzeile die gekoppelten Partialwellen $^{(2S+1)}L_i(B)$ an. Die Zustände sind jeweils nach ansteigender Schwerpunktsenergie z_i aufgelistet. Die Anordnung des Indizes i bezieht sich auf die Verwendung in numerischen Rechnungen. Das Symbol # kennzeichnet Zustände, die zur technischen Vereinfachung aus der separablen Entwicklung ohne Einfluß auf ihre Gültigkeit herausgenommen werden können.

$^1S_0(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
5		-100.0	0	0	1 (NN)
4		-50.0	0	0	1 (NN)
1	S	0.0	0	0	1 (NN)
2	S	50.0	0	0	1 (NN)
3	S	250.0	0	0	1 (NN)

$^3S_1(NN) - ^3D_1(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
5		-25.0	0	1	1 (NN)
6		-25.0	2	1	1 (NN)
1	B			1	1 (NN)
2	S	50.0	0	1	1 (NN)
3	S	62.5	2	1	1 (NN)
4	S	212.5	2	1	1 (NN)

${}^3P_0(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
4		-75.0	1	1	1 (NN)
2		-25.0	1	1	1 (NN)
1	S	5.0	1	1	1 (NN)
3	S	75.0	1	1	1 (NN)
5	S	175.0	1	1	1 (NN)

${}^1P_1(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
5		-75.0	1	0	1 (NN)
2		-25.0	1	0	1 (NN)
1	S	5.0	1	0	1 (NN)
3	S	75.0	1	0	1 (NN)
4	S	150.0	1	0	1 (NN)

${}^3P_1(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
5		-75.0	1	1	1 (NN)
2		-25.0	1	1	1 (NN)
1	S	5.0	1	1	1 (NN)
3	S	75.0	1	1	1 (NN)
4	S	150.0	1	1	1 (NN)

${}^3P_2(NN) - {}^3F_2(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
1	S	5.0	1	1	1 (NN)
2	S	20.0	3	1	1 (NN)
3	S	37.5	1	1	1 (NN)
4	S	37.5	3	1	1 (NN)
5	S	87.5	1	1	1 (NN)
6	S	87.5	3	1	1 (NN)
7	S	150.0	1	1	1 (NN)

${}^1D_2(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
5		-75.0	2	0	1 (NN)
2		-25.0	2	0	1 (NN)
1	S	5.0	2	0	1 (NN)
3	S	75.0	2	0	1 (NN)
4	S	150.0	2	0	1 (NN)

${}^3D_2(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
#5		-75.0	2	1	1 (NN)
2		-25.0	2	1	1 (NN)
1	S	5.0	2	1	1 (NN)
3	S	75.0	2	1	1 (NN)
4	S	150.0	2	1	1 (NN)

${}^3D_3(NN) - {}^3G_3(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
1	S	5.0	2	1	1 (NN)
2	S	20.0	4	1	1 (NN)
3	S	37.5	2	1	1 (NN)
4	S	50.0	4	1	1 (NN)
5	S	87.5	2	1	1 (NN)
6	S	125.0	4	1	1 (NN)
7	S	150.0	2	1	1 (NN)
8	S	200.0	4	1	1 (NN)

${}^1F_3(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
#5		-75.0	3	0	1 (NN)
2		-25.0	3	0	1 (NN)
1	S	5.0	3	0	1 (NN)
3	S	75.0	3	0	1 (NN)
#4	S	150.0	3	0	1 (NN)

${}^3F_3(NN)$					
i	Typ	z_i	L_i	S_i	B_i
#5		-75.0	3	1	1 (NN)
2		-25.0	3	1	1 (NN)
1	S	5.0	3	1	1 (NN)
3	S	75.0	3	1	1 (NN)
#4	S	150.0	3	1	1 (NN)

Literatur

- [1] E. O. Alt, P. Grassberger und W. Sandhas, Nucl. Phys. **B2**, 167 (1967).
- [2] D. H. Bailey, *A Portable High Performance Multiprecision Package*, Technical Report No. RNR-90-022, RNR (1993).
- [3] D. H. Bailey, *A Fortran-90 Based Multiprecision System*, Technical Report No. RNR-94-013, RNR (1995).
- [4] G. A. Baker, *Essentials of Padé Approximants* (Academic Press, New York, 1975).
- [5] K. Chmielewski, J. Haidenbauer, U. Meyer, S. Nemoto, P. U. Sauer und N. W. Schellingerhout, *Few-Body Systems Suppl.* **8**, 394 (1995).
- [6] S. A. Coon, M. D. Scadron, P. C. McNamee, B. R. Barrett, D. W. E. Blatt und B. H. J. McKellar, Nucl. Phys. **A317**, 242 (1979).
- [7] T. Cornelius, Doktorarbeit, Universität Bochum, 1990.
- [8] T. Cornelius, W. Glöckle, J. Haidenbauer, Y. Koike, W. Plessas und H. Wiśniewski, Phys. Rev. **C41**, 2538 (1990).
- [9] C. de Boor, *A Practical Guide to Splines* (Springer Verlag, New York, 1978).
- [10] D. J. Ernst, C. M. Shakin und R. M. Thaler, Phys. Rev. **C8**, 46 (1973).
- [11] C. T. Fike, *Computer Evaluation of Mathematical Functions* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1968).
- [12] T. Frederico und I. D. Goldmann, Phys. Rev. **C36**, 1661 (1987).
- [13] T. Frederico, I. D. Goldmann und S. K. Adhikari, Phys. Rev. **C37**, 949 (1988).
- [14] W. Glöckle, *The Quantum Mechanical Few-Body Problem* (Springer-Verlag, 1983).
- [15] W. Glöckle, G. Haber und A. R. Neghabian, Z. Phys. **A305**, 217 (1982).
- [16] W. Glöckle, H. Wiśniewski, D. Hüber, H. Kamada und J. Golak, Phys. Rep. **274**, 107 (1996).
- [17] G. H. Golub und C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, 3. Auflage (John Hopkins University Press, Baltimore, 1996).
- [18] W. Gruebler, Nucl Phys. **A398**, 445 (1983).

- [19] J. Haidenbauer und Y. Koike, *Phys. Rev.* **C34**, 1187 (1986).
- [20] J. Haidenbauer und W. Plessas, *Phys. Rev.* **C30**, 1822 (1984).
- [21] C. Hajduk und P. U. Sauer, *Nucl. Phys.* **A322**, 329 (1979).
- [22] C. Hajduk, P. U. Sauer und W. Strueve, *Nucl. Phys.* **A405**, 581 (1983).
- [23] H. Henning, J. Adam Jr., P. U. Sauer und A. Stadler, *Phys. Rev.* **C52**, R471 (1995).
- [24] H. Henning, P. U. Sauer und W. Theis, *Nucl. Phys.* **A357**, 367 (1992).
- [25] C. R. Howell, W. Tornow, K. Murphy, H. G. Pfützner, M. L. Roberts, A. Li, P. D. Felsher, R. L. Walter, I. Šlaus, P. A. Treado und Y. Koike, *Few-Body Systems* **2**, 19 (1987).
- [26] D. Hüber und J. L. Friar, *Phys. Rev.* **C58**, 674 (1998).
- [27] Y. Koike und J. Haidenbauer, *Nucl. Phys.* **A463**, 365c (1987).
- [28] Y. Koike, J. Haidenbauer und W. Plessas, *Phys. Rev.* **C35**, 396 (1987).
- [29] Y. Koike und Y. Taniguchi, *Few-Body Systems* **1**, 13 (1986).
- [30] M. Lacombe, B. Loiseau, J. M. Richard, R. J. Vinh Mau, Coté, P. Pirès und R. d. Tournell, *Phys. Rev.* **C21**, 861 (1980).
- [31] S. Nemoto, Doktorarbeit, Universität Hannover, 1999.
- [32] S. Nemoto, K. Chmielewski, J. Haidenbauer, U. Meyer, S. Oryu und P. U. Sauer, *Few-Body Systems* **24**, 241 (1998).
- [33] S. Nemoto, K. Chmielewski, J. Haidenbauer, S. Oryu, P. U. Sauer und N. W. Schellingerhout, *Few-Body Systems* **24**, 213 (1998).
- [34] M. T. Peña, H. Garcilazo, U. Oelfke und P. U. Sauer, *Phys. Rev.* **C45**, 1487 (1992).
- [35] M. T. Peña, H. Henning und P. U. Sauer, *Phys. Rev.* **C42**, 855 (1990).
- [36] M. T. Peña, P. U. Sauer, A. Stadler und G. Kortemeyer, *Phys. Rev.* **C48**, 64 (1993).
- [37] A. Picklesimer, R. A. Rice und R. Brandenburg, *Phys. Rev.* **C44**, 1359 (1991).
- [38] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2. Auflage (Cambridge University Press, Cambridge, New York, Victoria, 1992).
- [39] G. Rauprich, S. Lemaitre, P. Niessen, K. R. Nyga, R. Reckenfelderbäumer, L. Sydow, H. Paetz gen. Schieck, H. Witała und W. Glöckle, *Nucl. Phys.* **A535**, 313 (1991).
- [40] H. Rühl, B. Dechant, J. Krug, W. Lübecke, G. Spangardt, M. Steinke, M. Stephan, D. Kamke, J. Balewski, K. Bodek, L. Jarczyk, A. Strzałkowski, W. Hajdas, S. Kistryn, M. R., J. Lang, R. Henneck, H. Witała, T. Cornelius und W. Glöckle, *Nucl. Phys.* **A524**, 377 (1990).

- [41] H. Rühl, B. Dechant, J. Krug, L. W., G. Spangardt, M. Steinke, M. Stephan, D. Kamke, J. Balewski, K. Bodek, L. Jarczyk, A. Strzałkowski, W. Hajdas, S. Kistryn, R. Müller, J. Lang, R. Henneck, H. Witała, T. Cornelius und W. Glöckle, Nucl Phys. **A524**, 377 (1991).
- [42] K. Sagara, H. Oguri, S. Shimizu, K. Maeda, H. Nakamura, T. Nakashima und M. S., Phys. Rev. **C50**, 576 (1994).
- [43] P. U. Sauer und K. A. Bugaev, Prog. Part. Nucl. Phys. **34**, 147 (1995).
- [44] P. U. Sauer und H. Henning, Few-Body Systems **Suppl. 7**, 92 (1994).
- [45] P. U. Sauer, M. Sawicki und S. Furui, Prog. Theor. Phys. **74**, 1290 (1985).
- [46] P. U. Sauer und G. Thamm, Czech. J. Phys. **45**, 395 (1995).
- [47] E. W. Schmid und H. Ziegelmann, in *The Quantum Mechanical Three-Body Problem*, edited by H. Stumpf (Vieweg, Braunschweig, 1974).
- [48] A. Stadler und P. U. Sauer, Phys. Rev. **C46**, 64 (1992).
- [49] J. Strate, K. Geissdörfer, R. Lin, W. Bielmeier, J. Cub, A. Ebneith, E. Finckh, H. Friess, G. Fuchs, K. Gebhardt und S. Schindler, Nucl. Phys. **A501**, 51 (1989).
- [50] J. Strate, K. Geissdörfer, R. Lin, J. Cub, E. Finckh, K. Gebhardt, S. Schindler, H. Witała, W. Glöckle und T. Cornelius, J. Phys. G: Nucl. Phys. **14**, L229 (1988).
- [51] H. Witała, T. Cornelius und W. Glöckle, Few-Body Systems **3**, 123 (1988).
- [52] H. Witała, T. Cornelius und W. Glöckle, Few-Body Systems **5**, 89 (1988).
- [53] H. Witała, W. Glöckle und T. Cornelius, Nucl. Phys. **A491**, 157 (1989).

Danksagung

Ich danke Prof. P. U. Sauer für die Vergabe und Betreuung einer Arbeit, deren Thema mich so recht in Aufbruchstimmung versetzte.

Prof. A. Fonseca gebührt Dank für die geduldige Einführung seines Adepten in die Geheimnisse der Dreiteilchen-Streuung.

Johann Haidenbauer ist ein großes Dankeschön auszusprechen für seine fortwährende Bereitschaft, die separable Entwicklung zu optimieren.

Prof. Witała und Dr. Kamada danke ich für die Überlassung ihres Programmes zur Berechnung von Aufbruchobservablen aus den Elementen der Übergangsmatrix.

Prof. Oryu bin ich für seine Einladung an die Science University of Tokyo zu Dank verpflichtet.

Den Herren Kyrill Bugaev, J. P. B. C. de Melo, auch genannt Pacheco, Rik Naus, Malte Oelsner sowie Thomas Wilbois danke ich für die vielen *Happy Hours*...

Nicht zuletzt danke ich Shino Nemoto dafür, daß die vielen langen Abende im Institut doch nicht so lang waren.

Ich danke der Universität Hannover für die Vergabe eines Stipendiums nach dem Graduiertenförderungsgesetz.

Die umfangreichen numerischen Rechnungen wurden am Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen durchgeführt.

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, daß ich die vorliegende Dissertation ohne andere als die angegebenen Hilfsmittel angefertigt und sie nicht schon als Diplomarbeit oder ähnliche Prüfungsarbeit eingereicht habe.

Curriculum Vitae

09. 01. 1968	Geboren in Hameln
1974-1978	Besuch der Grundschule Lauenstein
1978-1980	Besuch der Orientierungsstufe der Schule am Kanstein, Salzhemmendorf
1980-1987	Besuch des Albert-Einstein-Gymnasiums, Hameln
1987-1994	Studium der Physik an der Universität Hannover
1994	Viermonatiger Aufenthalt bei Prof. A. Fonseca am Centró Fisica Nuclear da U. L. der Universität Lissabon
seit September 1994	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik der Universität Hannover