



Néhánytest-rendszerek kötött és nem kötött állapotai

doktori (PhD) értekezés

Mezei János Zsolt

Debreceni Egyetem
Természettudományi Kar
Debrecen, 2006

Ez a dolgozat a Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete Elméleti Fizikai Osztályán készült 2006-ban.

Ezen értekezést a Debreceni Egyetem TTK Fizika doktori program magfizika alprogramja keretében készítettem a Debreceni Egyetem TTK doktori (PhD) fokozatának elnyerése céljából.

Debrecen, 2006 október 6.

Mezei János Zsolt

Tanúsítom, hogy Mezei János Zsolt doktorjelölt 1999.- 2006. között a fent megnevezett doktori alprogram keretében irányításommal végezte munkáját. Az értekezésben foglalt eredményekhez a jelölt önálló alkotó tevékenységével meghatározóan hozzájárult. Az értekezés elfogadását javasolom.

Debrecen, 2006 október 6.

Dr. Lovas L. Rezső

Tanúsítom, hogy Mezei János Zsolt doktorjelölt 1999.- 2006. között a fent megnevezett doktori alprogram keretében irányításommal végezte munkáját. Az értekezésben foglalt eredményekhez a jelölt önálló alkotó tevékenységével meghatározóan hozzájárult. Az értekezés elfogadását javasolom.

Debrecen, 2006 október 6.

Dr. Papp Zoltán

Tartalomjegyzék

Előszó	iii
1. Elméleti bevezetés	1
1.1. A kötött állapot fogalmának általánosítása	2
1.2. Variációs módszer többtest-problémára	5
1.2.1. A variációs módszer	5
1.2.2. Többtest-feladat	7
1.2.3. A korrelált Gauss-bázis	10
1.2.4. Mátrixelem-számítás	13
2. Kötött állapot problémák	17
2.1. Coulomb-rendszerek kötött állapota	17
2.1.1. A Schrödinger-egyenlet skálázhatósága	18
2.1.2. Három- és négytest-Coulomb-rendszerek stabilitása	18
2.2. Öt és hat testből álló Coulomb-rendszerek	23
2.2.1. $(m^+, m^+, m^+, m^-, m^-)$	27
2.2.2. $(M^+, M^+, M^+, m^-, m^-)$	28
2.2.3. $(p^+, p^+, e^-, e^-, x^+)$	31
2.2.4. $(M^+, x^+, x^+, e^-, e^-)$	31
2.2.5. $(M^+, M^+, e^-, e^-, x^-)$	34
2.2.6. $(M^+, M^-, m^+, m^-, x^+)$	36
2.2.7. $(M^+, M^+, M^-, m^-, m^-)$	37
2.2.8. $(e^+, e^+, e^-, e^-, x^+)$	39
2.2.9. Az e^+ PsH rendszer	41

2.2.10. A Li^+Ps_2 és Na^+Ps_2 rendszerek	42
2.2.11. Egyéb különleges rendszerek	46
3. Rezonanciaproblémák	47
3.1. A csatolási állandóbeli analitikus folytatás (ACCC)	48
3.2. Egy modellprobléma	52
3.2.1. A Padé-közelítés paramétereinek meghatározása	53
3.2.2. A rezonanciaállapotok energiája és fizikai mennyiségek	56
3.2.3. A hullámfüggvény	62
3.3. A ^8Be rezonanciaállapotai	66
4. A Fagyjev–Merkurjev-formalizmus	72
4.1. Elméleti összefoglalás	72
4.1.1. A Fagyjev–Merkurjev-egyenletek	73
4.1.2. A közelítő eljárás	77
4.2. Rezonanciaállapotok torlódása Coulomb–háromtest-rendszerekben	84
Összefoglalás	95
Summary	102
Köszönetnyilvánítás	105
Publikációk és előadások	106
Irodalomjegyzék	109

Előszó

A mikroszkopikus világ – a makroszkopikushoz hasonlóan – bonyolult, sok szabadsági fokú, soktest-rendszereket alkot. Az anyagi rendszerekben lejátszódó folyamatok kísérleti vizsgálata során mindig néhány szabadsági fokot mozgató jelenségek tanulmányozásából indulunk ki, és lépésről lépésre építjük fel azt a tudásbázist, amellyel a bonyolult rendszerek megismerhetők.

Az anyagi rendszerek elméleti tanulmányozása egymásra közel „ortogonális” két szemlélettel valósítható meg. A soktest-közelítés szerint a rendszer sok (végtelen sok) kölcsönható részecske halmaza, amelyek tanulmányozásához statisztikus módszereket használhatunk. A legtöbb soktest-rendszer fontos mozgásaiban azonban a legtöbb szabadsági fok passzív, így leírásukat vagy kollektív, vagy néhánytest-modellekre redukálhatjuk. Természetesen a kevés test kölcsönhatásából álló elemi folyamatok ismerete nélkül nem létezhetnek a soktest-modellek sem.

A kvantummechanika egyik alapfeladatának tekinthető a legtriviálisabb többtest-problémák, azaz a néhánytest-problémák megoldásának minél alaposabb, pontosabb ismerete, hiszen legtöbbször ezeken keresztül vezet az út a soktest-rendszerekben lejátszódó jelenségek megértéséhez. Néha viszont ennek fordítottja is előfordul: a soktest-rendszerekből következtethetünk a néhánytest-jelenségekre, továbbá a soktest-rendszerekre kidolgozott módszerek próbaköve lehet a néhánytest-problémára való alkalmazhatóságuk.

Az anyagszerkezet leírásának alapvető eleme a néhánytest-probléma diszkrét, kötött állapotainak az ismerete. Megismerésük lényegéhez tartozik az, hogy vannak-e kötött állapotok, és a választól függetlenül a diszkrét nem kötött állapotok vizsgálata is lényeges.

A disszertációmban e két kérdéskör játszik fontos szerepet. A kötött állapotok

megtalálása mellett a kontinuumban található de diszkrétként kezelhető állapotok, a rezonancia- és a virtuális állapotok is fontos szerephez jutottak. Ez utóbbiak a kötött állapotok általánosításainak tekinthetők. Az általánosítás alapja az, hogy a rezonancia- és a virtuális állapotok is a szórásmatrix (S -matrix) egy-egy pólusához rendelhetők.

A dolgozatomban a néhánytest-fizika módszereinek és feladatainak több témakörét érintettem két, három, öt és hét részecskéből álló rendszerek tanulmányozásával. Számításaimban a kvantummechanika időtől független nemrelativisztikus módszereit használtam.

Vizsgálataim során alapeszközként olyan kiforrott módszerek és numerikus programok álltak rendelkezésemre, mint a Varga Kálmán által kifejlesztett stochasztikus eljárásokkal optimalizált korrelált Gauss-bázisos variációs eljárás, vagy a homogén Fagyeyev–Merkurjev-egyenletek megoldásán alapuló, a rezonanciaállapotok energiaértékeit meghatározó módszer, amelyet Papp Zoltán dolgozott ki. E módszerek már bizonyították alkalmazhatóságukat a fizika különböző területein végzett számításokon keresztül. E bevált módszerek mellett a rezonanciaállapotok helyének meghatározására a csatolási állandóbeli analitikus folytatáson alapuló eljárást is használtam, amely bizonyos fokig módszertani újdonság. Ez az eljárás a rezonanciahelyét és egyéb tulajdonságait (hullámfüggvényét, mérhető adatait) kötött állapot feladat sorozatának megoldására vezeti vissza. E feladatokat a kölcsönhatási potenciál egy tagjának a változó mélysége (a csatolási állandó) definiálja, és a rezonanciára jellemző értékeket a csatolási állandó fizikai értékére való extrapolálással nyerjük. Céлом volt mindezen módszerek finomítása, az analitikus folytatáson alapuló módszer továbbfejlesztése és valós fizikai rendszerekre való alkalmazása.

A néhánytest-fizikai kutatásaimat a kolozsvári atomfizikai tanulmányaim után az Atomki Elméleti Fizikai Osztályán elért eredményekre építettem.

A disszertációm négy fejezetre osztottam. Az első fejezetben a nem kötött de diszkrétként kezelhető állapotok kötött állapot általánosítását mutatom be egy egyszerű modellproblémán keresztül. Ezt követi a kötött állapotok meghatározására szolgáló korrelált Gauss-bázisú többtest variációs módszer, a stochasztikus variációs módszer bemutatása. A további fejezeteket elméleti bevezetővel kezdem, ahol az eddig elért eredményeket és a számításokban használt módszereket mutatom be, majd ismertetem az adott témához való hozzájárulásom, illetve

a kapott számítási eredményeket. A második fejezetben különböző tömegű egy-ségnyi töltésű néhánytest-rendszerek stabilitási tulajdonságait vizsgálom. A har-madik fejezetben ismertetem a rezonanciaállapotok tulajdonságainak a kölcsönha-tási potenciál mélységének változtatásán alapuló módszerét, ennek továbbfejlesz-tését és fizikai rendszerekre való alkalmazását. A negyedik fejezetben a háromtest–Coulomb-rendszerek rezonanciaállapotainak az energiáját határozom meg a homo-gén Fagyjev–Merkurjev-egyenletek megoldásával, illetve egy újonnan megfigyelt jelenségről számolok be. A dolgozatomat magyar és angol nyelvű összefoglalóval, publikációs listámmal és a felhasznált irodalmak jegyzékével zárom.

1. fejezet

Elméleti bevezetés

Egy kvantummechanikai rendszer állapotát egy tetszőleges t időpillanatban az időtől függő Schrödinger-egyenlet segítségével határozhatjuk meg:

$$i\hbar \frac{\partial \chi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = H\chi(\mathbf{x}, t). \quad (1.1)$$

Az egyenletben $H = H_0 + V$ a rendszer Hamilton-operátora, ahol H_0 -val a kinetikusenergia-operátort és V -vel a potenciálisenergia-operátort jelöltem, \mathbf{x} pedig magában foglalja a rendszerre jellemző összes szabadsági fokot (térkoordináta, impulzusmomentum, spin, izospin stb.). Amennyiben az (1.1) egyenlet stacionárius megoldásaira vagyunk kíváncsiak az állapotfüggvény $\chi(\mathbf{x}, t) = \tau(t)\Psi(\mathbf{x})$ szorzat alakban való felírásával az időtől és a helytől való függést szétválaszthatjuk. Ezzel eljutottunk a stacionárius állapotok alapegyenletéhez, az időtől független Schrödinger-egyenlethez:

$$H\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}). \quad (1.2)$$

Megfelelően megválasztott határfeltételek mellett az (1.1) és (1.2) egyenletek elvben megoldhatók. Az (1.2) megoldása a kvantummechanikai rendszer energiaspektrumát és stacionárius állapotfüggvényeit (hullámfüggvényeit) adja.

Egy másik út lehet a formális szóráselméletből való kiindulás. Az elméletben alapvető szerep jut a Hamilton-operátor rezolvensének vagyis a Green-operátorának:

$$G(z) = (z - H)^{-1}.$$

A $G(z)$ -nek - mint z komplex energia komplex függvényének - vágása van a pozitív E (pontosabban a legalacsonyabb küszöbtől számított) energiaértékekre, a Hamilton-operátor diszkrét sajátértékeiben pedig pólusai vannak. Az állapotfüggvények eleget tesznek a Lippmann–Schwinger-egyenletnek, vagyis:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_0(\mathbf{x}) + G_0(E \pm i\varepsilon)V\Psi(\mathbf{x}), \quad (1.3)$$

ahol $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$ a kinetikusenergia-operátor rezolvense. Az (1.3) egyenlet egy integrálegyenlet, amely az előző megközelítési móddal szemben magában hordozza a határfeltételeket, vagyis ezeket nem kell rá külön kiróni. Formálisan ez lenne a precízebb út, azonban az így kapott egyenletek matematikai megoldása sok esetben nagyon nehéz vagy lehetetlen. A dolgozatban e két ekvivalens és mégis erősen különböző közelítés módra adok példákat.

1.1. A kötött állapot fogalmának általánosítása

Egy kvantummechanikai rendszer stacionárius állapotait kötött (negatív energiájú, küszöb alatti, diszkrét) és szórás (pozitív energiájú, küszöb feletti, folytonos) állapotokra oszthatjuk. A kötött állapotok végtelen hosszú felezési idejű stacionárius állapotok, amelyek energiaértéke a legalacsonyabban fekvő bomlási küszöb energiája alatt van. A véges élettartamú rezonanciaállapotok az elbomlási végtermékeken keresztül észlelhetők. A rezonanciajelenség nem stacionárius, de szórás állapotok (stacionárius) szuperpozíciójával (hullámcsomagként) elvben közelíthetők. A rezonanciajelenséget az ütközést jellemző mennyiségek (hatáskeresztmetszet, fázistolás stb.) energiabeli hirtelen változásáról ismerhetők fel.

Az egyszerű szemléltetés kedvéért az s -hullámú részecske rövid hatótávolságú szférikus potenciálban való mozgásának tárgyalására korlátozzuk magunkat, de kijelentéseink akár többrészecskés rendszerekre is általánosíthatók. A hullámszám $k \sim \pm\sqrt{E}$ okozta $S(E)$ mátrixbeli kétértékűség elkerülése és a komplex E -re való kiterjesztése végett két Riemann-felületet (síkot) vezetünk be: $\text{Im } k \geq 0$ -val jellemezhető az ún. fizikai sík, $\text{Im } k < 0$ -val pedig az ún. nem fizikai sík. E az s -hullámú részecske teljes energiáját adja meg. A szórás hullámfüggvény ($u(r) = r\Psi(r)$) aszimptotikus alakja a következőképpen néz ki: $u(r) \sim k^{-1/2}(e^{-ikr} - S e^{ikr})$ (egy bejövő és egy kimenő hullám kombinációja), vagy más alakban: $u(r) \sim k^{-1/2}(S^{-1}e^{-ikr} - e^{ikr})$. Egy kötött állapot hullámfüggvényének aszimptotikus

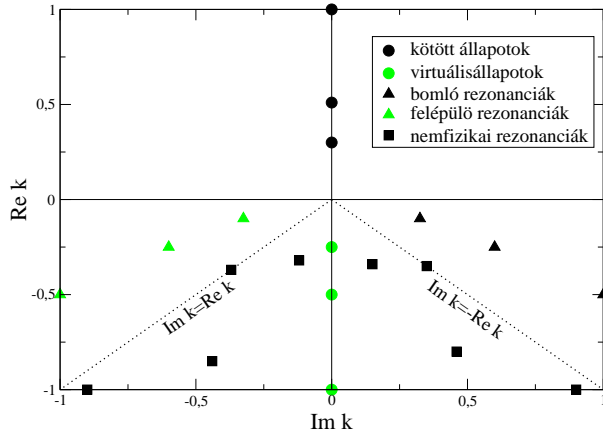
alakja pedig $u(r) \sim e^{ikr}$ alakban írható, ahol k csak képzetes tagból álló komplex szám. Vagyis a kötött állapot hullámfüggvényének aszimptotikus alakja nem más, mint a szórás állapot hullámfüggvényének aszimptotikus alakja az $|S| = \infty$ határesetben. Ezért a diszkrét kötött állapotok megfeleltethetők az $S(k)$ szórás függvény (mátrix) komplex hullámszámra vett általánosításával nyert függvény pólusainak. Ha azonban az $S(k)$ -t komplex k -ra általánosítottuk, azt is érdemes megvizsgálni, hogy a függvénynek nincsenek-e további olyan pólusai, amelyeknek fizikai jelentés tulajdonítható.

A fizikailag értelmes pólusok a következők (lásd 1.1. ábra):

- (i) *kötött* állapotok: $\bar{E} < 0$; $\bar{k} = i\kappa \sim (\bar{E})^{1/2}$ ($\kappa > 0$), $u(r) \sim e^{-\kappa r}$;
- (ii) *virtuális* vagy *antikötött* állapotok: $\bar{E} < 0$; $\bar{k} = -i\kappa$ ($\kappa > 0$), $u(r) \sim e^{\kappa r}$;
- (iii) *rezonanciák* (bomló \sim): $\bar{E} = E_R - i\frac{1}{2}\Gamma$, ($E_R, \Gamma > 0$), $\bar{k} = \kappa - i\gamma$ ($\kappa, \gamma > 0$),
 $u(r) \sim e^{\gamma r} e^{i\kappa r}$;
- (iv) *antirezonanciák* (felépülő rezonanciák): $\bar{E} = E_R + i\frac{1}{2}\Gamma$, $\bar{k} = -\kappa - i\gamma$,
 $u(r) \sim e^{\gamma r} e^{-i\kappa r}$.

Az előbbieken ismertetett rezonancia fogalom közelíti a hullámcsomaggal leírt rezonanciajelenséget, és egyértelmű „állapotfüggvényt” és komplex energiát rendel hozzá. A rezonancia természetesen nem egy stacionárius kvantummechanikai állapot, de mint a stacionárius kvantummechanikai állapotnak egy jó közelítése igen hasznos. Megmutatható, hogy a rezonanciapólus közelében (az E_R valós energia környezetében) az ütközést jellemző mennyiségek Γ szélességű gyors változáson mennek át, így E_R -t a rezonancia energiájának, a Γ -t pedig szélességének tekinthetjük. A rezonancia- és antirezonanciaállapotok konjugált pontokban helyezkednek el: $E_R \pm i\frac{1}{2}\Gamma$, $\pm\kappa - i\gamma$, vagyis a valós E -tengelyre és az imaginárius k -tengelyre nézve egymás tükörképei, hullámfüggvényeik között pedig a következő kapcsolat áll: $u_{-\bar{k}^*}(r) = u_{\bar{k}}^*(r)$. A bomló és felépülő állapot ugyanazon fizikai állapot kétféle (időbeli) megvalósításának tekinthető.

A kötött és virtuális állapotok is párban fordulnak elő, de energiáik, hullámszámaik között nincs ehhez hasonló egyértelmű kapcsolat. Látható, hogy mind a kötött, mind a virtuális állapotok energiája negatív, viszont a különbség a hullámszámban (a Riemann-felületben), és ezáltal a hullámfüggvényben van. A kötött állapot hullámfüggvénye exponenciálisan tart a nullához, míg a virtuális állapoté exponenciálisan nő. A virtuális állapot kiáltóan fizikailatlan, azonban a szórás mátrix sajátágosan viselkedik, és így közvetve van fizikai jelentősége. Több ismert



1.1. ábra. Az S mátrix pólusai a komplex k -síkon. A fekete telt körök a kötött állapotoknak, míg a világos körök a virtuális állapotoknak megfelelő pólusok. A \blacktriangle a bomló rezonanciákat, míg a világos háromszögek a felépülő (anti) rezonanciákat jelképezik. A \blacksquare -kel a nemfizikai rezonanciákat szemléltetem.

magfizikai „állapot” virtuális, leghíresebb ezek közül a deuteronnak a kötött állapothoz hasonló szingulett állapota.

A rezonanciaállapotok értelmezése érdekében a következő feltételezéssel élünk: behelyettesítjük a $\chi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi$ hullámfüggvényt az (1.1) időtől függő Schrödinger-egyenletbe előírva a $\Psi(\mathbf{r}) \propto u(r) \sim e^{ikr}$ kimenőhullám határfeltételt, ugyanis ez felel meg az $S(E)$ pólusnak. Ezek után azt kapjuk, hogy $\chi \sim e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_R t} e^{ikr}$, ahol az állapot e^{ikr} aszimptotikus alakkal rendelkezik. A $|\chi|^2 \propto e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t}$ időtől függő tényező, a Γ szélességgel rendelkező állapot exponenciális elbomlását írja le. Az r szerint exponenciálisan növekvő amplitúdó arra utal, hogy az elbomlás végtelen hosszú ideje történt és végtelen sokáig tart. A rezonanciaállapotok „hullámfüggvényét” nevezzük Gamow-hullámfüggvénynek. Ezáltal a rezonanciaállapotok eredendően a kötött állapotok meghatározására alkalmas módszerek valamely általánosításának a segítségével tárgyalhatók. A rezonanciaállapotokhoz tartozó energia-sajátértékek komplex számok. Egy hermitikus operátor sajátértékei valósak, ebből következik, hogy a Hamilton-operátor a Gamow-állapotokkal kiegészített függvényterben nem hermitikus. E függvényterben azonban egyfajta általánosított kvantummechanika, az ún. Berggren-reprezentáció [50] állítható fel.

Jelen dolgozatnak nem célja a Berggren-reprezentáció tárgyalása, viszont a teljesség kedvéért összefoglalva elmondható, hogy a függvénytér kiterjesztésével, módosított skalárszorozattal egy olyan biortogonális függvénytér hozható létre, amelyben a kötött állapot formalizmus tökéletesen működik rezonanciaállapotokra is. A dolgozatban a nem kötött, de diszkrétként kezelhető állapotokra „diszkrét nem kötött” állapotokként hivatkozok.

1.2. Variációs módszer többtest-problémára

1.2.1. A variációs módszer

Tekintsünk egy N részecskéből álló rendszert, amelynek Hamilton-operátora $H(1, \dots, N) = H_0 + V$, ahol $H_0 = \sum_{i=1}^N T_i$ a rendszer kinetikusenergia-operátorát jelöli, míg $V = \sum_i V^k(r_i) + \sum_{i,j} V(r_{ij}) + \dots$ a rendszerben ható összes kölcsönhatást foglalja magába ($V^k(r_i)$ a részecskékre ható külső kölcsönhatást, $V(r_{ij})$ a részecskék között ható kölcsönhatást jelöli, és r_i, r_{ij} pedig az egyrészecske és relatív koordinátákat. A diszkrét sajátértékspektrumot a

$$H(1, \dots, N) \Psi(1, \dots, N) = E \Psi(1, \dots, N), \quad (1.4)$$

időtől független Schrödinger-egyenlet megfelelő határfeltételek melletti megoldása szolgáltatja. Atom- és magfizikában a Schrödinger-egyenlet kötött állapot megoldásainak közelítésére leggyakrabban használt módszerek egyike a variációs elven alapuló eljárás. A továbbiakban ezt a módszert mutatom be, csupán a legfontosabb jellemzőire kitérve.

Egy négyzetesen integrálható Ψ_0 függvény akkor és csak akkor megoldása a $H\Psi_0 = E_0\Psi_0$ Schrödinger-egyenletnek (a H Hamilton-operátor hermitikus), ha az

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle},$$

funkcionál stacionárius $\Psi = \Psi_0$ -ban, vagyis ha az $E[\Psi]$ funkcionál összes $\delta E[\Psi]$ variációja nulla $\Psi = \Psi_0$ körül, és ekkor az E_0 sajátérték $E_0 = E[\Psi_0]$ lesz.

Ily módon egy közelítő megoldást kaphatunk, ha a megfelelően megválasztott Ψ próbafüggvény paramétereit olyannak választjuk, hogy az $E[\Psi]$ stacionárius legyen a paraméterek variációjával szemben. Bebizonyítható, hogy a próbafüggvény

segítségével meghatározott sajátérték felülről közelíti az alapállapot energiaértékét.

Természetesen ha a függvényterünket K darab lineárisan független, négyzetesen integrálható bázisfüggvénnyel fedjük le, akkor az alapállapot energiáértéknek egy jobb közelítését nyerjük a variációs feladat

$$\Psi = \sum_{i=1}^K c_i \psi_i, \quad (1.5)$$

próbafüggvénnyel való megoldásával, mintha csak egyetlen egy bázisfüggvénnyel fednénk le a függvényteret. Egy K dimenziós függvényter esetén K darab sajátértéket kapunk, hiszen a variációs elv alkalmazása egy K dimenziós sajátérték-egyenlethez vezet. A sajátértékek pontossága attól függ, hogy mennyire jól választjuk meg a bázisfüggvényeket.

A Hylleraas–Undheim-tétel:

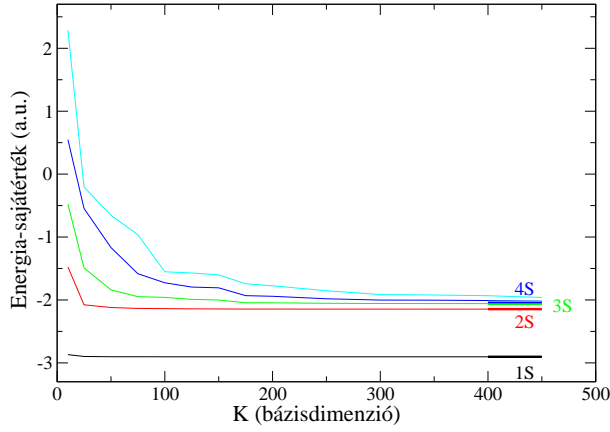
Legyen egy K dimenziós bázis által szolgáltatott sajátértékek sorozata $E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_K$. Ha egy újabb elemmel növeljük a bázist, akkor a hasonlóképpen rendezett új E'_i ($i = 1, \dots, K + 1$) energia-sajátértékekre a következő összefüggések érvényesek: $E'_1 \leq E_1 \leq E'_2 \leq E_2 \leq \dots \leq E'_K \leq E_K \leq E'_{K+1}$.

A fenti tételnek két fontos következménye van:

1. Amennyiben a bázis dimenziója megegyezik a teljes függvényter dimenziójával (amely elvben lehetséges, noha általában a teljes függvényterünk végtelen dimenziójú), akkor a közelítő sajátértékek megegyeznek az egzakt energiaértékekkel. Továbbá, ha a bázis teljesen lefedti a függvényter egy alterét, akkor a sajátértékek az alterre jellemző energiaértékekhez fognak konvergálni.
2. Az E_i közelítő sajátenergia felső korlátja az i -edik egzakt energiaértéknek. Ez utóbbit *mini-max tételnek* is nevezzük.

A fentiekben elmondottakat az 1.2. ábrán szemléltetjük. A számításokat az úgynevezett korrelált Gauss-bázison végeztük el, amelynek tárgyalására a későbbiekben térek ki. Figyelemre méltó a módszerünk pontossága, hiszen már kis bázisdimenzió mellett is nagy pontossággal kapjuk meg a He-atom alapállapotának, és az nS , $n > 1$ gerjesztett szingulett állapotoknak az energiáját.

Ezen vizsgálatok eredményeként elmondható, hogy variációs próbafüggvényt olyan négyzetesen integrálható függvények (bázisfüggvények) lineáris kombináci-



1.2. ábra. A héliumatom alap- és néhány gerjesztett, $L=0$ teljes impulzusmomentumú szingulettállapota, a függvényteret kifesztő bázis dimenziójának függvényében. Az ábrán látható vastagított rövid vonal relativisztikus korrekciókkal végzett egyéb számításokat jelöli [8]. Az eredményeket atomi egységekben adtuk meg.

ójának érdemes választani, amelyek elég rugalmasak, könnyen kezelhetők és természetesen eleget tesznek a Schrödinger-egyenletre kirótt határfeltételeknek. Ez az oka annak, hogy a hidrogénszerű, valamint a Hylleraas-típusú függvények a több-részecskes számítások esetén nagy szerepet kaptak az atomfizikában, a harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeit használják a magfizikusok, és hogy a Gauss-függvények nagymértékben elősegítették a molekulafizika területén a számításokat.

A számítások megkönnyítése érdekében jó ha a választott bázisfüggvények információt tartalmaznak a vizsgált rendszerre vonatkozóan. Ezért ad jobb eredményt (és gyorsabb konvergenciát) egy két centrumra centrált Gauss-függvényekből felépített bázis a hidrogénmolekulára, mint pusztán az origóra centrált, egycentrumú változat.

1.2.2. Többtest-feladat

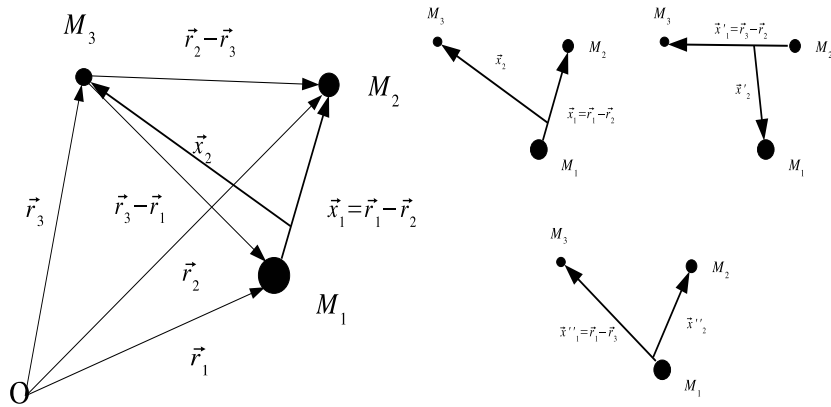
Többtest-feladat esetén az (1.4) egyenletben szereplő Hamilton-operátor alakja egyrészecske koordinátákban a következő:

$$H(1, \dots, N) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V^k(r_i) + \sum_{1 \leq i < j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (1.6)$$

Az esetek többségében a kölcsönhatás csak a részecskék relatív helyzetétől függ (külsőtér hiányában: $V^k(r_i) = 0$). Ilyenkor az $\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}$, $i = 1, \dots, N-1$ és $\mathbf{r}'_N = \mathbf{R}$ koordináták bevezetésével ($\mathbf{R} = m_{1\dots N}^{-1} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i$, $m_{1\dots N} = \sum_{i=1}^N m_i$) a rendszer súlypontjának mozgása különválasztható a relatív mozgástól. A bevezetett új koordinátákkal (amelyekből a vesszőt elhagyom) a Hamilton-operátor a következőképpen írható fel:

$$H'(1, \dots, N) = -\frac{\hbar^2}{2m_{1\dots N}} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (m_i^{-1} - m_{1\dots N}^{-1}) \nabla_i^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{1\dots N}} \sum_{1 \leq i < j}^{N-1} \nabla_i \nabla_j + \sum_{1 \leq i < j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|),$$

ahol a vesszős Hamilton-operátor arra utal, hogy ezt már az új koordinátákban adtam meg. A jobb oldal első tagja nem egyéb, mint a rendszer tömegközéppontjának kinetikus energiája, a harmadik tag az ún. tömeg-polarizációs tag, amely a Jacobi-koordináták bevezetésével kiküszöbölhető, így a számítások egyszerűsödnek. A következőkben a részecskék hely-, relatív és Jacobi-koordinátáinak kapcsolatára térek ki röviden.



1.3. ábra. A bal oldali ábra szemlélteti három részecske helyzetvektorait, relatív helyzetvektorait és ezek egy alternatív alakját, az ún. Jacobi-koordináták egyikét. A jobb oldali ábrán az összes lehetséges, ekvivalens Jacobi-koordináta-sorozat látható.

A 1.3. bal oldali ábráján, az egyszerűség kedvéért, három különböző tömegű

részecske által alkotott rendszer helyzetvektorait, és különböző relatív koordináta-vektorait ábrázoltam. A Jacobi-koordináták használata a rendszer belső dinamikájának leírása szempontjából alapvető fontosságú.

Adott egy N részecskéből álló rendszer, amelyet $3N$ helyzetkoordinátával ($\tilde{\mathbf{r}} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$) jellemezhetünk. $\tilde{\mathbf{r}}$ egy $1 \times N$ sor-mátrixot jelent, amelynek i -edik eleme az i -edik részecske helyzetvektorát adja meg. Az $\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{x}_N)$ Jacobi-sormátrix elemei kifejezhetők az egyrészecske, valamint relatív koordináta-vektorok segítségével és fordítva.

$$\mathbf{x}_i = \sum_{j=1}^N U_{ij} \mathbf{r}_j, \quad \mathbf{r}_i = \sum_{j=1}^N (U^{-1})_{ij} \mathbf{x}_j \quad (i = 1, \dots, N), \quad (1.7)$$

illetve

$$\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \sum_{k=1}^N \left[(U^{-1})_{ik} - (U^{-1})_{jk} \right] \mathbf{x}_k \equiv \widetilde{w^{(ij)}} \mathbf{x}, \quad (1.8)$$

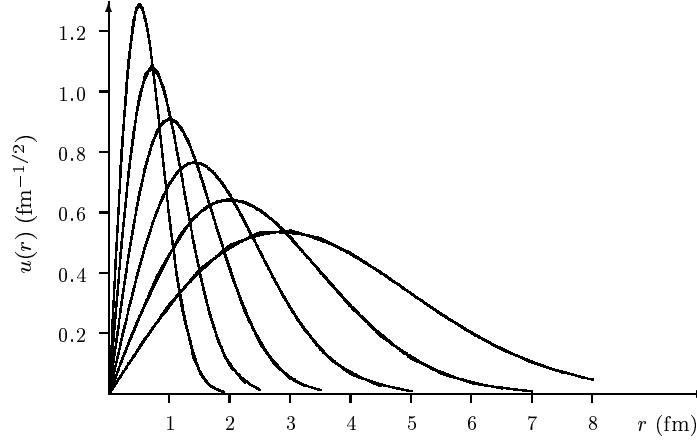
ahol az $N \times N$ -es U transzformáló mátrix alakja:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{m_1}{m_{12}} & \frac{m_2}{m_{12}} & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{m_1}{m_{12\dots N-1}} & \frac{m_2}{m_{12\dots N-1}} & \dots & \dots & -1 \\ \frac{m_1}{m_{12\dots N}} & \frac{m_2}{m_{12\dots N}} & \dots & \dots & \frac{m_N}{m_{12\dots N}} \end{pmatrix}.$$

Az U mátrix utolsó sorának és oszlopának a rendszer \mathbf{x}_N tömegközéppontja koordinátáinak a meghatározásában van csak szerepe. A belső dinamika tárgyalásához elégséges a rendszert $3N - 3$ koordinátával megadni. A 1.3. jobb oldali ábráján pedig a már említett háromtest-rendszerre jellemző összes lehetséges Jacobi-koordináta sorozatot szemléltettem. Természetesen mindez általánosítható a háromnál több részecskéből álló rendszerekre is, ahol a lehetséges Jacobi-koordináta sorozatok száma a rendszert alkotó részecskék számával nő. A különböző sorozatok egyértelműen kifejezhetők az egyrészecske koordináták segítségével, valamint egymás között is egyértelmű a kapcsolat. Ezen összefüggések megadásától eltekintek (lásd pl. [10]), viszont mint látni fogjuk, a számítások gyorsabb konvergenciája érdekében célszerű a különböző Jacobi-koordináta rendszerek együttes használata.

1.2.3. A korrelált Gauss-bázis

A variációs eljárások során kritikus pont a próbafüggvény helyes megválasztása. Ezeket legtöbbször rugalmas, jó tulajdonságú bázisfüggvények lineáris kombinációjaként adjuk meg. A Schrödinger-egyenlet, mint sajátérték-probléma sajátfüggvényei egy teljes ortonormált függvényrendszert alkotnak. A sajátfüggvényeket közelítő próbafüggvényt azonos alakú és tulajdonságú bázisfüggvények (a variációs paraméterek folytonos függvényei) lineáris kombinációjával közelítem. Ezekre a bázisfüggvényekre már nem kell megkövetelni az ortonormáltságot.



1.4. ábra. Az $u(r) = 2(a3/\pi)^{1/4} r e^{-\frac{1}{2}ar^2}$ radiális Gauss-függvények $l=0$ impulzusmomentum és különböző $a = \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1, 2, 4 \text{ fm}^{-2}$ paraméterek esetén.

Az egyrészecske-problémákra bevált csomópont nélküli gömbi harmonikus-oscillátor-függvények jó bázist alkothatnak. Ezeket impulzusmomentum-vetített Gauss-függvényeknek is tekinthetjük. Bármely l, m kvantumszámokkal jellemzett négyzetesen integrálható hullámfüggvény közelíthető az lm altérre vetített Gauss-függvények lineáris kombinációjával:

$$F_{lm}(\mathbf{r}) \approx \sum_{k=1}^{\mathcal{K}} c_k e^{-\frac{1}{2}a_k r^2} \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}), \quad \text{ahol } \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}) = r^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (1.9)$$

ahol $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ a gömbfüggvény. Az 1.4. ábrán néhány $l=0$ -s Gauss-függvényt ábrázoltam. E függvények kombinációi láthatólag valóban rugalmasan idomíthatók

egy kötött állapotú probléma megoldásához. Az (1.9) egyenlet N részecskéből álló rendszerre való általánosításával a következő függvényt kapjuk:

$$\begin{aligned}\Psi_{LM_L}(\mathbf{x}) &\approx \sum_{k_1, \dots, k_{N-1}} \sum_l C_{k_1, \dots, k_{N-1}l} \prod_{i=1}^{N-1} e^{-\frac{1}{2}a_{k_i} \mathbf{x}_i^2} \theta_{lLM_L}(\hat{\mathbf{x}}) \\ &= \sum_{\{kl\}} C_{kl} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}A\mathbf{x}} \theta_{lLM_L}(\hat{\mathbf{x}}),\end{aligned}\quad (1.10)$$

ahol az $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N-1}$ mátrixokkal ($(N-1) \times 1$ -es oszlopmátrixok) egy Jacobi-koordináta sorozatot jelöltem, amelyekből már kihagytuk a rendszer tömegközépponti mozgását. Az exponensben szereplő A mátrix diagonális. Ha a (1.10) második sorában megengedjük, hogy A ne legyen diagonális, azaz

$$\tilde{\mathbf{x}}A\mathbf{x} = \sum_{i,j=1}^{N-1} A_{ij} \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j, \quad (1.11)$$

akkor a korrelált Gauss-bázishoz jutunk, és ezáltal egy még rugalmasabb, jobb bázist kapunk. Az A mátrix egy a nemlineáris variációs paramétereket magába foglaló $(N-1) \times (N-1)$ -es szimmetrikus, pozitív definit mátrix.

Egy jól meghatározott L impulzusmomentumú és M mágneses kvantumszámú rendszer esetén a szögtől függő rész a következőképpen adható meg:

$$\begin{aligned}\theta_{lLM}(\hat{\mathbf{x}}) &= \left[\dots \left[\mathcal{Y}_{l_1}(\mathbf{x}_1) \times \mathcal{Y}_{l_2}(\mathbf{x}_2) \right]_{L_{12}} \times \mathcal{Y}_{l_3}(\mathbf{x}_3) \right]_{L_{123}} \times \dots \times \mathcal{Y}_{l_{N-1}}(\mathbf{x}_{N-1}) \Big]_{LM} \\ &= \sum_{\kappa=\{m_1, m_2, \dots, m_{N-1}\}l} c_{\kappa l} \prod_{i=1}^{N-1} \mathcal{Y}_{l_i m_i}(\mathbf{x}_i),\end{aligned}\quad (1.12)$$

ahol $\mathcal{Y}_{l_i m_i}(\mathbf{x}_i) = x_i^{l_i} Y_{l_i m_i}(\hat{\mathbf{x}}_i)$ a térbeli gömbfüggvények, $l = \{l_1, \dots, l_{N-1}, L_{12}, L_{123}, \dots\}$ a részecskék impulzusmomentumai mellett a vektorösszegzésből eredő részimpulzusmomentumokat is magába foglalja, c_{κ} pedig $\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | L_{12} m_1 + m_2 \rangle \langle L_{12} m_1 + m_2 l_3 m_3 | L_{123} m_1 + m_2 + m_3 \rangle \dots \langle L_{12 \dots N-1} m_1 + m_2 + \dots + m_{N-1} l_N m_N | LM \rangle$ Clebsch–Gordan-együtthatók szorzata (lásd [5] vagy [6]). Soktest-probléma esetén az (1.12) szögtől függő rész az impulzusmomentumok csatolása miatt nagyon elbonyolódhat, ugyanakkor a legtöbb esetben a részimpulzusmomentumok nem jó kvantumszámok, ezért egy realisztikus leírási mód több $(l_1, l_2, \dots, l_N; L_{12}, L_{123} \dots)$ csatolási csatornát is figyelembe kell veyen. Ezen segíthet az ún. *globális vektor reprezentáció* [10]. A bonyolult

csatolási csatornákkal előállított szögtől függő részt egy sokkal egyszerűbb módon állítjuk elő. Amennyiben a részimpulzusokra teljesülnek a következő feltételek (a paritásmegmaradás): $(-1)^{L_{12}} = (-1)^{l_1+l_2}$, $(-1)^{L_{123}} = (-1)^{L_{12}+l_3}$, $\dots, (-1)^L = (-1)^{L_{12\dots N-1}+l_N}$, akkor a hullámfüggvényt ugyanolyan jól adja vissza a

$$\theta_{LM} = \left\{ \prod_{j \geq i=1}^N (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j)^{k_{ij}} \right\} v^{2q} \mathcal{Y}_{LM}(\mathbf{v}), \quad (1.13)$$

szögfüggő tényezőket tartalmazó elemek lineáris kombinációja, ahol $2 \sum_{i=1}^N k_{ii} + 2 \sum_{j>i=1}^N k_{ij} + 2q = \sum_{i=1}^N l_i - L$ és a $\mathbf{v} = \sum_{i=1}^N u_i \mathbf{x}_i$. Ily módon egy olyan kifejezéshez jutunk, amely már csak a jó L, M kvantumszámoktól függ. Természetesen a \mathbf{v} vektorban szereplő lineáris paraméterek ismeretlenek, de ezek is variációs paraméterekként kezelhetők.

Ugyan a számításokban relativisztikus korrekciókat nem használunk, és a kététest-kölcsönhatásaink sem tartalmaznak spintől és izospintől függő tagokat, a spinhullámfüggvény figyelembevétele mégis fontos, mivel több azonos részecskéből álló rendszereket vizsgálunk. Tehát

$$\chi_{SM_S} = \left[\left[\left[\chi_{\frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} \right]_{S_{12}M_{12}} \chi_{\frac{1}{2}} \right]_{S_{123}M_{123}} \cdots \chi_{\frac{1}{2}} \right]_{SM_S},$$

vagyis az N darab spint kell valamelyik csatolási csatorna szerint összecsatolni, eleget téve az impulzuszórák összegzési szabályainak. Mivel az $S_{12}M_{12}, S_{123}M_{123}, \dots, S_{12\dots N-1}M_{12\dots N-1}$ kvantumszámok általában nem jó kvantumszámok, a bázisállapotunk függ a csatolási út megválasztásától.

Végül a teljes báziselem a következőképpen néz ki:

$$\psi_i = \psi_{(LS)JM_J}(A_i, \mathbf{x}) = \mathcal{A} \left\{ e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{x}} A \mathbf{x}} [\theta_{LM}(\tilde{\mathbf{x}}) \chi_S]_{JM_J} \right\}, \quad (1.14)$$

ahol \mathcal{A} a hullámfüggvényt megfelelően antiszimetrizáló operátor, és θ_{LM} lehet akár (1.12), akár (1.13). Tehát a hullámfüggvényben az azonos fermionokat tartalmazó csoportokon belül antiszimetrizálunk. Például a $(p^+, p^+, e^-, e^-, \mu^+)$ rendszert a két protonra és a két elektronra külön-külön antiszimetrizáljuk.

Behelyettesítve az (1.5) próbafüggvényt az (1.4) Schrödinger-egyenletbe egy általánosított sajátérték-egyenlethez jutunk:

$$\mathcal{H}c = E\mathcal{N}c, \quad (1.15)$$

ahol a \mathcal{H} Hamilton- és \mathcal{N} átfedési mátrixok elemei a következők:

$$\mathcal{H}_{ij} = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle \quad \text{és} \quad \mathcal{N}_{ij} = \langle \psi_i | \psi_j \rangle \quad (i, j = 1, \dots, K).$$

Az (1.15) egyenlet numerikus megoldása nagyméretű mátrixok esetén sem jelent napjaink számítástechnikai kapacitása mellett különösebben nagy problémát. A korrelált Gauss-függvényekből felépített bázis használata mellett szól az a tény is, hogy a fenti mátrixelemek a legtöbb esetben analitikusan meghatározhatók. Igaz, vannak jól ismert hátrányaik is, például lassabban konvergálnak, mint a csak exponenciális társaik, illetve nem tesznek eleget a Coulomb-kölcsönhatás esetén megjelenő úgynevezett Kato-féle „csúcsosodási (cusp)” feltételnek.

1.2.4. Mátrixelem-számítás

A fenti mátrixelemek meghatározásához segédösszefüggésekre lesz szükség, nevezetesen a korrelált Gauss-függvények $g(\mathbf{s}; A, \mathbf{x})$ generátorfüggvényét kell értelmezni. Legyen:

$$\begin{aligned} f_{KLM}(u, \mathbf{A}, \mathbf{x}) &\equiv e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{x}} |\tilde{u}\mathbf{x}|^{2K} \mathcal{Y}_{LM}(\tilde{u}\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{B_{KL}} \int Y_{LM}(\hat{\mathbf{e}}) \left(\frac{d^{2K+L}}{d\lambda^{2K+L}} g(\lambda\mathbf{e}u; A, \mathbf{x}) \right)_{\lambda=0, \mathbf{e}=|\mathbf{e}|=1} d\hat{\mathbf{e}}, \end{aligned} \quad (1.16)$$

ahol felhasználtam a következő összefüggést:

$$(\mathbf{v} \cdot \mathbf{e})^k = v^k \sum_{\substack{n, l \geq 0 \\ 2n+l=k}} B_{nl} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{v}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{e}}), \quad \text{ahol } |\mathbf{e}| = 1.$$

A $g(\mathbf{s}; A, \mathbf{x})$ generátorfüggvény és a B_{KL} tényező alakja pedig:

$$g(\mathbf{s}; A, \mathbf{x}) = e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{x} + \tilde{\mathbf{s}}\mathbf{x}}, \quad B_{KL} = \frac{4\pi(2K+L)!}{2^K K! (2K+L+1)!}.$$

A (1.16) egyenletben $\tilde{\mathbf{s}} = (\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N)$ segédvektor, az \mathbf{e} egységvektor pedig a szögektől függő paraméter. Felhasználva a fentiekben leírtakat, egy tetszőleges \hat{O} operátornak az (1.16) egyenlettel értelmezett függvénnyel vett mátrixeleme:

$$\begin{aligned} \langle f_{K'L'M'}(u', \mathbf{A}', \mathbf{x}') | \hat{O} | f_{KLM}(u, \mathbf{A}, \mathbf{x}) \rangle &= \frac{1}{B_{KL} B_{K'L'}} \int \int d\hat{\mathbf{e}} d\hat{\mathbf{e}}' Y_{LM}(\hat{\mathbf{e}}) Y_{L'M'}^*(\hat{\mathbf{e}}') \\ &\times \left(\frac{d^{2K+L+2K'+L'}}{d\lambda^{2K+L} d\lambda'^{2K'+L'}} \langle g(\lambda'\mathbf{e}'u'; A', \mathbf{x}') | \hat{O} | g(\lambda\mathbf{e}u; A, \mathbf{x}) \rangle \right)_{\substack{\lambda=0, \lambda'=0 \\ \mathbf{e}=|\mathbf{e}|=1 \\ \mathbf{e}'=|\mathbf{e}'|=1}}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban csak a korrelált Gauss-függvények közötti átfedési integrál kiszámítási eljárását adom meg, egy általánosabb \hat{O} operátor esetén az eljárás hasonló, csak a generátorfüggvénnyel vett mátrixelemenben fog különbözni.

$$\begin{aligned} \langle f_{K'L'M'}(u', \mathbf{A}', \mathbf{x}') | f_{KLM}(u, \mathbf{A}, \mathbf{x}) \rangle &= \frac{1}{B_{KL}B_{K'L'}} \int \int d\hat{\mathbf{e}} d\hat{\mathbf{e}}' Y_{LM}(\hat{\mathbf{e}}) Y_{L'M'}^*(\hat{\mathbf{e}}') \\ &\times \left[\frac{d^{2K+L+2K'+L'}}{d\lambda^{2K+L} d\lambda'^{2K'+L'}} \left(\frac{(2\pi)^{N-1}}{\det B} \right)^{\frac{3}{2}} e^{[q\lambda^2 + q'\lambda'^2 + \rho\lambda\lambda' \mathbf{e} \cdot \mathbf{e}']} \right]_{\substack{\lambda=0, \lambda'=0 \\ \mathbf{e}=\mathbf{e}'=1 \\ \mathbf{e}'=\mathbf{e}'=1}} \end{aligned} \quad (1.18)$$

ahol

$$B = A + A', \quad q = \frac{1}{2} \tilde{u} B^{-1} u, \quad q' = \frac{1}{2} \tilde{u}' B'^{-1} u', \quad \rho = \tilde{u}' B^{-1} u.$$

Az átfedési integrálban szereplő exponenst a következő sorfejtett alakban adhatjuk meg:

$$e^{q\lambda^2 + q'\lambda'^2 + \rho\lambda\lambda' \mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} H(n, q) H(n', q') H(m, \rho) \lambda^{2n+m} \lambda'^{2n'+m} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}')^m,$$

ahol

$$H(n, x) = \begin{cases} \frac{x^n}{n!}, & \text{ha } n \geq 0 \\ 0, & \text{ha } n < 0 \end{cases}.$$

A (1.18) egyenletben a λ és λ' segédparaméterek szerint deriválva, majd tartva ezekkel nullához csak azokban az esetekben kapunk nullától különböző tagokat amikor $2n+m = 2K+L$ és $2n'+m = 2K'+L$. Továbbá az \mathbf{e} és \mathbf{e}' szögparaméterek szerinti integrálás során azok a tagok fognak különbözni nullától, amelyekre teljesül az $m = L + 2k$ feltétel, ahol k pozitív egész szám. Tehát:

$$\int \int d\hat{\mathbf{e}} d\hat{\mathbf{e}}' Y_{LM}(\hat{\mathbf{e}}) Y_{L'M'}^*(\hat{\mathbf{e}}') (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}')^{2k+L} |_{\mathbf{e}=\mathbf{e}'=1} = B_{kL}.$$

Összefoglalva az előzőekben leírtakat, és figyelembevétel az $n = K - k$ és $n' = K' - k$ paramétercseréket, az átfedési mátrixelemre a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle f_{K'L'M'}(u', \mathbf{A}', \mathbf{x}') | f_{KLM}(u, \mathbf{A}, \mathbf{x}) \rangle &= \frac{(2K+L)!(2K'+L)!}{B_{KL}B_{K'L'}} \\ &\times \left(\frac{(2\pi)^{N-1}}{\det B} \right)^{\frac{3}{2}} \sum_{k=0}^{\min(K, K')} H(K-k, q) H(K'-k, q') H(L+2k, \rho) B_{kL}. \end{aligned}$$

A variációs számítások konvergenciája és pontossága nagymértékben függ attól, hogy miként optimalizáljuk a nemlineáris paramétereket. Kiszámú részecskét tartalmazó rendszerek esetén is igaz, hogy az optimalizálandó paraméterek száma igen nagy, ezért a számítási idő csökkentése érdekében, alapos körültekintéssel kell elvégezni a bázisoptimalizálásokat. Konvencionális, determinisztikus optimalizáción alapuló módszerek esetén (a nemlineáris paraméterek mértani haladványt alkotnak, esetleg valamely ekvidisztáns vagy Csebisev-rácspontokként értelmezzük őket), sokszor és ismételten kell a diagonalizálást és a mátrixelem kiszámítást végrehajtani, és az esetleges lokális minimumok jelenléte miatt még így sem biztos, hogy megtaláljuk a globális minimumot, amely a probléma megoldását (sajátértékét) jelentené.

Módszerünk a stochasztikus paraméter keresésen alapul [11], így a lokális minimumba való „beragadás” megszüntethető, valamint a nagy, és nemcsak nulla elemekkel rendelkező mátrixok ismétlődő diagonalizációját azzal helyettesítjük, hogy egyszerre csak egy bázisfüggvényt változtatunk meg.

Az (1.14) egyenlet exponensében szereplő kvadratikus alak a következővel azonos:

$$\mathbf{x}^\dagger A \mathbf{x} = \sum_{k < l}^N \alpha_{kl} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)^2, \quad (1.19)$$

ahol \mathbf{r}_i a részecskék helyzetvektora, az α_{ij} és A_{ij} nemlineáris paraméterek pedig kifejezhetők egymás függvényében. A fenti jelölés többek között azért is előnyös, mert közvetlen módon tartalmazza az i -vel és a j -vel jelölt részecskék közötti korrelációt. Az $\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l$ relatív koordináták nem alkotnak lineárisan független halmazt, így az α_{ij} -k közül néhány lehet negatív is, azonban az A mátrixnak pozitív definitnek kell maradnia, annak érdekében hogy a bázisfüggvény négyzetesen integrálható legyen. Mivel semmilyen előny nem származott abból, hogy az α_{ij} -knek megengedünk negatív értékeket is (ha az α_{ij} -re mint méretparaméterre gondolunk, akkor a negatív fizikai méretnek nincs értelme), ezért maradunk a csak pozitív értékeknél [10].

A stochasztikus variációs módszer szisztematikusan javítja az α_{ij} nemlineáris paramétereket, és a véletlenszerűen választott értékek közül csak azokat fogadja el, amelyek mélyítik az energiaértékét. A bázisépítés a következőképpen zajlik: az első báziselemhez azt a báziselemet adjuk hozzá, amelyet adott számú véletlenszerűen választott paraméter készletből a legmélyebb energiaértéket adja. Így

1.1. táblázat. *Coulomb-i néhánytest-rendszerek alapállapoti energiája atomi egységekben. A proton tömegét végtelen nagynak választottuk kivéve az utolsó esetet, amikor ennek az értéke $1836.1527m_e$ volt.*

rendszer	SVM	bázis méret	más eredmények	bázis méret
${}^{\infty}\text{H}^-$	-0.527710163	600	-0.52775116523	850 [48]
Ps^-	-0.262005070226	600	-0.2620050702328	1488 [49]
${}^{\infty}\text{HPs}$	-0.789196553	1200	-0.7891967147	—— [35]
${}^{\infty}\text{H}_2$	-1.17445	100	-1.174475714	1200 [36]
Ps_2	-0.516003778	1200	-0.516002	400 [37]
H_3^+	-1.3185	500	——	——

lépésről-lépésre növelhető a bázis. Az eljárást mindaddig folytatjuk, amíg elérjük az általunk megkívánt energia- és hullámfüggvénybeli pontosságot. További javítás érhető el azzal, ha a bázisra egy finomító ciklust engedünk rá. Ennek az eljárásnak a lényege abban áll, hogy minden báziselemhez, általunk szabályozott számú új, véletlenszerűen választott nemlineáris paramétersorozatot generálunk, majd az eredeti paramétereket ezen sorozat elemeire cserélve megvizsgáljuk, hogy mélyít-e valamelyik elem az energiaértéket. Ha igen, akkor az eredeti paramétert kicseréljük ezzel az újjal és a finomítási ciklus folytatódik a következő báziselemmel. Ennek az eljárásnak köszönhetően, már akár kis bázisméret mellett is nagy pontosságot tudunk elérni. Szemléltetésként néhány rendszer alapállapoti energiáját az 1.1. táblázatban foglaltam össze.

2. fejezet

Kötött állapotú problémák

2.1. Coulomb-rendszerek kötött állapota

A klasszikus mechanika legtöbbet tanulmányozott problémái közé tartozik az $(1/r^2)$ -es newtoni gravitációs törvény szerinti mozgás és az ennek megfelelő kvantummechanikai rendszerek, az $(1/r)$ -es Coulomb-potenciállal kölcsönható néhányttest-rendszerek. Amennyiben a részecskék száma kettő, a probléma analitikusan megoldható. Ha azonban eggyel növeljük a rendszert alkotó részecskék számát, a feladatra már csak numerikus megoldást kaphatunk, hiszen a klasszikus mechanikából tudjuk, hogy az „elsőintegrálok” száma kevesebb, mint az ismeretlen (\mathbf{x}, \mathbf{p}) általános koordináták és impulzusok együttes száma. A nagyteljesítményű számítógépeknek köszönhetően, azonban különböző közelítő eljárások alkalmazásával lehetőség van arra, hogy nagy pontossággal meghatározzuk a részecskék helyzetét és sebességét valamely tetszőleges időpillanatban. A kvantummechanikai Coulomb-kölcsönható háromtest-rendszer sokkal több fejfájást okozott az elméleti fizikusoknak, mint klasszikus párja.

A diszkrét energiaspektrum meghatározására leggyakrabban variációs eljárásokat használtak [7, 10], a rezonanciaállapotok jellemzőit pedig legtöbbször komplex elforgatáson alapuló eljárásokkal próbálták meghatározni [54]. A Fagyjev–Merkurjev-integrál-egyenletek megoldásával nagy pontossággal sikerült leírni különböző háromtest-rendszerek kötött állapotai mellett, a rezonanciaállapotokat és a szórás állapotokat is [73]. Ez utóbbi közelítő eljárásra a dolgozatban a később-

biekben részletesebben is kitérek. Mindamellett, hogy háromtest-rendszerről van szó és nagyon sokat tanulmányozták ezeket a rendszereket az elmúlt időszakban, többek között a háromtest–felhasadási (bomlási) küszöb feletti állapotok leírása sincs még teljesen megoldva.

2.1.1. A Schrödinger-egyenlet skálázhatósága

Az N töltött részecskéből álló rendszer Schrödinger-egyenlete a következő:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} + \sum_{1 \leq i < j}^N \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (2.1)$$

ahol $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ a részecskék koordinátáit, m_i a tömegüket és q_i pedig a töltésüket jelöli.

Változtassuk meg arányosan egy c skálafaktorral a részecskék tömegét és egyidejűleg c^{-1} -es szorzóval a koordinátákat: $m'_i = cm_i$ és $\mathbf{r}'_i = c^{-1}\mathbf{r}_i$. Behelyettesítve mindezeket a (2.1) Schrödinger-egyenletbe azt kapjuk, hogy:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m'_i} \Delta_{\mathbf{r}'_i} + \sum_{1 \leq i < j}^N \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j|} \right] \Psi(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) = cE \Psi(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N). \quad (2.2)$$

A fizikailag értelmes $c > 0$ esetben, a (2.1) és (2.2) problémának „ugyanakkor” van kötött állapota. Ebből pedig az következik, hogy a kötött állapot léte csak a tömegarányoktól függ, és az átskálázott tömeghez ($m'_i = cm_i$) tartozó kötött állapot energiában ($E' = cE$) és méretben is ($\Psi(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) = \Psi(c^{-1}\mathbf{r}_1, \dots, c^{-1}\mathbf{r}_N)$) átskálázódik.

Hasonló a végkifejlete annak az esetnek is, ha az átskálázást nem a részecskék tömegein, hanem a töltésein keresztül végezzük el, igaz ez esetben az energiaskálázás már négyzetes.

2.1.2. Három- és négytest-Coulomb-rendszerek stabilitása

Tekintsük az egyszerűség kedvéért az (m_1^+, m_2^-, m_3^-) egységnyi töltéssel rendelkező részecskéből alkotott háromtest-rendszert, ahol m_i -vel a részecske tömegét és a felsőindexben levő $+$ -szal vagy $-$ -szal az egységnyi töltés előjelét jelöltük, és feltételezzük továbbá, hogy $m_3 \leq m_2$. A rendszert leíró Hamilton-operátor csak kéttest

Coulomb-kölcsönhatást tartalmaz. A tömegközépponti mozgást leválasztottuk. E fejezet további részében atomi egységeket használók ($m_{elektron} = 1, \hbar = 1, e = 1$). A rendszer legalacsonyabb küszöbenergiáját az

$$E_{th} = -\frac{1}{2}\mu_{12} = -\frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},$$

az (m_1^+, m_2^-) alapállapotban levő hidrogénszerű rendszer szolgáltatja. Természetesen, többrészcsekés rendszerek esetén mindig léteznek a fentihez hasonló küszöbenergiák, amelyek felett a rendszer két vagy több részecskéből álló alrendszerekre bomlik. Vagyis amennyiben a rendszer a legalacsonyabb küszöb feletti energiaértékkel bír, akkor a rendszer nem stabil, ezért elbomlik. Egy rendszerről akkor mondjuk, hogy stabil ha variációs módszerrel kapott energia-sajátértéke (mely felső korlátja az egzakt értéknek) a legalacsonyabb küszöbenergia alatt van.

Az (m_1^+, m_2^-, m_3^-) háromtest-rendszer esetén elképzelhető, hogy amikor a rendszer energiája a kéttest küszöb felett van (az atom alapállapot energiája), azonban az $(m_1^+, m_2^-, m_3^-) \rightarrow (m_1^+, m_2^-)_{a.á.} + m_3^-$ bomlás a paritásértés miatt nem valósulhat meg, akkor a kéttest-alrendszer (az atom) valamely gerjesztett állapota lesz a küszöb, és a bomlás az $(m_1^+, m_2^-, m_3^-) \rightarrow (m_1^+, m_2^-)_{g.á.} + m_3^- \rightarrow (m_1^+, m_2^-)_{a.á.} + m_3^- + \gamma_{g.á. \rightarrow a.á.}$ formában valósul meg, ahol a.á.-tal az atom alap állapotát és g.á.-tal pedig ennek valamely gerjesztett állapotát jelöltem. Ezt nevezük metastabilitásnak.

Négy vagy több részecskéből álló rendszerek esetén nem könnyű megmondani, hogy melyik a legalacsonyabb küszöbenergia, hiszen egy $(m_1^+, m_2^+, m_3^-, m_4^-)$ rendszer esetén a küszöb függ a rendszert alkotó részecskék tulajdonságaitól is. Egy négy megkülönböztethető részecskéből álló rendszer esetén a lehetséges bomlási útvonalak:

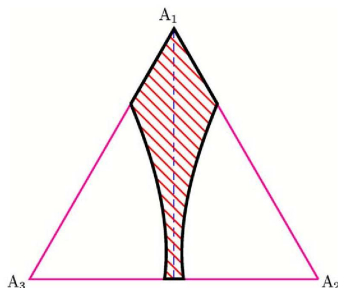
$$(m_1^+, m_2^+, m_3^-, m_4^-) \rightarrow \begin{cases} (m_i^+, m_j^+, m_k^-) + m_l^- & (i j k l) = (1 2 3 4) \\ (m_i^-, m_j^+, m_k^-) + m_l^+ & (i j k l) = (1 2 3 4), \\ (m_i^+, m_j^-) + (m_k^- + m_l^-) & (i j k l) = (1 2 3 4) \end{cases}$$

ahol $(i j k l) = (1 2 3 4)$ -vel az indexek egy adott sorrendjét és ezek egyéb lehetséges cirkuláris permutációját jelöltem.

A legalacsonyabb küszöb meghatározása, a fenti bomlási utakat tekintve, már négytest-rendszerek esetén is több alrendszer vizsgálatát követeli meg. Különbözőn megvizsgálva ezeket, egyértelműen eldönthetjük, hogy melyik küszöbhez

kell viszonyítanunk a rendszer stabilitását. Érdekességképpen említeném meg az $(e^-, e^-, e^+, e^+, x^+)$ öttest rendszert, ahol x egy fiktív részecske, amely sem nem elektron sem nem pozitron. Változtatva az x tömegét, a rendszer küszöbenergiáját a $\sigma = m_e/m_x < 1$ tömegarány tartományban az $(e^-, e^-, e^+, x^+) + e^+$ szolgáltatja. $\sigma = 1$ esetén a (e^-, e^-, e^+, x^+) és Ps_2 alrendszerek alapállapotú energiája azonos, így a $\sigma \geq 1$ tömegarányoknál már az $(x^+ + \text{Ps}_2)$ öttest-rendszer lesz a legalacsonyabb küszöb. $m_x \approx 0.56m_e$ tömegértéknél fog majd a rendszer az $(x^+ + \text{Ps}_2)$ bomlási útvonal szerint disszociálni.

Az $(m_1^\pm, m_2^\mp, m_3^\pm)$ egységnyi töltésekből felépített háromtest-rendszereket részletesen tanulmányozták az elmúlt időszakban [9] és az ott található hivatkozások. Azt találták, hogy a rendszer stabilitási tartománya a 2.1. ábrán szemléltetett, besávozott terület szerint alakul.



2.1. ábra. Az (m_1^+, m_2^-, m_3^-) egységnyi töltésekből felépített háromtest-rendszer stabilitási tartománya a tömegarányok függvényében.

Minden (m_1^+, m_2^-, m_3^-) rendszer egy pontnak felel meg az egységnyi magasságú $(2\sqrt{3}/3)$ oldalú $A_1A_2A_3$ egyenlő oldalú háromszög alakú zárt lemezen. E pontot az jelöli ki, hogy az A_i ponttal szembenfekvő oldaltól vett távolsága $\alpha_i = \frac{m_i^{-1}}{m_1^{-1} + m_2^{-1} + m_3^{-1}}$, $(i = 1, 2, 3)$. E konstrukció azért értelmes, mert az egyenlő oldalú háromszög bármely pontjának az oldalaktól vett távolságainak összege egyenlő a háromszög magasságával. A fenti geometriai tétel egyszerűen bizonyítható.¹ Továbbá innen következik az is, hogy az $A_1A_2A_3$ háromszög magassága nem más,

¹A rendszerre jellemző pontot összekötve a háromszög csúcaival, három darab α_i magasságú háromszögre tagolódik az $A_1A_2A_3$ háromszög. A kisháromszögek területeinek az összege egyenlő az $A_1A_2A_3$ egyenlő oldalú háromszög területével, és ezáltal a tétel bizonyítást nyert.

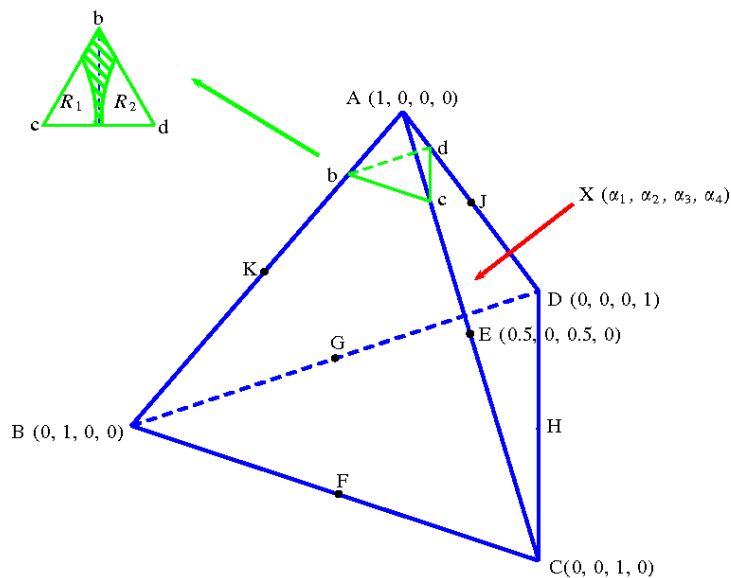
mint $\sum_{i=1}^3 \alpha_i = 1$. Hasonló ábrát kapunk a töltéskonjugált (m_1^-, m_2^+, m_3^+) rendszerekre is. Ily módon az „anti-rendszerek” stabilitására viszonylag könnyen lehet következtetéseket levonni.

Az előbbieket alapján belátható, hogy az (M^+, m^-, m^-) típusú ionok mindig stabil rendszert alkotnak, hiszen változtatva az M tömeget, a rendszert jellemző pont az A_1 csúcsból kiinduló oldalfelező merőlegesen mozog. Emiatt egy pozitív töltésű magból és elektrontól álló semleges rendszer képes bekötni egy újabb elektront. A fenti rendszer két végletes példája a H^- hidrogén-, valamint a Ps^- pozitronium-ionok. A H^- hidrogénion az alapesete a háromtest–Coulomb-rendszereknek, ezért nagyon sokat tanulmányozták. Az elektronnak hidrogénezen való szórására vonatkozó kísérletek és az elméleti számítások sok különleges tulajdonságra mutattak rá. Már a kvantummechanika kezdeti időszakában egy elég pontos felső határát határozták meg a H^- egyetlen, (szingulett) kötött állapot energiájának [43, 44]. Ezen az értéken különféle variációs próbafüggvényeket használva sokan javítottak, ezáltal egy referenciarendszert hozva létre az új közelítő eljárások pontosságának ellenőrzésére. A másik sokat tanulmányozott véglet-rendszer a Ps^- pozitroniumion, amelynek létezését Wheeler 1946-ban jósolta meg [16], és amelyet Mills 1981-ben [17] kísérletileg meg is talált. Ez a rendszer töltés szempontjából teljes mértékben megegyezik a H^- ionnal az egyetlen különbség az, hogy a protont helyettesítő pozitron tömege az elektronnéval egyenlő. A Ps^- diszkrét energiaspektruma teljesen hasonló a H^- ionéhoz, itt is csak egyetlen szingulett, kötött állapotot találtak. Időközben arra is fény derült, hogy a Ps^- rendszernek, és sejtésünk szerint a H^- ionnak és a (p^+, e^-, e^+) háromtest-rendszernek is végtelen sok rezonanciaállapota van [A3], amelyekre a dolgozatom második felében részletesen kitérek.

A 2.1. ábra segítségével a tanulmányozni kívánt rendszer stabilitásáról, számítások elvégzése nélkül is információkat nyerhetünk. Az ilyen és ehhez hasonló ábrákból csak azt tudhatjuk meg, hogy a vizsgált rendszer stabil-e. A lehetséges kötött állapotok számáról viszont semmilyen információt nem kapunk. Nem léteznek általános elvek a kötött állapotok számát illetően, azonban néhány speciális esetre léteznek szabályszerűségek. Így az (M^\pm, m^\mp, m^\mp) rendszerek esetén az úgynevezett „összehasonlítási” elv alapján [45], ha $m/M < 0.210101636$, akkor a rendszernek egy és csakis egy kötött állapota van. Amennyiben a rendszer stabil, és $m/M > 0.210101636$, akkor legalább egy kötött állapota biztosan létezik. Tehát bizonyítást nyert az a tapasztalati tény, hogy a H^- -nak csak egy kötött állapota

van. A Ps^- és Ps^+ töltéskonjugált rendszerek esetén a tapasztalatnak megfelelően van legalább egy kötött állapot, míg a H_2^+ rendszernek 19 $L = 0$ eredő impulzusmomentumú kötött állapotáról van tudomásunk. Itt kell megemlítenem, hogy az utóbbi két rendszer az (M^+, M^+, m^-) -nak a két szélsőséges esete, azzal a különbséggel, hogy míg a H_2^+ egy molekuláris ion (két lomhán mozgó nehéz tömegpont és egy megosztott elektron, amely lehetővé teszi a Born–Oppenheimer-közelítés alkalmazását), addig a Ps^+ -nak már nem molekula, a molekuláris jelleg valahol a $\sigma = m/M \approx 0.16$ -nál szűnik meg.

Négy vagy annál több részecskéből álló rendszer stabilitási tartományának a szemléltetése sokkal bonyolultabb. A 2.2. ábra csak a jellegét próbálja meg szem-



2.2. ábra. Az $(m_1^+, m_2^+, m_3^-, m_4^-)$ egységnyi töltésekből felépített négytest-rendszer stabilitási tartománya a tömegarányok függvényében.

léltetni a tartománynak, hiszen nehéz lenne berajzolni. A jellege nagymértékben hasonlít az előző esethez: itt egyenlő oldalú háromszög helyett, egy szabályos teraédert használunk, amelynek valamely lapjával párhuzamos síkkal vett metszetei adják meg a stabilitási tartományt. Az ábra balfelső sarkában erre az esetre vonat-

kozó példa látható. Az ábrázolás azon alapszik, hogy a szabályos gúla mint zárt téridom bármely pontjának az oldallapoktól való távolságainak összege egyenlő a gúla magasságával.

Az ebbe a rendszer családba tartozó legtöbbet tanulmányozott rendszerek közül meg kell említenem az (M^+, M^+, m^-, m^-) alakkal jellemezhetőket, amelyek közé tartozik a H_2 molekula, valamint a Hylleraas és Ore [46] által 1951-ben jósolt Ps_2 „molekula”, amelyet a mai napig nem észleltek a természetben. A H_2 molekulában a protonok tömege sokkal nagyobb az elektronokénál, míg a dipozitroniumban az összes tömeg egyenlő. A H_2 molekulának több kötött állapota van, a Ps_2 -nek viszont csak két kötött állapotáról tudunk [42]. Egy másik, az utóbbi időben sokat tanulmányozott (M^+, M^-, m^+, m^-) atom-antiatom csoportot is meg kell említenem. Az ilyen rendszerek az anyag-antianyag kölcsönhatásának vizsgálata szempontjából érdekesek. Ezen rendszerek legtanulmányozotabb példányai a $H-\bar{H}$ valamint az ellentétes szélsőség $Ps-\bar{Ps}$, ami nem más, mint a Ps_2 . Végezetül megemlítem a (M^+, m^+, m^-, m^-) típusú rendszereket is, amelyek közül a legismertebb HPs hidrogén-pozitronium hibrid, amelyet 1947-ben jósoltak meg és indirekt módon 1992-ben észleltek [19], és amelyről bebizonyosodott, hogy van kötött állapota. Az elmúlt időszakban ezen rendszereket különböző elméleti számításokkal elég alaposan tanulmányozták [20]. Mielőtt áttérnék a saját eredményeim tárgyalására, fel szeretném hívni a figyelmet arra, hogy azon rendszerek, amelyek valamely részecske mellett tartalmazzák az antirészecske párjait is, nem stabilak ugyan, hiszen annihilálhatnak, de élettartamuk elég hosszú ahhoz, hogy első közelítésben stabil, kötött rendszerként kezeljük őket.

2.2. Öt és hat testből álló Coulomb-rendszerek

Köztudott, hogy a töltött részecskékből álló rendszerek kémiai kötése nagymértékben függ a részecskék tömegétől. A (p^+, e^-, e^-) , (p^+, p^+, e^-) és (e^+, e^+, e^-) rendszerek struktúrája, kötött állapotainak száma nagymértékben különbözik, ezen részecskék más kombinációi, pl. (p, e^+, e^-) , pedig egyáltalán nem alkotnak kötött rendszert. A nukleáris centrumokból és néhány elektrontól felépített kis molekulák kötött állapotai jól ismertek, azonban az egységnyi töltésű részecskékből (pl. e^- , e^+ , μ^- , p , d , t stb.) álló rendszerek stabilitásáról, egyáltalán a létezésükről, jóval

kevesebbet tudunk annak ellenére, hogy a három és négy részecskét tartalmazó rendszereket különböző tömegarányokra behatóan tanulmányozták [13, 14, 15].

Az ilyen egzotikus rendszerek iskolapéldájának tekinthető a (e^+, e^-, e^-) pozitronium ion, vagy az (e^+, e^+, e^-, e^-) részecskékből álló Ps_2 molekula, illetve a (p^+, e^-, e^+, e^-) PsH pozitronium-hidrogén négytest-rendszer. Legújabban, a PsH rendszerhez „ragasztott” pozitronnal alkotott új $e^+\text{PsH}$ -ról derült ki, hogy stabil rendszert alkot [42]. Ezen kevés számú részecskékből álló stabil rendszerek léte sugallja azt a kérdést, hogy a molekulákhoz hasonlóan lehetséges-e nagyobb stabil rendszereket is létrehozni pozitronok segítségével. Így például az egyik igen érdekes kérdés az, hogy m darab elektrontól és n darab pozitrontól álló rendszer kötött-e (pl. $(3e^-, 3e^+)$), vagy képes-e bekötni a stabil atom vagy molekula egy pozitront, pozitroniumot, Ps^- iont vagy Ps_2 dipositroniumot (pl. Lie^+ , LiPs).

A pozitronos atomokat, elméleti úton sokat tanulmányozták az elmúlt években [22, 23, 24, 25, 26, 27], bár kísérletileg még nem sikerült őket kimutatni annak ellenére, hogy a lehetséges észlelési eljárásokat is kidolgozták már [28]. Nem léphetek tovább anélkül, hogy a fizika egy másik területének az érdekeltségéről ne említsek néhány szót. A szilárdtest-fizikai kutatásokban nagy érdeklődés mutatkozik a félvezetőben levő excitonkomplexek (elektronok (e) és lyukak (h) rendszere) iránt [29, 10]. A fő motiváció az ezirányú kutatások iránt abban keresendő, hogy az elektronok és lyukak rekombinációjából származó fotonokkal javíthatnánk a lézerek, fotodiódák minőségét, valamint az excitonkomplexekkel modellezett félvezetők tulajdonságainak a pontosabb megismeréséhez is közelebb kerülhetnénk. Az atomfizikai rendszerekre kapott eredmények, illetve számítási eredményeim ezen effektív tömegekkel jellemzett komplexekre egyszerűen átvihetők. Az excitonkomplex létezésére vannak kísérleti bizonyítékok is [30, 31, 32, 33].

A coulomb-i néhánytest-rendszerek stabilitására vonatkozó előrejelzések tehát kifinomult számításokat igényelnek. A nehézségek részben abból adódnak, hogy az azonos, illetve különböző töltésű részecskék közötti korreláció nem azonos, hiszen más jellegű a kölcsönhatás – vonzó vagy taszító – annak függvényében, hogy milyen a vizsgált két részecske töltése. Egy másik nagyon fontos tényező a kötés szempontjából a Pauli-elv. Azonos részecskéket tartalmazó fermionokból álló rendszerek teljes hullámfüggvénye antiszimmetrikus kell legyen. Ez a feltétel nagymértékben korlátozza a részecskék fázisterének nagyságát, és nem mindig engedi meg, hogy a naivan elképzelt legalacsonyabb energiájú állapot betöltődjék. A har-

madik tényező, amellyel számolni kell az az, hogy a gyengén kötött rendszerek kötési energiájának meghatározásához különösen nagy pontosságú számításokra van szükség.

A továbbiakban némi kiegészítést tesztek az előző fejezetekben bemutatott általános elmélettel kapcsolatban. Az (1.6) egyenlettel értelmezett Hamilton-operátor Coulomb-kölcsönható rendszerekre a következőképpen alakul:

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 - T_{c.m.} + \sum_{i<j}^N \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} . \quad (2.3)$$

A részecskék egységnyi töltésűek, így $|q_i| = 1$, továbbá mivel a számításokban atomi egységeket (a.u.) használók, így az energia hartree-ban $H (= m_e e^4 / \hbar^2)$, míg a távolság Bohr-sugárban ($a = \hbar^2 / m_e e^2$) értendő, ahol m_e az elektron tömegét jelöli.

Számításainkban a tanulmányozott rendszerek alapállapotára voltunk kíváncsiak, és feltételeztük, hogy a rendszerek teljes impulzusmomentuma, és a csatolási csatorna valamennyi rész impulzusmomentuma is nulla ($l_1 = l_2 = \dots, l_N = L_{12} = L_{123} \dots = L = 0$), amely a *globálisvektor-reprezentációs* formalizmusban a $K = 0$ esetnek felel meg. Az előzőekben elmondottak alapján, az 1.2.3. és 1.2.4. alfejezetekben szereplő néhány fontosabb összefüggés nagymértékben leegyszerűsödik. Így a generátorfüggvény $g(\mathbf{s}; A, \mathbf{x}) = g(0; A, \mathbf{x}) \equiv e^{-\frac{1}{2} \bar{\mathbf{x}} A \mathbf{x}}$ -vá alakul, továbbá a bázisfüggvény a:

$$\psi_i(\mathbf{x}) = e^{-\frac{1}{2} \bar{\mathbf{x}} A_i \mathbf{x}} \mathcal{Y}_{00}(\hat{\mathbf{x}}) \chi_{SM_S} \quad (2.4)$$

alakra módosul, és a két bázisfüggvény átfedési integrálja pedig

$$\langle \psi_i(\mathbf{x}) | \psi_j(\mathbf{x}) \rangle = \mathcal{C} \int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2} \bar{\mathbf{x}} (A_i + A_j) \mathbf{x}} = \mathcal{C} \left(\frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(A_i + A_j)} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.5)$$

lesz, ahol $\int d\mathbf{x} \equiv \int x_1^2 dx_1 \dots \int x_{N-1}^2 dx_{N-1}$ valamint a \mathcal{C} együttható magába foglalja a szögek szerinti integrál értékeket és a spin-hullámfüggvények mátrixelemét. Ily módon, a relatív koordinátáktól függő kölcsönhatási operátor mátrixelemére azt kapjuk, hogy:

$$\langle \psi_i(\mathbf{x}) | V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) | \psi_j(\mathbf{x}) \rangle = \langle \psi_i(\mathbf{x}) | \psi_j(\mathbf{x}) \rangle \left(\frac{c_{\alpha\beta}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int V(\mathbf{r}) e^{-\frac{1}{2} c_{\alpha\beta} r^2} d\mathbf{r}, \quad (2.6)$$

ahol

$$\frac{1}{c_{\alpha\beta}} = \widetilde{w^{(\alpha\beta)}} (A_i + A_j)^{-1} w^{(\alpha\beta)}. \quad (2.7)$$

A $\widetilde{w^{(\alpha\beta)}}$, $w^{(\alpha\beta)}$ sor-, illetve oszlopmátrixokat az (1.8) összefüggés segítségével értelmeztük. Szférikus kölcsönhatások esetén a (2.6) mátrixelem jobb oldalán szereplő integrál analitikusan kiszámítható. A Coulomb-kölcsönhatás ($\alpha = -1$) esetén a következőt kapjuk:

$$\int r^\alpha e^{-\frac{1}{2}cr^2} d\mathbf{r} = 2\pi \left(\frac{2}{c}\right)^{\frac{\alpha+3}{2}} \Gamma\left(\frac{\alpha+1}{2} + 1\right), \quad (2.8)$$

ahol a (2.7) egyenlettel értelmezett mennyiséget az egyszerűség kedvéért c -vel jelöltem. A fenti integrált kell akkor is kiszámítani, ha két részecske közötti távolságra vagyunk kíváncsiak, például $\langle r^2 \rangle$ esetén ($\alpha = 2$).

Végezetül, mielőtt belekezdenék a számítási eredményeim tárgyalásába, említést kell tennem a bázisfüggvény spintől függő részéről. A Hamilton-operátor nem függ a spintől, és a teljes impulzuszómomentum nulla, a hullámfüggvény térbeli és spintől függő részre faktorizálódik. Továbbá a legmélyebb energiájú állapotokra voltunk kíváncsiak, amelyhez a legszimmetrikusabb térbeli rész tartozik. Ez a Pauli-elv miatt azt vonja maga után, hogy a spinrész hordozza az antiszimetriát. Jelölje $|sm_s\rangle = |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ a fermion spinhullámfüggvényét. Két azonos részecske (fermion, mindaddig amíg erről másképp nem szólok) antiszimetrikus spinhullámfüggvénye:

$$\chi_{SM_s} = \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle],$$

három fermion esetén pedig:

$$\chi_{SM_s}^{S_{12}} = \begin{cases} \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle] \\ \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^1 = \frac{1}{\sqrt{6}} [2|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle] \end{cases}.$$

Az elkövetkezőkben az egységnyi töltésű különböző öt-, illetve hattest-rendszerekre végzett számítási eredményeimet mutatom be. A nehéz részecskéket M^+ vagy M^- szimbólumokkal jelölöm töltésüktől függően, a könnyűeket pedig m^+ -val vagy m^- -val. Ha valamely ismert részecskéről van szó (pl. proton, elektron, müon és ezek antirészecskéi), akkor a megszokott jelöléseket használom. A vizsgált rendszerek mindig valamely ismert atomfizikai rendszer általánosításai.

A számításokat a Varga K. által megírt *SVM* FORTRAN-program segítségével végeztem el [11].

Kétféle konvergencia fogalom is szerepel a számításaimban. Az egyik a energiában való konvergencia, a másik pedig a hullámfüggvényben való konvergencia. Egy állapot energiaértékéről akkor állítjuk, hogy bekonvergált, ha a báziselem növeléssel az energiaértékbeli növekedés kisebb egy általunk megadott pontosságnál. A számítás pontossága és a konvergencia további ellenőrzésére ad lehetőséget a viriál-tétel [10], amely szerint: ha Ψ sajátfüggvénye a $H = H_0 + V$ Hamilton-operátornak, akkor teljesül a következő egyenlőség: $2\langle\Psi|H_0|\Psi\rangle - \langle\Psi|V|\Psi\rangle = 0$. Vagyis az $\eta = \left| \frac{\langle\Psi|V|\Psi\rangle}{2\langle\Psi|H_0|\Psi\rangle} - 1 \right|$ mennyiség minél közelebb áll a nullához, a bekonvergált energiaérték mellett, annál közelebb vagyunk az egzakt megoldáshoz. Ezt a konvergencia feltételt a hullámfüggvénybeli konvergenciának is nevezhetjük.

2.2.1. (m^+, m^+, m^+, m^-, m^-)

Az első tanulmányozott rendszer öt azonos tömegű részecskéből áll. A négy azonos töltésű (pozitív vagy negatív) és egy ellentétes töltésű részecskéből álló rendszer, mint ismertes nem kötött [10]. Három pozitív és két negatív (vagy a három negatív és két pozitív) töltésű részecske rendszere csak akkor kötött, ha a részecskékről feltételezzük, hogy bozonok, vagy ha a három azonos részecskéből valamelyiket megkülönböztetjük a többitől. Ezen a példán keresztül is megtapasztalható a Pauli-elv tiltó hatása, amely magyarázza, hogy a három elektrontól és két pozitrontól álló rendszer miért nem kötött, vagyis a Ps_2 miért nem képes bekötni egy újabb elektront. Ha azonban a harmadik pozitív töltésű részecskét „bozonként” kezeljük, vagy megkülönböztetjük társaitól, a rendszernek lesz kötött állapota.

2.1. táblázat. *Azonos tömegű, egységnyi töltéssel rendelkező N-test rendszerek alapállapotú energiája atomi egységekben megadva.*

N	Rendszer	Fermionként	Bozonként
2	Ps	-0.250000	-0.250000
3	Ps^\pm	-0.26200	-0.26200
4	Ps_2	-0.516004	-0.516004
5	Ps_2^\pm	nem kötött	-0.556489

A 2.1. táblázatban, néhány azonos (m_e elektrontömegű) „bozonból”, illetve „fermionból” álló rendszer alapállapoti energiáját adtam meg. A Ps^- ion és Ps_2 „molekula” (dipozitrónium) jól ismert példák erre az esetre. Az is szembetűnő, hogy $N = 4$ részecskeszámig a rendszerek alapállapoti energiája egyenlő, függetlenül attól, hogy bozonként vagy fermionként kezeljük őket. Bozonként, a részecskéket spin nélkülinek tekintettük, és engedték, hogy a variációs eljárás a hullámfüggvény térbeli részét szimmetrikussá tegye az azonos részecskék koordinátáinak felcserélésével szemben. A fermionok feles spinűek, ezért a térbeli hullámfüggvény csak páronként tud szimmetrikus lenni. A páratlan részecske miatt a térbeli szimmetria bonyolultabb, és az explicit antiszimmetrizálás határozza meg. Azonos tulajdonságú de megkülönböztethető részecskékből álló rendszerek nem léteznek a természetben. Számításaink arra jók, hogy a kötési mechanizmust feltárjuk és kiindulópontjául szolgáljanak egy (e^-, e^-, e^+, e^+, x) rendszer stabilitásának vizsgálatához. A fermionokból felépített $(3e^+, 3e^-) |SM_S\rangle = |00\rangle$ legszimmetrikusabb spinállapotba csatolt hattest-rendszer energiája -0.7644337 a.u. A legalacsonyabb küszöb a $\text{Ps}_2 + \text{Ps}$ bomlási csatorna energiája pedig -0.766004 a.u. Vagyis a $(3e^+, 3e^-)$ hattest-rendszer nem kötött, és feltételezéseink szerint a (ne^+, me^-) többtest-rendszerek amennyiben fermionokként kezeljük az alkotó elemeket, ha $n, m > 2$ nem alkotnak kötött rendszert.

2.2.2. $(M^+, M^+, M^+, m^-, m^-)$

Az alcímbe szereplő rendszer egyik legismertebb példája a H_3^+ molekuláris ion. Szemléletesen úgy képzelhetjük el, hogy a három proton egy egyenlő oldalú háromszög csúcspontjaiban helyezkedik el, megosztva a két elektronnal. A [34] munka szerint az ilyen típusú rendszer $(0 < \sigma = m/M < 0.2)$ tömegarány-intervallumban stabil. Ha a nehéz részecskéknél M tömegét $5m$ alá csökkentjük, a rendszer a (M^+, M^+, m^-, m^-) molekulára és egy M^+ nehéz pozitív ionra bomlik. Ez a megfigyelés az előző fejezetben leírtakkal összhangban van, hiszen az $(m^+, m^+, m^+, m^-, m^-)$ ($\sigma = 1$) rendszer már nem kötött. Ezen eredmény azt mutatja, hogy a H_3^+ molekula akkor válna instabillá, ha a protonok tömege 5 elektrontömeg alá csökkenne. Továbbá, a stabilitás akkor is megmarad, ha ebben az öttest-rendszerben az elektronokat nehezebb részecskével helyettesítenénk. Ilyen egzotikus rendszerekre találunk példát a 2.2.–2.4. táblázatokban. A 2.2. táblázat B-

2.2. táblázat. *Néhány egzotikus öttest-rendszer energiája és egyéb fizikai tulajdonságai atomi egységekben kifejezve. r_{ab}^2 az „a” és „b” részecskék közötti négyzetes átlagtávolságot jelöli. Feltüntettük a legalacsonyabb küszöbenergiákat is. Számításainkban a következő tömegértékeket használtuk: $m_p=1836.1527m_e$, $m_d=3670.4827m_e$, $m_t=5496.92158m_e$, $m_{\mu^-}=206.76826m_e$, ahol m_e az elektron tömegét jelöli, és $\eta = -\langle 2H_0 \rangle / \langle V \rangle$ (egzakt értéke 1).*

csoport	rendszer	küszöb
B	$(p^+, p^+, p^+, \mu^-, \mu^-)$	(p^+, p^+, μ^-, μ^-)
E	-203.10453	-199.63069
η	0.999984	0.999998
$r_{p^+p^+}^2$	4.28×10^{-4}	1.47×10^{-4}
$r_{\mu^-\mu^-}^2$	2.93×10^{-4}	2.35×10^{-4}
$r_{p^+\mu^-}^2$	3.32×10^{-4}	1.35×10^{-4}
C	$(p^+, p^+, e^-, e^-, \mu^+)$	(p^+, p^+, e^-, e^-)
E	-1.296583	-1.164023
η	0.999741	0.999989
$r_{p^+p^+}^2$	3.86	2.26
$r_{e^-e^-}^2$	5.63	5.92
$r_{p^+\mu^+}^2$	4.15	
$r_{e^-\mu^+}^2$	4.48	
$r_{p^+e^-}^2$	3.77	3.22

vel jelölt rendszere felel meg az $(M^+, M^+, M^+, m^-, m^-)$ esetnek. A müon és proton tömegének aránya ($\sigma = 0.11$) jóval nagyobb a hidrogénatoménál ($\sigma = 0.0005$). A $p^+\mu^-$ atom energiája -92.92 a.u. és a közöttük levő négyzetes átlagtávolság pedig $r_{p^+\mu^-}^2 = 8.6 \times 10^{-5}$ atomi egység. A két $p^+\mu^-$ atomból létrehozott molekula, akár a hidrogénmolekula, erősen kötött, hiszen minden (M^+, M^+, m^-, m^-) rendszer, ha $m < M, M'$ mindig kötött, függetlenül az M/M' tömegaránytól. Legyen $w = E_{\text{kötési}}/\mu = (E_{\text{küszöb}} - E_{\text{rendszer}})/\mu$, ahol $\mu = \frac{Mm}{M+m}$. A (p^+, p^+, μ^-, μ^-) rendszer esetén $w \approx 0.07$, míg a $(p^+, p^+, p^+, \mu^-, \mu^-)$ rendszerre $w \approx 0.02$ értéket kapunk. Ugyanezen az értékekre a H_2 és H_3^+ molekulák esetén közel 0.16-ot, illetve 0.15-at kapunk, amely tovább erősíti azt a tényt hogy a $(p^+, p^+, p^+, \mu^-, \mu^-)$ sokkal gyengébben kötött rendszert alkot a H_3^+ molekulánál. Ez teljesen egyér-

2.3. táblázat. A 2.2. táblázat folytatása

csoport	rendszer	küszöb
D	$(d^+, e^+, e^+, e^-, e^-)$	(d^+, e^+, e^-, e^-)
E	-0.81007844	-0.7890280
η	1.0000017	0.9999915
$r_{p^+e^+}^2$	31.906	16.2621
$r_{p^+e^-}^2$	7.487	7.8183
$r_{e^-e^-}^2$	15.157	15.8839
$r_{e^+e^+}^2$	65.674	
$r_{e^+e^-}^2$	33.800	15.5881
D	$(p^+, \mu^+, \mu^+, e^-, e^-)$	(p^+, μ^+, e^-, e^-)
E	-1.271788	-1.149679
η	0.999833	0.999614
$r_{\mu^+\mu^+}^2$	4.62	
$r_{e^-e^-}^2$	5.73	6.04
$r_{p^+\mu^+}^2$	4.05	2.36
$r_{e^-\mu^+}^2$	3.95	3.28
$r_{p^+e^-}^2$	3.76	3.89
D	$(p^+, e^+, e^+, e^-, e^-)$	(p^+, e^+, e^-, e^-)
E	-0.8099127	-0.788865
η	1.0000029	0.999991
$r_{p^+e^+}^2$	31.917	16.2709
$r_{p^+e^-}^2$	7.493	7.8242
$r_{e^-e^-}^2$	15.166	15.8941
$r_{e^+e^+}^2$	65.682	
$r_{e^+e^-}^2$	33.808	15.5927

telművé válik, ha a fenti rendszerek esetén összehasonlítjuk a protonok közötti négyzetes átlagtávolságokat: a $(p^+, p^+, p^+, \mu^-, \mu^-)$ rendszerben a protonok sokkal távolabb helyezkednek el egymástól, így ha még jobban növeljük a σ tömegarányt akkor a protonok egyre távolabb kerülnek egymástól, a rendszer egyre kevésbé lesz kötött, majd egy adott tömegarányal a rendszer elbomlik, általában

az $(M^+, M^+, m^-, m^-) + M^+$ bomlási csatorna szerint. A (p^+, p^+, μ^-) ion energiája -102.22 a.u., míg a (p^+, p^+, μ^-, μ^-) molekuláé -199.63069 a.u., s ez tovább erősíti azt az empirikus szabályt, hogy az $(M^+, M^+, m^-) + (M^+, m^-)$ csatorna magassabban fekszik, mint az előzőekben említett $(M^+, M^+, m^-, m^-) + M^+$ -mes.

2.2.3. $(p^+, p^+, e^-, e^-, x^+)$

Ebben az alfejezetben azt az általánosabb esetet tanulmányozom, amikor a H_3^+ molekula egyik nehéz részecskéjének tömegét változtatjuk, hiszen arra vagyunk kíváncsiak, hogy egy molekula képes-e bekötni egy teszőleges tömegű ötödik részecskét. Az 2.3. ábra a rendszer teljes energiáját adja meg a $\sigma = m_e/m_x$ függvényében. Azt látjuk, hogy a rendszer energiája gyorsan lecsökken a H_2 küszöbértékre, és $m_x/m_e = 2.5$ tömegarányánál a rendszer elbomlik egy H_2 molekulára és az x részecskére. Ebből az következik, hogy a H_2 molekula képes bekötni egy pozitívan töltött részecskét, ha annak tömege legalább $2.5 \times m_{elektron}$, tehát a hidrogén molekula beköt egy μ^+ , pozitív töltésű müiont, de egy pozitront már nem (lásd 2.4. táblázat E-vel jelölt része).

A $(p^+, p^+, e^-, e^-, \mu^+)$ rendszer tulajdonságai nagymértékben hasonlítanak a H_3^+ molekuláéhoz azzal a különbséggel, hogy a három nehéz, pozitívan töltött részecske, nem egyenlő oldalú, hanem egyenlőszárú háromszög csúcspontjaiban helyezkedik el oly módon, hogy a protonok közelebb vannak egymáshoz, mint a müionhoz. Ennek megfelelően az elektronok is közelebb helyezkednek el a protonokhoz, mint a müionhoz. Csökkentve az x^+ részecske tömegét a protonok és az x^+ közötti távolság tovább növekszik, az elektronok viszont a protonok körül maradnak. Amint elérjük az $m_{x^+}/m_{e^-} = 2.5$ körüli értéket, a rendszer elbomlik. Egy általánosabb $(M^+, M^+, m^-, m^-, m'^+)$ rendszer tanulmányozása túl nagy feladat lenne, és igazából nem várnánk az előbbitől eltérő viselkedést. A rendszer $m' \approx M$ környékén kötött lenne, és a stabilitását akkor veszítené el, ha az m' tömeg megközelítené az m -et.

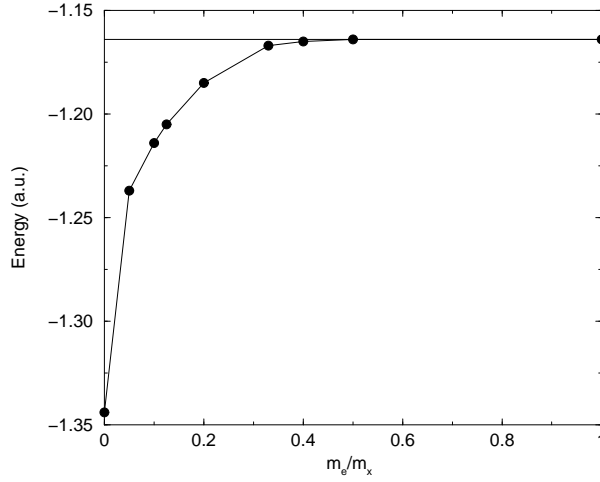
2.2.4. $(M^+, x^+, x^+, e^-, e^-)$

Kiindulási pontnak ez esetben is a H_3^+ molekulát választjuk. Amíg az előző fejezetben csak egy nehéz tömeget változtattunk, addig a mostani rendszerben már

2.4. táblázat. A 2.2. táblázat folytatása

csoport	rendszer	küszöb
E	$(p^+, p^+, e^-, e^-, \mu^-)$	(p^+, p^+, μ^-, e^-)
E	-102.750286	-102.723336
η	0.99999887	1.000000012
$r_{p^+\mu^-}^2$	1.81×10^{-4}	1.81×10^{-4}
$r_{e^-e^-}^2$	23.4847	
$r_{p^+e^-}^2$	11.0676	3.0011
$r_{p^+p^+}^2$	2.89×10^{-4}	2.89×10^{-4}
$r_{e^-\mu^-}^2$	11.0676	3.0011
E	$(d^+, t^+, \mu^-, e^-, e^-)$	(d^+, t^+, μ^-, e^-)
E	-111.889612	-111.864106
η	1.0000135	1.00000034
$r_{t^+\mu^-}^2$	1.26×10^{-4}	1.26×10^{-4}
$r_{d^+\mu^-}^2$	1.37×10^{-4}	1.37×10^{-4}
$r_{t^+e^-}^2$	9.8831	2.9965
$r_{d^+e^-}^2$	9.8831	2.9965
$r_{e^-\mu^-}^2$	9.8831	2.9965
$r_{e^-e^-}^2$	21.1378	
$r_{t^+d^+}^2$	1.93×10^{-4}	1.93×10^{-4}
G	$(p^+, p^+, p^-, e^-, e^-)$	(p^+, p^+, p^-, e^-)
E	-481.605173	-481.580324
η	1.0000016	1.00000029
$r_{p^+p^+}^2$	2.76×10^{-5}	2.76×10^{-5}
$r_{e^-e^-}^2$	21.382	
$r_{p^+e^-}^2$	9.9285	2.995
$r_{p^+p^-}^2$	1.43×10^{-5}	1.43×10^{-5}
$r_{p^-e^-}^2$	9.9285	2.995

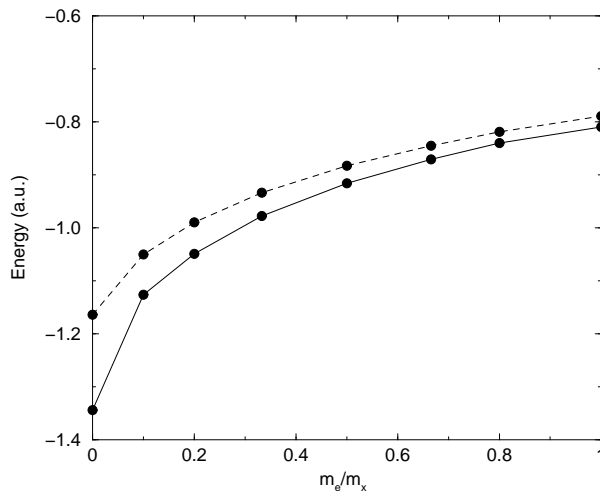
két nehéz részecske tömegét fogjuk egyidejűleg vátoztatni, vagyis a H^- ionhoz két nehéz, pozitív töltéssel rendelkező részecskét adunk hozzá. Ily módon egy stabil $(M^+, x^+, x^+, e^-, e^-)$ rendszer hozható létre. A rendszernek ezúttal több bomlási csatornája is van. 4 + 1 módon bomolhat az $(M^+, x^+, e^-, e^-) + x^+$, vagy



2.3. ábra. A $(p^+, p^+, e^-, e^-, m_{x^+})$ öttest-rendszer energiája az m_e/m_x tömegarány függvényében. A pontok jelölik azokat a tömegarányokat, amelyekre a számításokat elvégeztük. A vízszintes vonal a H_2 molekula szolgáltatta küszöbenergiát adja meg.

az $(x^+, x^+, e^-, e^-) + M^+$ utakon, de $3 + 2$ -es típusú csatornából is kettő van: az $(M^+, x^+, e^-) + (x^+, e^-)$ és az $(M^+, e^-) + (x^+, x^+, e^-)$. A 2.4. ábra a rendszer kötési energiáját adja meg az $m_e/m_x < 1$ tömegarány függvényében, ahol m_e -vel minden esetben az elektron tömegét jelöltük. Rögzítve a nehéz részecske tömegét $M = M_{proton} = 1836.1527m_e$ és feltételezve, hogy az $m_e < m_x$ kiderült, hogy a legalacsonyabban fekvő elbomlási küszöb valamelyik $4 + 1$ csatornáé, de a két lehetőség közül mindig csak a rendszer paramétereinek ismeretében tudjuk eldönteni, melyik küszöb a legalacsonyabb. Kötött $(M^+, x^+, x^+, e^-, e^-)$ típusú rendszerre példákat a 2.3. táblázat D-vel jelzett részeiben találunk, nevezetesen a $(p^+, \mu^+, \mu^+, e^-, e^-)$, illetve a $(p^+, e^+, e^+, e^-, e^-)$ rendszereket. Ez utóbbit a 2.2.8. fejezetben részletesebben is tanulmányozom. A 2.2.–2.4. táblázatok szerint, mind a $(p^+, \mu^+, \mu^+, e^-, e^-)$, mind a $(p^+, p^+, \mu^+, e^-, e^-)$ (lásd 2.2.5. fejezetet) rendszerek teljes energiája közel áll a H_3^+ molekulájéhoz. A proton (protonok) és a müonok (müon) egy egyenlőszárú háromszög csúcspontjaiban helyezkednek el, de a $(p^+, \mu^+, \mu^+, e^-, e^-)$ rendszer esetén, szemben a $(p^+, p^+, e^-, e^-, \mu^+)$ -val az azonos részecskék közötti távolság nagyobb, így a háromszög alapja nagyobb, mint a szára.

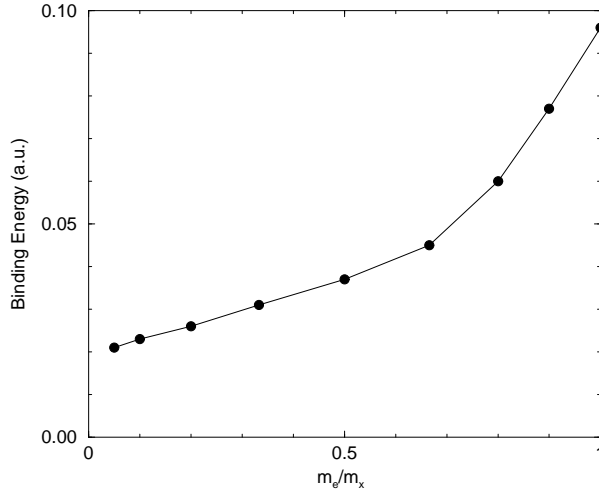
Észrevehető azonban az is, hogy az m_e/m_x tömegarányt 0 és 1 között változtatva, a rendszer stabil marad.



2.4. ábra. A folytonos vonal az $(M^+, m_{x^+}, m_{x^+}, e^-, e^-)$ öttest-rendszer energiáját, míg a szaggatott vonal a legalacsonyabb (M^+, m_{x^+}, e^-, e^-) rendszer szolgáltatta küszöbenergiát adja meg az m_e/m_x függvényében.

2.2.5. $(M^+, M^+, e^-, e^-, x^-)$

Egy másik coulomb-i öttest-rendszer, amely nagy figyelmet kapott az a H_2^- ion. Igaz, hogy ez a rendszer nem kötött (a Pauli-elv tiltó hatása miatt), azonban a $H-H^-$ magok közötti távolság függvényében, Born–Oppenheimer-közelítésben meghatározott energia-görbének a $3.5 a.u.$ magtávolság környékén van vonzó tartománya. Ebből arra lehet következtetni, hogy a rendszer rendelkezhet metastabil, azaz rezonanciaállapottal (állapotokkal). Amennyiben a hidrogénmolekulához egy x^- az elektronnal azonos tulajdonságú, de ettől megkülönböztetett részecskét adunk hozzá, a rendszer kötötté válik, igaz nem túl erős, körülbelül $0.096 a.u.$ kötési energiával. Tehát egy x^- részecske, elég széles tömegarány-tartományon belül, hozzáragadhat a H_2 molekulához, mivel a Pauli-elv ennek mozgását nem korlátozza. A 2.5. ábra a $(p^+, p^+, e^-, e^-, x^-)$ általános eset $M = M_{proton}$ speciális



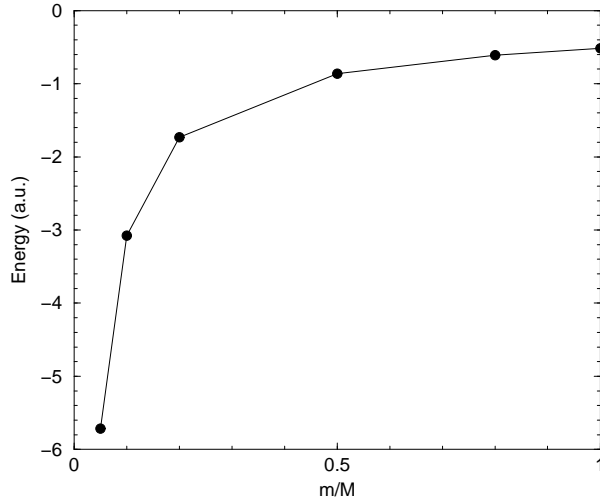
2.5. ábra. A $(p^+, p^+, e^-, e^-, x^-)$ öttest-rendszer kötési energiája az m_e/m_x tömegarány függvényében, atomi egységekben.

esetére adja meg a rendszer kötési energiáját az m_e/m_x tömegarány függvényében. Ez esetben a legalacsonyabban fekvő négytest-küszöb az (M^+, M^+, e^-, x^-) rendszer, amely alacsonyabb energián van az (M^+, M^+, e^-, e^-) molekula alapállapotánál. A számítások egyáltalán nem egyszerűek, mivel a rendszer energiája és jellemzői nagymértékben függenek az m_x/M tömegaránytól is. Az (M^+, M^+, x^-) alrendszert vizsgálva, $m_x/M \approx 0$ határesetben a pozitív hidrogén molekuláris iont kapjuk vissza, míg ha $m_x/M \approx 1$, akkor a rendszer átmegy a Ps^+ ionba. Figyelembevéve a nehéz részecskék tömegeit, a rendszer mérete sokkal kisebb lesz a Ps^+ ionénál, így ez a kisméretű (M^+, M^+, x^-) rendszer egységnyi pozitív töltésű részecskéként fog viselkedni. Az (M^+, M^+, x^-) -t alkotó részecskék közötti távolság sokkal kisebb, mint a rendszer tömegközéppontja és a befogott elektron közötti távolság. Ily módon az (M^+, M^+, x^-) befoghat egy- vagy több elektront megalakítva az $(M^+, M^+, e^-, e^-, x^-)$ rendszert, amely valójában egy H^- -hoz hasonlító ionként viselkedik. Ha az x^- részecskét, egy elég nehéz μ^- -nal helyettesítjük, akkor a (p^+, p^+, μ^-) , az előzőekben elmondottak értelmében a (p^+, p^+, e^-, μ^-) és a $(p^+, p^+, e^-, e^-, \mu^-)$ rendszerek is kötötté válnak. Ezek az állítások akkor is igazak maradnak, ha a két nehéz részecske tömegét kissé változtatjuk, pontosab-

ban, ha $1/3 < M_1/M_2 < 1$, az $(M_1^+, M_2^+, e^-, e^-, m_{x^-})$ rendszer stabil marad. A négy különböző tömegű részecskéből felépített rendszer stabilitási tartományának a keresésére irányuló rendszeres számítások, túl bonyolultak volnának, hiszen legalább három m/M_i tömegarány szerint kellene ezeket vizsgálni. Néhány speciális esetre, azonban elvégeztük a számításokat, ezeket a 2.4. táblázat E-vel jelölt részében mutatjuk be. Ezek az eredmények az előző állításainkat igazolják. E szerint a (t^+, d^+, μ^-) molekuláris ion képes bekötni egy vagy két elektront, és ezeket az öttest-rendszereket durván $[(p^+, p^+, \mu^-), e^-, e^-]$ és $[(t^+, d^+, \mu^-), e^-, e^-]$ háromtest-rendszerekként képzelhetjük el. A (p^+, p^+, μ^-) és (t^+, d^+, μ^-) ionok a tér egy kis részében koncentrálnak, és a közöttük levő távolság sokkal kisebb, mint a nehéz részecskék és az elektronok közötti távolság, így pozitív töltésként fejtik ki hatásukat, és méretük elhanyagolható. Tekintsük a 2.2.–2.2. táblázatokban bemutatott rendszerek közül a (p^+, p^+, μ^-) esetét. A három nehéz részecskéből álló rendszer energiája -102.2202 a.u. A két proton közötti távolság várható értéke 2.89×10^{-4} a.u., a protonok és a müon közötti pedig 1.81×10^{-4} a.u. Hozzáadva a rendszerhez egy, illetve két elektront a (p^+, p^+, μ^-) alrendszer mérete változatlan marad. A (p^+, p^+, μ^-, e^-) és $(p^+, p^+, \mu^-, e^-, e^-)$ rendszerek kötési energiájára $\varepsilon = (E_{\text{kötési energia}} = E_{\text{küszöb}} - E_{\text{rendszer}})$ 0.50 a.u., illetve 0.027 a.u. adódik és ez teljes mértékben megegyezik a hidrogénatom és a H^- -ion kötési energiájával.

2.2.6. $(M^+, M^-, m^+, m^-, x^+)$

Az $(M^+, M^-, m^+, m^-, x^+)$ rendszer annyiban különbözik a 2.2.3. fejezetben tanulmányozott esettől, hogy egy hidrogénatomot, egy antihidrogénatomra (anti-protonból és pozitronból alkotott semleges rendszer) cseréltük ki. Ennek az öttest-rendszernek a legalacsonyabb küszöbenergiáját az (M^+, M^-, m^+, m^-) alrendszer szolgáltatja, amely nem más, mint a hidrogén-antihidrogén „molekula”. Az irodalomból tudjuk [47], hogy ez a négytest-rendszer nem kötött, ha az m/M tömegarány kisebb 0.45 -nél. Amennyiben az m/M tömegarány kisebb, mint 0.45 a két ellentétes töltésű nehézion egy semleges „atomot” hoz létre, amely már nem képes további részecskék bekötésére, így nem alakul ki öttest-rendszer.

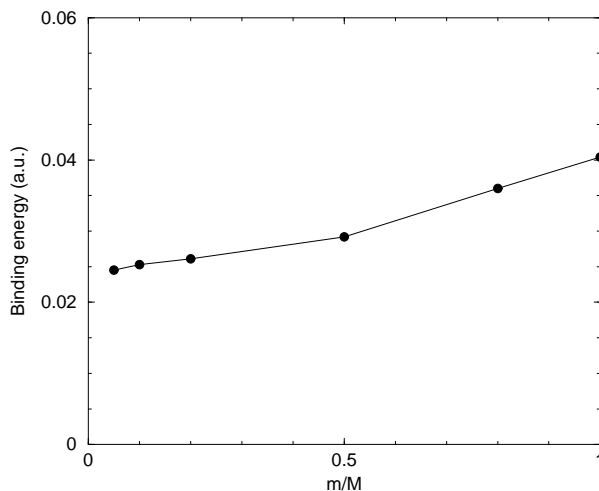


2.6. ábra. Az (M^+, M^+, M^-, m^-) négytest-rendszer energiája az m/M tömegarány függvényében $m < M$ esetén, atomi egységekben. Az eredményeinket az $m = m_e$ esetben ábráztuk, ezeket m/m_e -vel szorozva a valódi energiaértékeket kapjuk.

2.2.7. $(M^+, M^+, M^-, m^-, m^-)$

Az alcímben szereplő rendszer abban különbözik a 2.2.2. fejezetben tárgyalttól, hogy az egyik nehéz pozitív töltést, negatívra cseréltük. Emiatt természetesen az (M^+, M^+, m^-, m^-) helyett az (M^+, M^+, M^-, m^-) négytest-rendszer alapállapotú energiája lesz a legalacsonyabb küszöb. A fenti alrendszer energiájának a $\sigma = m/M$ -tól való függése a 2.6. ábrán látható, az $(M^+, M^+, M^-, m^-, m^-)$ rendszer kötési energiáját pedig a 2.7. ábrán adtuk meg. A 2.4. táblázat G sora tartalmazza a fenti típusú öttest-rendszerek közül az egyik legtipikusabb esetet, nevezetesen a $(p^+, p^+, p^-, e^-, e^-)$, egy antiprotont bekötő hidrogénmolekulát. Belátható, hogy a hidrogénmolekula képes bekötni egy antiprotont, létrehozva egy olyan öttest-rendszert, amely a stabil H_2^- -ra hasonlít. Megengedve azt is, hogy $m > M$ legyen (két negatív töltésű nehéz, 2 pozitív töltésű és egy negatív töltésű könnyű részecskéből álló rendszer), az öttest-rendszer legközelebbi küszöbenergiáját az (M^+, M^+, m^-, m^-) „antihidrogénes” molekula szolgáltatja. Vizsgálataink során (lásd 2.8. ábra) azt találtuk, hogy a $(M^+, M^+, M^-, m^-, m^-)$ rendszer ak-

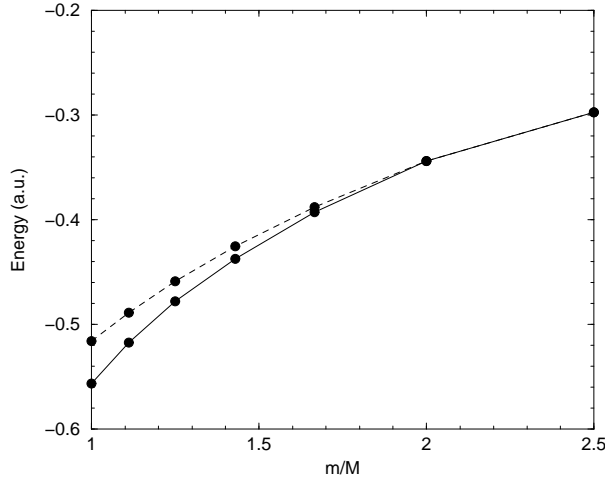
kor kötött, ha a tömegarány $1 < m/M < 2$ értékek között mozog. Két esetet kell



2.7. ábra. Az $(M^+, M^+, M^-, m^-, m^-)$ öttest-rendszer kötési energiája m/M függvényében. Az ábra jelölései megegyeznek a 2.6. ábra jelöléseivel.

megkülönböztetnünk annak függvényében, hogy a m és a M tömegek hogyan viszonyulnak egymáshoz, hiszen a kialakuló rendszerek milyensége, struktúrája függ a $\sigma = m/M$ -tól. Az első esetben $0 < \sigma < 1$ között változhat. Kis σ értékekre a három M tömegű nehéz részecske egy kis kiterjedésű c^+ töltést hoz létre (a 2.2.5. fejezetben tárgyaltakhoz hasonlóan), amely képes bekötni a két könnyű részecskét létrehozva a (c^+, m^-, m^-) rendszert. A c^+ „részecske” egy belső szerkezet nélküli kis egységnyi pozitív töltésű részecskeként viselkedik. A rendszer felépítése és tulajdonságai nagymértékben hasonlítanak a H^- -ionéhoz.

A második esetben, amikor $m > M$, akkor $0 < \sigma^{-1} < 1$. Az $1/\sigma = 0$ határesetben két m^- tömegű, negatív töltésű nehéz ionból és az (M^+, M^+, M^-) három könnyű részecskéből álló C^+ pozitív töltéssel állunk szemben. A C^+ „részecske” az m^- nehéz ionok közelében már nem tekinthető struktúra nélkülinek. Energetikailag sokkal kedvezőbb, hogy az $(M^+, m^-) + (M^+, m^-)$ molekula alakuljon ki, mint a (C^+, m^-, m^-) rendszer, így a kötés valahol a $1/\sigma = 1$ és $1/\sigma = 0$ között bomlik

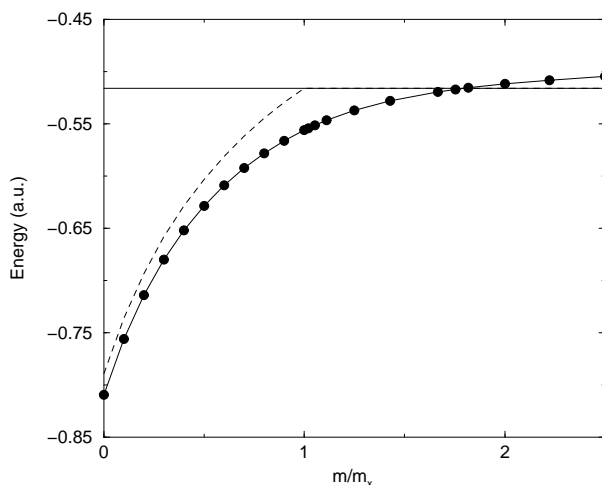


2.8. ábra. A folytonos vonal az $(M^+, M^+, M^-, m^-, m^-)$ öttest-rendszer energiáját jelöli az m/M tömegarány függvényében a $m > M$ esetben. A szaggatott vonal a (M^+, M^+, m^-, m^-) rendszer szolgáltatta legalacsonyabb küszöbenergiát adja meg.

fel.

2.2.8. (e^+, e^+, e^-, e^-, x^+)

Az előző alfejezetekben mindig abból indultunk ki, hogy van két pozitív töltésű nehéz és két negatív töltésű könnyű részecskénk, és ezekhez próbáltunk hozzákötni egy nehéz (könnyű), pozitív (negatív) töltéssel rendelkező részecskét. Másik végletként két pozitív és két negatív töltésű könnyű részecskéből indulunk ki. Erre az esetre példa, a két elektron és a két pozitron. Tekintettel a négy részecske töltéeloszlására, tulajdonképpen nincs jelentősége annak, hogy az ötödik m_x tömegű részecskének milyen a töltése, hiszen a kiindulási rendszer a töltés felcserélésére szimmetrikus. Egy fontos tény azonban meg kell említenem, nevezetesen azt, hogy a számításainkat oly módon végeztük el, hogy az extra x részecskét, megkülönböztettük mind az elektronoktól, mind a pozitronoktól. Az öttest-rendszer kötési energiáját az m_x/m_e tömegarány függvényében a 2.9. ábrán adom meg. Amikor $m_x > m_e$ a legalacsonyabb küszöbenergia az $(x^+, e^-, e^-, e^+) + e^+$ bomlási csator-



2.9. ábra. A folytonos vonal az $(m_{x^+}, m^+, m^+, m^-, m^-)$ öttest-rendszer energiáját jelöli, a vízszintes és a szagott vonalak a Ps_2 molekula, illetve az (m_{x^+}, m^+, m^-, m^-) négytest-rendszer szolgáltatva küszöbenergiát adja meg az m/m_x tömegarány függvényében.

nának felel meg. Ilyen feltételek mellett, az öttest-rendszer minden esetben kötött, és az m_x tömegértéknek a növelésével az öttest-rendszer kötési energiája növekszik. Amelyik pillanatban a megkülönböztetett részecske tömege kisebb az elektron tömegénél, azaz $m_x < m_e$, a küszöbenergiát már egy másik bomlási csatorna fogja szolgáltatni, nevezetesen a $Ps_2 + x^+$. A kötési energia az m_x csökkentésével egyenesen csökken, és az öttest-rendszer közelítőleg $m_x = 0.56m_e$ értéknél elbomlik. Így, amint az $m_x \rightarrow 0.56m_e$ disszociációs határértékhez közelít, az öttest-rendszer szerkezetét egyre inkább az x^+Ps_2 struktúrával közelíthetjük, vagyis a rendszer egy Ps_2 molekulából és egy ehhez gyengén kötődő x részecskéből áll.

A stabilitási vizsgálat során eddig nem vettük figyelembe azt a tényt, hogy a rendszerben az elektronok mellett, antirészecskék, a pozitronok is jelen vannak. A rendszer általunk vett értelemben, a stabilitását nem befolyásolja, de a vizsgálat teljessége végett meg kell említenem az elektron-pozitron párok annihilációját. A leggyakoribb annihilációs folyamat a 2γ -s folyamat, amikor az elektron-pozitron

pár eltűnik, energiájukat és impulzusukat a keletkezett két γ -fotonnak adva át. A folyamat létrejöttének valószínűsége függ attól, hogy milyen valószínűséggel található egy időben, egy elektron és egy pozitron a tér egy adott pontjában, ellentétes spinbeállású (spin szingulett) állapotban (lásd a [24] (21)-es egyenletét). A 2γ -s elbomlás annihilizációs sebessége az összes lehetséges végállapotra való összegzés után [38, 39, 40]:

$$\Gamma = 4\pi c\alpha^4 a_0^2 N_e \langle \Psi | \hat{O}^s \delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p) | \Psi \rangle,$$

ahol c a fény terjedési sebességét, α a finomszerkezeti állandót jelöli, az \hat{O}^s projekciós operátor pedig kiválasztja az elektron-pozitron állapotok lehetséges kombinációi közül azokat, amelyeknek az eredő spinje 0. Az \mathbf{r}_e és \mathbf{r}_p vektorok az elektronok és pozitronok helyzetét adják meg.

2.2.9. Az e^+ PsH rendszer

Az e^+ PsH nem más, mint az előző rendszer egy részesete, amikor az x^+ részecskét protonnal helyettesítjük. A 2.9. ábra tanulsága szerint ez is kötött rendszert alkot, vagyis stabil mind a $\text{H} + \text{Ps}^+$, mind a $p + \text{Ps}_2$, mind a $\text{PsH} + e^+$ bomlási csatornákkal szemben. A legalacsonyabb küszöböt ($-0.789197a.u.$) a $\text{PsH} + e^+$ csatorna szolgáltatja. Ezzel a küszöbvel szemben a rendszer kötési energiája 0.021050 hartree. Az e^+ PsH-t elég részletesen tanulmányoztuk, mivel ez azon egyszerű Coulomb-rendszerek egyike a Ps_2 molekula és a PsH pozitroniumhidrogén mellett, amely képes két pozitron bekötésére.

A 2.5. táblázat tartalmazza az e^+ PsH rendszer néhány fontos tulajdonságát. Összehasonlítva a PsH és az e^+ PsH rendszerek részecskéi közötti relatív távolságokat, azt tapasztaljuk, hogy az elektron-mag vagy az elektron-elektron távolságok majdnem azonosak a két rendszerben. Ebből azt a következtetést vonhatjuk le, hogy egy pozitron hozzáadása nem változtatja meg a rendszer elektron töltéeloszlását. Mindez csak akkor igaz, ha a második megkötött pozitron a magtól nagy távolságra helyezkedik el, hiszen csak az elektronfelhőn kívül levő pozitron nincs hatással az elektron töltéeloszlására. Ezt erősíti az a tény is, hogy a mag-pozitron távolság az e^+ PsH esetén rendelkezik nagyobb értékkel. Továbbá a $2.74 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ értékű annihilációs sebesség is csak 10%-al nagyobb a PsH rendszerénél, ami arra utal, hogy a második pozitron kis valószínűséggel találkozhat a tér általa kedvelt tartományában elektronnal. Tehát elmondható, hogy a második pozitron a PsH

rendszer körül „kering”, elég nagy távolságra helyezkedve el a magtól.

2.5. táblázat. *Ez a táblázat az e^+PsH^∞ öttest-, PsH^∞ négytest- és Ps^- háromtest-rendszerekre jellemző néhány fizikai mennyiséget tartalmazza. K a bázis méretét, $-\langle V \rangle / \langle H_0 \rangle$ a potenciálisenergia-operátor és a kinetikusenergia-operátor várható értékének arányát (pontos értéke 2), E a rendszer energiáját, ε a kötési energiát, az $\langle r \rangle$ pedig két részecske közötti átlagtávolságot adja meg. A proton tömegét a számításainkban végtelennek tekintettük. A Γ annihilációs sebesség kivételével, amelyet $10^9 s^{-1}$ -ben, a mennyiségeket atomi egységben adtam meg.*

Mennyiség	e^+PsH^∞	PsH^∞	Ps^-
K	850	1000	200
$-\langle V \rangle / \langle H_0 \rangle$	1.999980	1.999999	1.9999997
E	-0.810247	-0.789197	-0.26005064
ε	0.021050	—	—
$\langle r_{p^+e^-} \rangle$	2.281	2.312	—
$\langle r_{p^+e^+} \rangle$	4.944	3.662	—
$\langle r_{e^-e^-} \rangle$	3.507	3.575	8.54856
$\langle r_{e^+e^+} \rangle$	7.382	—	—
$\langle r_{e^+e^-} \rangle$	4.966	3.480	5.48962
Γ	2.744	2.470	—

2.2.10. A Li^+Ps_2 és Na^+Ps_2 rendszerek

Az 2.2.8. fejezet tanulsága mutatja, hogy az $(x^+, m^+, m^+, m^-, m^-)$ rendszer széles m_x/m tömegarány-tartományban stabil marad. Ez a tény arra sarkall bennünket, hogy vizsgáljunk meg pozitívan töltött más részecskéket, amelyek képesek bekötni két elektront, valamint két pozitront. Ilyen pozitív ion lehet például a Li^+ kation, amelyről már korábban kimutatták, hogy stabil rendszert alkot a Ps_2 -vel [21, 22]. A kialakult rendszert Li^+Ps_2 -vel jelöljük, hiszen - mint látni fogjuk - ez közelíti meg legjobban a rendszer valódi struktúráját. Noha a rendszer hét részecskéből épül fel (Li^{3+} mag, négy elektron és két pozitron), mégis jónak tűnik öttest-rendszerként kezelni. A Li^{3+} mag ugyanis erősen beköt két elektront (100 eV-nél nagyobb a kötési energiájuk), ennek következtében a $Li^+ = Li^{3+} + 2e^-$ „törzset”,

2.6. táblázat. Az (e^+, e^+, e^-, e^-) és egy pozitív (x^+) töltést tartalmazó rendszerek néhány fontos fizikai mennyisége. A Li^+Ps_2 és Na^+Ps_2 rendszerekre adott átlagtávolságok jelölésében x^+ a Li^+ és Na^+ ionokat jelenti. A mennyiségek magyarázata érdekében lásd a 2.5 táblázat magyarázó szövegét.

Mennyiség	Li^+Ps_2	Na^+Ps_2	$m_x = m_e$	$m_x = 0.7m_e$	Ps_2
K	660	780	600	400	1000
$-\langle V \rangle / \langle H_0 \rangle$	-	-	1.999938	1.999999	-
E	-0.529408	-0.522319	-0.556489	-0.528733	-0.516004
ε	0.013404	0.006315	0.040485	0.012129	-
$\langle r_{x^+e^-} \rangle$	6.458	7.772	4.987	7.344	-
$\langle r_{x^+e^+} \rangle$	7.397	8.486	6.598	8.371	-
$\langle r_{e^-e^-} \rangle$	5.871	5.977	5.482	5.767	6.033
$\langle r_{e^+e^+} \rangle$	6.261	6.158	6.599	6.295	6.033
$\langle r_{e^+e^-} \rangle$	4.706	4.648	4.965	4.765	4.487
Γ	3.881	4.044	3.247	3.717	4.470

egyetlen egységként, egyszeresen töltött ionként kezelhetjük. A Li^+Ps_2 rendszerre a számításokat az úgynevezett fix (merev) törzsű SVM-mel, ún. ftSVM-mel végeztük el. Azonban a Li^+ „törzshöz” erősen kötött passzív elektronok hatással vannak a valenciaelektronokra és a pozitronokra, vagyis a „törzset” nem tisztán csak töltött nehéz részecskéként képzeljük el, amely valamilyen effektív ponttöltéssel hat az aktív elektronokra és pozitronokra. A Hamilton-operátor - a kinetikusenergia-operátor és Coulomb-tagok mellett - tartalmazza a passzív elektronok hatását is: az aktív részecskék Hartree–Fock-módszerrel meghatározott átlagtérben mozognak, továbbá figyelembe vettük az elektronok megkülönböztethetlenségét (kicserélődési tag), és egy félempirikus polarizációs potenciállal tettük pontosabbá modellünket. Végül pedig egy projekciós operátort tartalmazó pszeudopotenciálon keresztül követeltük meg azt, hogy az aktív elektronokat leíró hullámfüggvény ortogonális legyen a „törzs” betöltött állapotaira.

Mindezek helyességéről egy teljes, hétrészecskés *ab initio* számolás győzött meg [21, 23], amely nehéz volt, sok számítógépidőt igényelt, és még így is messze állt a hullámfüggvényben való konvergenciától. Az ftSVM-mel végzett, öt aktív részecs-

két magába foglaló, számítás, sokkal jobban konvergált. Ezek az eredmények, egy korábban publikált számítás [23] tovább fejlesztése (a bázis dimenzióját növeltük, és az optimalizálást javítottuk).

2.7. táblázat. A [23] munka néhány eredménye. A pozitív töltésű (x^+) részecskével a Li^+ és Na^+ ionokat jelöltem. E a rendszer energiáját, ε a kötési energiát, $r_{ab} = \langle r_{ab} \rangle$ az a és b részecskék közötti átlagos távolságot jelenti. A Γ kivételével, amelyet $10^9 s^{-1}$ -ben, a mennyiségeket atomi egységben adtam meg.

Rendszer	E	ε	$r_{x^+e^-}$	$r_{x^+e^+}$	$r_{e^-e^-}$	$r_{e^+e^+}$	$r_{e^+e^-}$	Γ
Li^+Ps_2	-0.52915	0.01315	6.501	7.428	5.839	6.210	4.681	3.861
Na^+Ps_2	-0.52174	0.00573	7.928	8.610	5.945	6.097	4.615	4.017

Az új, javított számítások eredményeit az 2.6. táblázatban foglaltam össze, a [23] munka eredményei pedig a 2.7. táblázatban látható. A kötési energiában csak 2%-ot nyertünk, más várható értékekben pedig a változás szinte elhanyagolható. A részecskék közötti relatív távolságok teljes mértékben megerősítenek bennünket a rendszerre adott jelölésünk (Li^+Ps_2) helyességéről, hiszen ezek körülbelül 5%-kal térnek el a Ps_2 alapállapotában számolt értékektől.

A lítiumatom nem az egyedüli alkálifém, amely képes bekötni két pozitront és egy elektront. Az Na^+ ionról is bebizonyosodott [23], hogy a Ps_2 -vel stabil Na^+Ps_2 rendszert alkot, 0.0057 hartree körüli kötési energiával. A kötési energiaértéke ugyan elég nagy, hogy a stabilitást igazolja, a hullámfüggvény mégsem konvergált be. Az 2.6. táblázatban listáztam a számítási eredményeket. Annak ellenére, hogy a kötési energiában majdnem 10%-os a nyereség (0.0063 hartree), a legtöbb várható érték mégis változatlan maradt (az eredményeimet a 2.7. táblázatban összefoglaltakkal hasonlítottam össze). A részecskék közötti relatív távolság 2%-os határon belül megegyezik a Ps_2 -re kapott értékekkel, így a rendszer struktúrája „törzshöz” kötődő Ps_2 dipozitróniummal szemléltethető.

A Li^+Ps_2 (Na^+Ps_2) rendszer szerkezete (az alkálielemhez gyengén kötődő Ps_2 dipozitrónium), kötött mivolta mind az *ab initio* hétrészecskés (tizennégyrészecskés) számítás, mind az öt aktív részecskét használó ftSVM számítással jó pontossággal megadható. Természetesen a konvergenciát javíthatjuk a bázisméret növelésével, de ez a számítási idő kárára megy.

A 2.2.8. fejezet tanulsága szerint az $(e^+, e^+, e^-, e^-, x^+)$ öttest-rendszer estén

akkor alakul ki a $\text{Ps}_2 - x^+$ típusú rendszer, ha $m_x < m_e$. Így találhatunk olyan $(e^+, e^+, e^-, e^-, x^+)$ rendszert, amely energetikai és szerkezeti szempontból hasonlít a tanulmányozott Li^+Ps_2 és Na^+Ps_2 rendszerekhez. Ezen x^+ tömege felfogható, mint a Li^+/Na^+ törzsek effektív tömege a Ps_2 -vel alkotott kötött állapotukban. A keresésben felhasználjuk az (x^+, e^-) alrendszert is oly módon, hogy azt az effektív m_x tömegértéket fogadjuk el, amely jól adja vissza az (x^+, e^-) -nek megfelelő (Li^+, e^-) és (Na^+, e^-) kötési energiáját. A számítási eredményeimet a 2.5. táblázatban adom meg. A legjobb közelítést az $m_{x^+} = 0.7m_e$ -nél kaptuk. Az analógia ellenőrzése érdekében kiszámítottuk a $(0.7m_{e^+}, e^-)$ alrendszer kötési energiáját, s erre 0.20588 hartree körüli érték adódott, amely egészen jól adja vissza a (Li^+, e^-) (0.198 hartree) és a (Na^+, e^-) (0.188 hartree) alrendszerek kötési energiáját.

Tovább erősítettek bennünket a [41]-ben közöltek, ahol kiindulva az egyszerűbb (x^+, e^-, e^+) rendszerből, meghatározták az I és IB csoportbeli atomok és a pozitron együttesének a kötési energiáját, felhasználva az (x^+, e^-) alrendszerek kötési energiáját, és jó egyezést kaptak a valódi fizikai rendszerekre számított értékekkel.

Összefoglalva az eddigieket kijelenthető, hogy az $(x^+, e^+, e^+, e^-, e^-)$ rendszer struktúrája $m_x = 0.7m_e$ tömegérték mellett, határozott hasonlóságot mutat a Na^+Ps_2 és Li^+Ps_2 rendszerekével, a kötési energiája és annihilációs hozama közel áll a Li^+Ps_2 -éhez, és a részecskék közötti távolság 5%-os határon belül megegyezik a fent említett két rendszerre számolt értékekkel.

Az 2.2.8. fejezetben rámutattunk arra, hogy az $(e^+, e^+, e^-, e^-, m_{x^+})$ rendszer elég széles (m_x/m) tömegarány-tartományban stabil, azonban az $m_x = 0.56m_e$ alatti tömegérték esetén, a $\text{Ps}_2 + x^+$ csatornába elbomlik. Ilyen tömegértékre az (x^+, e^-) alrendszer kötési energiája 0.1795 hartree. Továbbá, amennyiben az m_{x^+} értéke nő, a Ps_2 klaszter egyre inkább torzulni látszik. Már az $(1.0m_{e^+}, e^+, e^+, e^-, e^-)$ rendszer esetén az annihilációs hozam 25%-kal kisebb a Ps_2 -re kapott értéknél. Az elektron-elektron átlagtávolság $\langle r_{e^-e^-} \rangle$ értéke csökken, és az elektronok nemcsak egymáshoz közelednek hanem az x^+ -hoz is, viszont a pozitron-pozitron $\langle r_{e^+e^+} \rangle$ és pozitron-elektron $\langle r_{e^+e^-} \rangle$ átlagértékek az m_{x^+} növekedésével egyre nagyobbá válnak. Az $m_{x^+} = \infty$ határeset felé tartva, az (x^+, Ps_2) rendszer drasztikus átalakuláson megy keresztül, és végül a PsH_∞ körül keringő pozitronná válik.

Mivel a (K, Rb, Cs) nehezebb alkáli elemek kötési energiája kisebb az (x^+, e^-) alrendszerre az $m_x = 0.56m_e$ tömegérték mellett kapott kritikus kötésienergia-

értéknél (0.1795 hartree), ezen alkáli elemeknek a Ps_2 dipozitróniummal való kötésére nem tudunk jóslatokat tenni.

2.2.11. Egyéb különleges rendszerek

Az eddigiekben csak egységnyi töltésű részecskéket tanulmányoztunk. A tanulmány kibővíthető többszörösen töltött nehéz centrumok (atomok, molekulák) esetére is. Ilyen coulomb-i öttest-rendszerekre példa a LiH^+ lítium-hidrogén kation, valamint a pozitronos $e^+\text{Li}$ lítium (lásd [22]). A rendszer mindkét szélsőséges tömegértékre (m_{e^+} és m_p) kötött. Minden egyes eddig tanulmányozott rendszer energiája az alkotó elemek tömegarányának monoton függvénye, így egy közbenső tömegű nehéz centrum esetén is kötött rendszert kapnánk. Ezért valószínűsíthető, hogy a $\mu^+\text{Li}$ rendszer stabil.

3. fejezet

Rezonanciaproblémák

A dolgozatom első felében, az 1.1. fejezet 1.1. ábráján szemléltettek értelmében, az S -mátrixnak a pozitív képzetes k -tengelyen elhelyezkedő pólusaival (kötött állapotokkal) foglalkoztam.

A diszkrét energiaspektrum tanulmányozásából nem hagyhatók ki a 1.1. ábrán szemléltetett pólusok közül, a negatív k -tengelyen (virtuális vagy antikötött állapotok), valamint a k -sík 3. (felépülő rezonanciák), és 4. negyedében (bomló rezonanciák) elhelyezkedő pólusok sem.

Potenciáltérben mozgó részecske esetén a Schrödinger-egyenlet – megfelelően megválasztott határfeltételek mellett – numerikusan egzakt módon megoldható, megadva ezáltal a részecske rezonanciahelyeit és szélességeit. A hullámfüggvény normájának kiszámítása nem triviális, azonban a probléma megoldásához szükséges matematikai apparátus ismert [50, 51].

Három testből álló rendszerek esetén a Schrödinger-egyenletet direkt módon nem tudjuk megoldani, ezért valamilyen közelítő eljárást kell alkalmazni. Az irodalomban a rezonanciaállapotok lokalizálására vonatkozó számításokat legtöbbször valamilyen kötött állapotú módszer általánosításával végezték el. Ezek közül megemlíthető a csatolt-csatornás számításokon alapuló *szoros csatolásos módszer* [4]. E módszer szerint a teljes hullámfüggvény szorzatfüggvények lineáris kombinációjaként adható meg, amelyekben a kéttest-alrendszernek ismert kötött állapotú függvényei szerepelnek, és a 3. testnek és a másik kettő tömegközéppontjának relatív mozgási függvényei az ismeretlen függvények. Ezekre csatolt egyenletrendszert

kapunk, amely általában numerikusan megoldható.

A rezonanciahelyek meghatározásában jelentős sikereket értek el, az ún. *valós stabilizációs eljárással* [55]. Ennek lényege abban áll, hogy a variációs módszerrel meghatározott sajátértékek mint valamely paraméter (általában a variációs bázisdimenziója) függvényei torlódnak a rezonanciák környékén. A módszer hátránya abban áll, hogy vele kissé nehézkes becslést adni a rezonancia szélességére.

A számításokban leggyakrabban használt eljárás a koordináták komplex síkban való elforgatásán alapszik [54]. A módszer alapjául az *ABC-tétel* szolgál [53], amely szerint az elforgatás során – amennyiben az elforgatás szöge elég nagy – a kontinuumba beágyazódott rezonanciák a kontinuum állapotokkal ellentétben nem mozdulnak el. Természetesen ennek az egyszerű eljárásnak is vannak jól ismert hátrányai, hiszen a számítások csak matematikailag kedvező tulajdonságú kölcsönhatások esetén végezhetőek el. Coulomb-kölcsönhatás esetén ez az egyetlen eljárás, amely háromnál több részecskéből álló rendszerek rezonanciaállaptainak lokalizálására alkalmaztak.

A rezonanciaállapotokra vonatkozóan a dolgozatomban részletesen két eljárást fogok bemutatni. Az egyik azon az elven alapszik, hogy a Hamiltonoperátor potenciálisenergia-tagjának változtatásával a rezonanciaállapotok behúzóhatók a kötött állapoti tartományba. A másik eljárás, az ún. Fagyjev–Merkurjev-egyenletek megoldásán alapszik, és alkalmazhatóságát a Coulomb-kölcsönható háromtest-rendszerek esetén mutatom be.

3.1. A csatolási állandóbeli analitikus folytatás (ACCC)

Tekintsük az m tömegű, l impulzusmomentumú pontszerű részecske mozgását, egy tetszőleges $V(r)$ potenciálban. Tételezzük fel, hogy a tanulmányozni kívánt folyamatok leírhatók az időtől független kvantummechanikai formalizmus segítségével. Továbbá a potenciál legyen olyan, hogy egy $V_v(r)$ (< 0 , minden $r - r_e$) vonzó és egy $V_t(r)$ (> 0 , minden $r - r_e$) taszító tagot tartalmazzon, azaz $V(r) = V_v(r) + V_t(r)$. A részecske állapotát a (1.4)-gyel értelmezett Schrödinger-egyenlet írja le, amelyet

a következő alakra hozhatunk:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(\lambda V_v(r) + V_t(r)) \right] \Psi_\lambda(k, r) = k^2(\lambda) \Psi_\lambda(k, r), \quad (3.1)$$

ahol felhasználtuk, hogy $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, és λ az ún. csatolási állandó, amelynek esetünkben az a szerepe, hogy rajta keresztül változtatjuk a potenciál mélységét. A kötött állapot energiája a λ paraméter monoton csökkenő függvénye. Ez könnyen bebizonyítható, ha kiindulunk a differenciális Hellmann–Feynman-tételből [10] és felhasználjuk a vonzó potenciál tagra előírt feltételt. Jelöljük λ_0 -val az elágazási ponthoz tartozó csatolási állandó értéket. A 3.1.a ábrán a $V(r) = \lambda V_{01} e^{-a_1 r^2} + V_{02} e^{-a_2 r^2}$ alakú, egy vonzó és egy taszító Gauss-függvényből felépített kölcsönhatási potenciált ábrázoltam a távolság függvényében, különböző λ értékekre. A 3.1.b ábrán pedig az egyedi potenciálokban mozgó részecske alapállapot (legmélyebben fekvő) energiáját ábrázoltam a λ paraméter függvényében. A 3.1.b ábrán ábrázolt $E = E(\lambda)$ függvény grafikus képe szemléletesen mutatja, hogy ez a függvény deriválható, azaz analitikus $\lambda > \lambda_0$ tartományban.

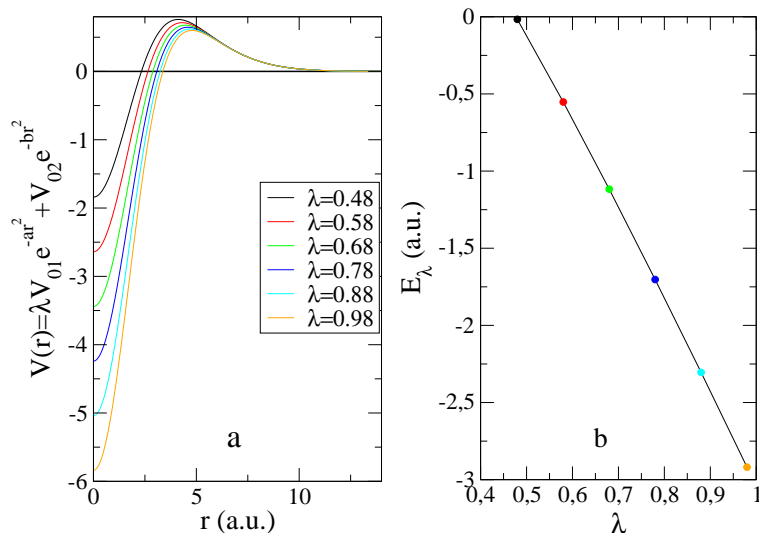
A [56] hivatkozás 5.1. fejezete és az ott hivatkozott munkák, valamint a [57] és [58] szerint, a k hullámszám a $\lambda \rightarrow \lambda_0$ határesetben a következőképpen viselkedik:

$$k_l(\lambda) \sim \sqrt{\lambda - \lambda_0}. \quad (3.2)$$

A (3.2)-es egyenletnek van egy fontos következménye nevezetesen az, hogy a $k_l(\lambda)$ függvénynek van egy törési/elágazási pontja, amely $l \neq 0$ esetén $i\bar{\chi}_l = k_l(\lambda_0) = 0$ -nál, míg az $l = 0$ esetben egy véges $i\bar{\chi}_0 = k_0(\lambda_0) \neq 0$ értéknél következik be. Az $l \neq 0$ esetén, ellentétben az $l = 0$ -val, ez a pont egybeesik a rugalmas szórási küszöbvel.

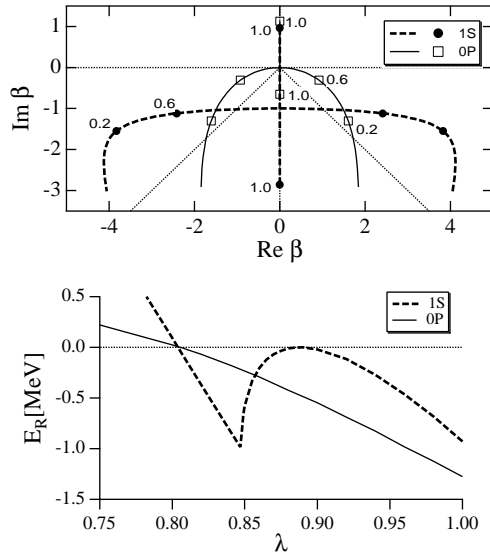
A módszerünk alapjául a komplex függvénytan analitikus folytatására vonatkozó tételek szolgálnak, amelyeket röviden úgy lehetne összefoglalni, hogy egy komplex változós differenciálható függvény, analitikusan folytatható az értelmezési tartományán kívüli tartományokba is.

Egy másik nagyon fontos eleme a módszerünknek abban áll, hogy valamely (λ) paramétertől függő Hamilton-operátorral megadott Schrödinger-egyenlet sajátértékei, sajátfüggvényei is függvényei lesznek a λ -nak. Ha változtatjuk a λ paraméter értékét, akkor az S -mátrix pólusai a k -térben egy jól meghatározott trajektória mentén mozdulnak el [3, 56].



3.1. ábra. Az a ábrán a $V(r) = \lambda V_{01} e^{-a_1 r^2} + V_{02} e^{-a_2 r^2}$ potenciált ábrázoltam az r függvényében, különböző λ csatolási állandó értékekre. A b ábrán látható pontok, a különböző csatolásiállandó-értékekre kapott alapállapot energiát adják meg.

Ezek szerint, csökkentve a potenciál mélységét (a λ paraméteren keresztül), vagyis $\lambda \rightarrow \lambda_0$, a kötött állapotnak megfelelő pólus elindul a pozitív képzetes k -tengelyen lefelé az elágazási pont irányába. Elérve az elágazási pontot, a trajektória két ágra szakad, lásd a 3.2. ábra felső részét. A szórás elmélet szerint [3], minden kötött állapot pólusnak van egy a negatív képzetes k -tengelyen elhelyezkedő $k_v = -i\chi_v$, $\chi_v > 0$ póluspárja (antikötött, virtuális állapot), amely a potenciálmélység csökkenésének hatására elindul a negatív képzetes k -tengely mentén felfelé, az elágazási pont irányába. A két pólus λ_0 -nál, a $k(\lambda_0)$ hullámszám értéknél találkozik egymással, és amennyiben tovább csökkentjük λ értékét, a képzetes tengelyre merőleges trajektória mentén hagyják el a képzetes k -tengelyt, átmenve a k -sík 3. ($k(x)$ ág, ahol $x = \sqrt{\lambda - \lambda_0}$), illetve 4. negyedébe ($k(-x)$ ág). Ha a részecske nem nulla impulzusmomentumú, akkor a centrifugális potenciálnak köszönhetően a elágazási pont egybeesik az origóval, és az átmenet a rezonancia tartományba egy sima trajektória mentén történik, amelyet 3.2. ábra alsó részén láthatunk ($0P$ -vel jelzett folytonos vonal). Az $l = 0$ esetben, a kötött ál-



3.2. ábra. A felső ábra egy a sugarú négyyszögletű potenciálgödörben mozgó s - és p -hullámú pólusok trajektóriája a $\beta = ka$ síkban, különböző λ értékek mellett. A szaggatott vonal az $\text{Im } \beta = \pm \text{Re } \beta$ „választó” vonalat adja meg. Az alsó ábra az s - és p -hullámok esetén az energia valós részét adja meg a λ függvényében [57].

lapoti pólus elérve a $k = 0$ küszöböt, tovább halad a képzetes tengelyen, majd valamely $k_0 = -i\chi_0$, $\chi_0 > 0$ értéknél találkozik az antikötött állapot pólussal, és a tengelyre merőlegesen hagyják el a képzetes k -tengelyt belépve a komplex k -sík rezonanciákra jellemző tartományába. Ez azt jelenti, hogy az $E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ energiafüggvény már nem monoton függvény, hanem a küszöb elérése után visszafordul, majd egy töréspont érintésével, valamely E_0 energiaértéknél megy át a rezonanciatartományba. Mindezekből az következik, hogy $l = 0$ esetben nem triviális az elágazási pont helyének meghatározása, lásd 3.2. ábra alsó részét (1S-sel jelölt szaggatott vonal).

Kihasználva a $k(x)$ és $k(-x)$ függvények analitikus tulajdonságait, a $\lambda > \lambda_0$ kötött állapot tartományból kiindulva, analitikus folytatással meghatározhatjuk a függvényértékeket a $\lambda < \lambda_0$ nem kötött tartományban is. Az analitikus folytatás legegyszerűbben a Padé-közelítés segítségével valósítható meg. Kiindulva a kötött

állapoti tartományban meghatározott $k_l(\lambda)$ értékekből:

$$k_l(x) \approx k_l^{[N,M]}(x) = \frac{P_N(x)}{Q_M(x)} = i \frac{c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots + c_Nx^N}{1 + d_1x + d_2x^2 + \dots + d_Mx^M} . \quad (3.3)$$

A konvergenciátétel értelmében [56], $N, M \rightarrow \infty$ -ben a $k_l^{[N,M]}(x)$ konvergálni fog a helyes $k_l(x)$ értékhez, az összes olyan x értékre, amelyre a $k(x)$ függvény analitikus.

A rezonanciaállapotot jellemző energiaérték és szélesség mellett kíváncsiak vagyunk az állapot hullámfüggvényére és a mérhető fizikai mennyiségekre is. Ehhez a hullámfüggvényt kell analitikusan folytatni. Így, a hullámfüggvény alakjára a Padé-közelítésben a következőt kapjuk:

$$\Psi^{[N,M]}(k, r) = \frac{P_N(k, r)}{Q_M(k, r)} = \frac{a_0(r) + a_1(r)k + a_2(r)k^2 + \dots + a_N(r)k^N}{1 + b_1(r)k + b_2(r)k^2 + \dots + b_M(r)k^M} . \quad (3.4)$$

Az eljárás, a hullámszám esetével analóg módon történik, a kötött állapot hullámfüggvényekből indulunk ki. Mivel a kötött állapot tartományban a k imaginárius, a páros hatványok együtthatói valósak, a páratlanoké tisztán képzetesek, hiszen csak így kapunk a kötött állapot hullámfüggvényre valós függvényt.

Végezetül, valamely mérhető fizikai mennyiség a következőképpen extrapolálható:

$$\mathcal{M}_{ij}^{[N,M]}(x) = \frac{a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_Nx^N}{1 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_Mx^M} , \quad (3.5)$$

ahol a kötött állapot matrixelemekből kiszámított polinom együtthatói valós mennyiségek.

A fenti sorfejtésekben az együtthatókat a kötött állapot számítások sorozatával határozzuk meg. A λ léptetésével a függvényeket sok $\lambda(> \lambda_0)$ értékre ki lehet számítani a kötött állapot probléma ismételt megoldásával, és a megoldás-sorozatból a Padé-együtthatók meghatározhatók. Erre majd a 3.2.1. alfejezetben részletesebben ki fogok térni.

3.2. Egy modellprobléma

Ebben a fejezetben egy modellproblémán keresztül mutatom be az előzőekben felvázolt módszert. Megvizsgálom, hogy a lehetséges Padé-közelítések közül melyik a legalkalmasabb, illetve a hullámfüggvény analitikus folytatásához egy új lehetőséget mutatok be.

Tekintsük az $m = 1$ *a.u.* tömegű részecske mozgását a

$$V(r) = \lambda V_{atr}(r) + V_{rep}(r) = -\lambda V_{01} e^{-0.16r^2} + V_{02} e^{-0.04r^2}, \quad (3.6)$$

vonzó és taszító Gauss-tagokat tartalmazó potenciálban.

3.2.1. A Padé-közelítés paramétereinek meghatározása

A (3.3) egyenletben szereplő $P_N(x)$ és $Q_M(x)$ polinomok együtthatóit a kötött állapotú tartományban meghatározott $k_l(x)$ -ek segítségével határozzuk meg. Ezáltal az együtthatók mindig valósak. A rezonanciaállapotra jellemző képzetes energiaértéket az $x = \sqrt{\lambda - \lambda_0}$, ahol $\lambda - \lambda_0 < 0$, szolgáltatja. Tételezzük fel, hogy meghatároztuk a részecske energiáját p darab, különböző λ_i , $i = 1, \dots, p$ kötött állapotú ($\lambda_i > \lambda_0$), csatolási állandó esetén. A polinom-együtthatók meghatározására több lehetőség is rendelkezésünkre áll.

Elsőként a legkisebb négyzetes eltérésen alapuló módszert említeném meg (*Min*). Ebben az esetben a következő kifejezés minimumát kell megkeresnünk:

$$I = \frac{1}{p} \sum_{l=1}^p |Q_M(x_l) k_l(x_l) - P_N(x_l)|^2 \quad .$$

A minimalizálás egy $N + M + 1$ darab egyenletből álló egyenletrendszerhez vezet:

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^N c_i f_{im} - \sum_{j=1}^M d_j f_{jm}^{(2)} = f_{0m}^{(2)}; & m = 1, 2, \dots, M \\ \sum_{i=0}^N c_i z_{il} - \sum_{j=1}^M d_j f_{jl} = f_{0l}; & l = 0, 1, \dots, N \end{cases}, \quad (3.7)$$

ahol

$$f_{ij} = \sum_{\alpha=1}^p x_{\alpha}^{i+j} k_{\alpha}(x_{\alpha}), \quad f_{ij}^{(2)} = \sum_{\alpha=1}^p x_{\alpha}^{i+j} k_{\alpha}^2(x_{\alpha}), \quad z_{ij} = \sum_{\alpha=1}^p x_{\alpha}^{i+j}, \quad (3.8)$$

amelyet valamely numerikus eljárással (NAG [91], Numerical Recipes [92] numerikus algoritmustárakban megtalálható rutinnal) egyszerűen megoldhatunk, megkapva ezáltal a P_N, Q_M polinomok együtthatóit.

A második eljárás szerint az $Q_M(x)k_l(x) - P_N(x)$ kifejezés első $N + M + 1$ momentumát egyenlővé tesszük nullával (*Mom*)

$$\sum_{j=1}^p x_j^l [Q_M(x_j)k_j(\lambda_j) - P_N(x_j)] = 0, \quad l = 0, \dots, N + M,$$

ami a következő egyenletrendszerhez vezet:

$$\sum_{i=0}^N c_i z_{il} - \sum_{j=1}^M d_j f_{jl} = f_{0l} \quad l = 0, 1, \dots, N + M, \quad (3.9)$$

ahol a z_{ij}, f_{ij} mennyiségeket a (3.8) egyenlettel értelmeltük. Ebben az esetben is megoldva az egyenletrendszert megkapjuk az ismeretlen polinomegyütthatókat.

A klasszikus Padé-közelítések közül a legjobb eljárásnak az bizonyult, amely szerint a $Q_M(x)k_l(x) - P_N(x)$ kifejezést az első $N + M + 1$ pontban egyenlővé tesszük nullával (Fix). Vagyis

$$Q_M(x_i)k_l(x_i) - P_N(x_i) = 0, \quad i = 1, \dots, N + M + 1.$$

Ez a következő egyenletrendszerhez vezet:

$$\left(1 + \sum_{j=1}^M d_j x_i^j\right) k_l(x_i) - \sum_{\alpha=0}^N c_\alpha x_i^\alpha = 0, \quad i = 1, \dots, N + M + 1. \quad (3.10)$$

Végezetül említést kell tennem egy iteratív eljárásról is, amellyel a számításaim nagy részét végeztem. A Padé-közelítés és a lánc törtek közötti szoros kapcsolatból adódóan [59], a (3.3) egyenlet helyett a következő alakot használhatjuk (Cf):

$$k_l^K(x) = \frac{k_l(x_1)}{1 + \frac{a_1(x - x_1)}{1 + \frac{a_2(x - x_2)}{1 + \dots}}}, \quad (3.11)$$

ahol a K -ad rendű lánc törte utolsó (legalsó) tagja: $1 + a_K(x - x_K)$. A (3.11)-ben szereplő a_i együtthatók pedig

$$a_i = \frac{1}{(x_i - x_{i+1})} \left\{ 1 + \frac{a_{i-1}(x_{i+1} - x_{i-1})}{1 + \frac{a_{i-2}(x_{i+1} - x_{i-2})}{1 + \dots}} \right\},$$

alakúak, ahol a véges tagú lánc törte utolsó (legalsó) eleme: $a_1(x_{i+1} - x_i) / (1 - [k_l(x_i)/k_l(x_{i+1})])$ és $a_1 = \{[k_l(x_1)/k_l(x_2)] - 1\} / (x_2 - x_1)$.

A kötött állapot $\{(k_l(x_i), x_i), i = 1, \dots, K\}$ értékpár sorozat ismeretében, kiindulva az első értékekből a láncötört $a_i, i = 1, \dots, K$ együtthatói, iteratív módon határozhatók meg.

Miután meghatároztuk a P_N, Q_M polinomok együtthatóit, a rezonancia lokalizációhoz csak az elágazási pontot jellemző λ_0 és $k_l(\lambda_0) = i\chi_0$ meghatározása marad hátra.

Az $l \neq 0$ esetben, mint említettem, a centrifugális gát hatására a $k_l(x)$ függvény, monoton függvényként megy át a rezonanciákat jellemző tartományba, és az elágazási pont megegyezik a küszöbvel, vagyis $k_l(\lambda_0) = 0$. A λ_0 meghatározásához nem kell egyebet tenni, mint a $\lambda_i = \lambda(k_i)$ inverzfüggvényt extrapolálni a $k_l(\lambda_0) = 0$ pontba. Ezáltal meghatároztuk λ_0 értékét, és az elágazási pontot egyértelműen behatároltuk.

Az $l = 0$ esetben a λ_0 meghatározásához a $k_0(\lambda)$ trajektória vizsgálata szükséges. Elsőre a $k_0(\lambda) = 0$ -ból egy durva közelítést kapunk a λ_0 értékére. Tudjuk, hogy a trajektóriák a tengelyre merőlegesen lépnek be a rezonanciatartományba, így a megbecsült λ_0 értékét változtatva azt fogadjuk el helyes értéknek, amelyikre teljesül a $\frac{1}{\partial k / \partial \lambda} \Big|_{\lambda \rightarrow \lambda_0} \approx 0$.

A λ_0 meghatározásával, a rezonancia lokalizációja egy behelyettesítésre redukálódik. A $\lambda < \lambda_0$ esetre a (3.3) egyenlet megadja a keresett rezonancia komplex hullámszámát:

$$\tilde{k} = k^{[N, M]}(x) = k_1 - ik_2, \quad (3.12)$$

ahol $x = \sqrt{\lambda - \lambda_0}$. A rezonanciaállapotok energiájának meghatározásához a (3.3) egyenletben szereplő paraméterek meghatározására van szükség. A (3.7), (3.9), (3.10), vagy (3.11) egyenletrendszerek megoldásához p számú kötött állapot $k(x_i), x_i = \sqrt{\lambda_i - \lambda_0}$ értékekre van szükségünk, amelyeket a 1.2.3. fejezetben bemutatott variációs módszer segítségével határoztam meg. Annak érdekében, hogy eldöntsem, melyik Padé-közelítés a legjobb, a (3.6) egyenlettel értelmezett potenciálban mozgó egységnyi tömegű, töltéssel nem rendelkező, $l = 0$ impulzusmomentumú részecske esetén egy, pl. a $\lambda = 0.4$ csatolási állandóhoz tartó rezonanciaállapot hullámszámát határoztam meg, az előzőekben felsorolt módszerek segítségével. A hullámszámra kapott eredményeket a 3.1. táblázatban foglaltam össze. A számítási eredményeimet a Vertse Tamás és munkatársai által, a Schrödinger-egyenlet numerikusan egzakt megoldására (DNI) írt FORTRAN programja (GAMOW) [66]

szolgáltatta eredményekkel vettem össze.

3.1. táblázat. *Különböző eljárásokkal meghatározott paraméterek segítségével lokalizált rezonancia ($\lambda = 0.4$) hullámszámának Padé-közelítései. A (3.6) kölcsönhatásban $V_{01} = -8.0$ a.u. és $V_{02} = 2.0$ a.u. értékeket használtam.*

Eljárás	$k^{[5,5]}(a.u.)$	$k^{[8,8]}(a.u.)$
<i>Fix</i>	$0.613385 - i2.465 \times 10^{-3}$	$0.613393 - i2.448 \times 10^{-3}$
<i>Min</i>	$0.613610 - i2.615 \times 10^{-3}$	$0.61286 - i2.828 \times 10^{-3}$
<i>Mom</i>	$0.613427 - i2.571 \times 10^{-3}$	$0.61368 - i2.317 \times 10^{-3}$
<i>Cf</i>	$0.613348 - i2.465 \times 10^{-3}$	
<i>GAMOW</i>	$0.613347 - i2.4660 \times 10^{-3}$	

A számítás során $p = 130$ kötött állapot $\{k(x_i), x_i\}$ számpárt használtam fel, a *Fix* eljárás kivételével, amelyhez csak $N + M + 1$ értékpárra van szükség. A vizsgálat azt eredményezte, hogy a Padé-közelítés paramétereinek meghatározásában a legpontatlanabbnak a *Min* eljárás bizonyult. A $N + M + 1 = 11, 17$ kötött állapot számpárt felhasználó *Fix* jó értéket ad. Sajnos a pontosság növelése érdekében nem növelhettük a paraméterek számát tetszőlegesen, mivel rosszul kondicionált egyenletrendszerekhez jutottunk. Ez elkerülhető, ha a lánctörtes Padé-közelítést (*Cf*) használjuk.

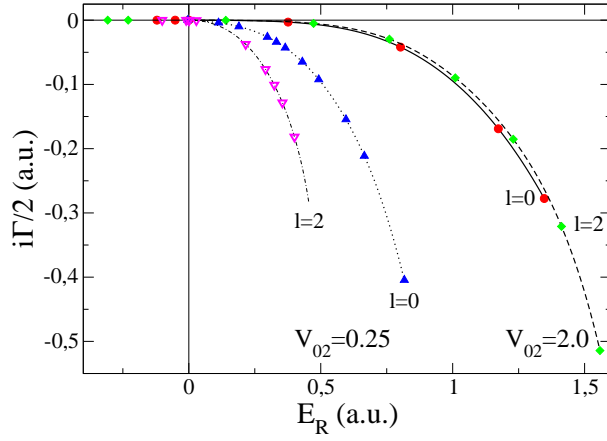
3.2.2. A rezonanciaállapotok energiája és fizikai mennyiségek

A pólus hullámszám értékének ismeretében a rezonanciaállapot energiáját a következőképpen kapjuk meg:

$$E = E_R - i\Gamma/2 = \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_1^2 - k_2^2) - 2ik_1k_2 \right],$$

ahol a rezonanciaállapot hullámszáma $\tilde{k} = k_1 - ik_2$.

A (3.6) potenciális modellprobléma esetén, megvizsgáltam azt is, hogy milyen széles λ tartományban kapunk jó egyezést a numerikusan egzakt számításokkal. A számításokat $l = 0, 2$ impulzusmomentumokra végeztem el. A λ változtatásával kapott pólus pályákat a 3.3. ábrán szemléltetem.



3.3. ábra. A $-\lambda 8.0e^{-0.16r^2} + V_{02}e^{-0.04r^2}$ potenciálban mozgó l impulzusmomentumú egységnyi tömegű részecskére kapott trajektóriák, különböző l és V_{02} értékek esetén, a komplex energiasíkon. A görbéken feltüntetett szimbólumok a kötött állapotokat és rezonanciaállapotokat jelölik.

A trajektóriákat az $x = -\sqrt{\lambda - \lambda_0}$ ág extrapolációját szemléltetik. A számítások elvégzéséhez oly fontos elágazási ponthoz tartozó λ_0 értékeket a 3.2. táblázatban adom meg.

3.2. táblázat. A (3.6) potenciál esetén az elágazási pontra jellemző λ_0 csatolási állandó és $E(\lambda_0)$ energiaérték.

V_{02}	l	λ_0	$E(\lambda_0)$ (a.u.)
2.0	0	0.47672	-1.4829×10^{-4}
2.0	2	1.04	-3.8971×10^{-8}
0.25	0	0.135204	-2.6968×10^{-3}
0.25	2	0.61273	-6.5309×10^{-7}

A magasabb potenciálgát ($V_{02} = 2.0$) esetén kapott görbék közel azonosak. Ez esetben a potenciálgát olyan magas, hogy a centrifugális gát járuléka szinte elhanyagolható. A belső tartományban az $l(l+1)/r^2$ természetesen erős, ennek hatása

azonban a pontoknak a görbe menti eltolásában merül ki. Alacsony potenciálgát esetén sokkal nagyobb szerepe van a centrifugális potenciálgátnak. Sokkal nagyobb eltérés van a két trajektória között és a sorrendjük is megváltozott. A kölcsönhatási potenciál azonos ugyan a négy esetben, de a λ tartomány minden l -re más és más.

A hullámszám analitikus folytatására a 3.1. fejezetben adott eljárás kibővíthető mind a hullámfüggvényre, mind a fizikai mennyiségekre. A rezonanciaállapotnak energiája mellett egyéb jellemzőire is kíváncsiak vagyunk. Az állapotot jellemző hullámfüggvénnyel részletesebben a következő alfejezetben foglalkozom. A továbbiakban a rendszerre jellemző (mérhető) fizikai mennyiségek meghatározásáról teszek említést. Egy operátor mátrixelemét rezonanciaállapot esetén a következő összefüggéssel adhatjuk meg (vö. (3.5)):

$$\mathcal{M}_{ij}(x) = \frac{a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_Nx^N}{1 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_Mx^M}, \quad (3.13)$$

ahol az $x = -\sqrt{\lambda - \lambda_0}$.

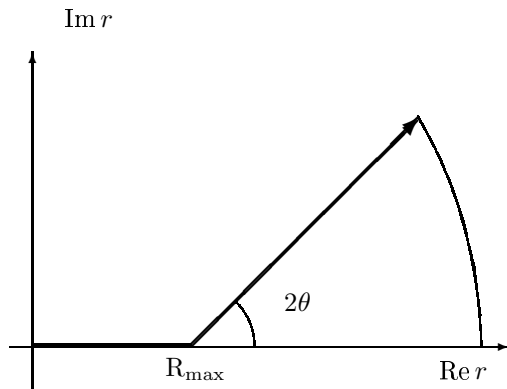
A mátrixelemek kiszámításakor hasonlóképpen járunk el, mint az energia meghatározásakor, vagyis a kötött állapot tartományban néhány λ_i értékre meghatározzuk az 1.2.4. alfejezetben leírtak szerint a kötött állapot mátrixelemeket, majd ezekből kiszámítjuk a Padé-közelítés paramétereit. A rezonanciaállapot mátrixeleme így egyszerű behelyettesítéssel nyerhető.

A kötött állapot számításokra használt Gauss-bázisos (mérési haladvánnyal definiáltuk a bázisfüggvények nemlineáris paramétereit) módszer nagymértékben megkönnyíti a dolgunkat, hiszen a legtöbb mátrixelem analitikusan meghatározható.

A rezonanciaállapotok hullámfüggvényeként használt Gamow-függvények nem elemei L^2 -nek, a szokásos módon nem normálhatók, vagyis nem létezik a következő integrál: $\int_0^\infty |u|^2(r) dr$. A függvénytér kiterjesztése a belső szorzat általánosítása révén és a megfelelő regularizációval lehetséges. E kiterjesztés a normára nézve pl. a $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty u^2(r) e^{-\epsilon r^2} dr$ definíciót adja. A konvergenciatényező és a határátmenet beiktatását Zel'dovich-féle regularizációs eljárásnak nevezzük [51, 52, 56]. Így a fenti integrál már létezik és $u(r)$ analitikus folytatása segítségével egyszerűbben is kiszámítható [51]:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty u^2(r) e^{-\epsilon r^2} dr = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_C u^2(r) e^{-\epsilon r^2} dr = \int_C u^2(r) dr, \quad (3.14)$$

ahol a C integrálási útvonal a 3.4. ábrán látható.



3.4. ábra. Az integrálási útvonal a hullámfüggvény normájának és a mátrixelemek kiszámításához. R_{max} -ig az integrálást numerikusan végeztük el, majd e fölött a koordináták θ szöggel való elforgatásával tesszük a hullámfüggvényt négyzetesen integrálhatóvá, így numerikusan integrálhatóvá válnak.

Ha $\theta > |\arg k|$, akkor az integrandus exponenciálisan csökken és ezáltal az integrál kiszámítható. Egy nem szinguláris $O(r)$ operátor r -től függő mátrixeleme is hasonlóan határozható meg:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} u_1(r) O u_2(r) e^{-\epsilon r^2} dr = \int_C u_1 O u_2 dr. \quad (3.15)$$

Rezonanciaállapotok esetén a várható értékek is komplexek, az imaginárius részt akár csak a Γ -t, a rezonancia mint diszkrét állapot értelmezési pontosságának mértékeként kell értelmezni. A numerikus kiintegrálás esetén egy véges R_{max} értékig a (3.15) integrált numerikusan számítjuk ki, majd $r > R_{max}$ aszimptotikus tartományban a koordináta 2θ szöggel való komplex elforgatás hatására a hullámfüggvény négyzetesen integrálhatóvá válik, így ebben a tartományban is az integrálértékek numerikusan meghatározhatók. Itt jegyzem meg, hogy az analitikusan folytatott mátrixelemekre az előbbi eljárást nem kell alkalmazni, hiszen az analitikus folytatás során a hullámfüggvény aszimptotikus tartományának a járulékát a kapott mátrixelemek már tartalmazzák. A normára, mint az egység operátor mátrixelemére is érvényes az előző megjegyzés.

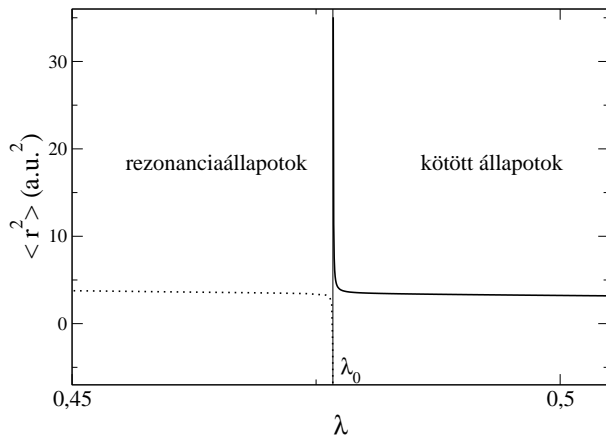
A számítási eredményeimet a 3.3. táblázatban adom meg. A küszöb közelében (a csatolási állandó az elágazási pontban $\lambda_0 = 0.47672$) 5 – 6 értékes számjegynyi egyezést kapunk a numerikusan egzakt (DNI) módszer eredményeivel. A λ értéket csökkentve, a rezonanciaállapotnak megfelelő pólus egyre inkább távolodik a kéttest-küszöbtől. A számítási eredményeink az elvárásoknak megfelelően alakulnak, nevezetesen a küszöb közelében az egyezés nagyon jó, és a szélesnek számító $\lambda = 0.15$ csatolási állandónál kapott rezonancia energiaérték esetén is az egyezés 2 – 3 értékes számjegynyi.

3.3. táblázat. $A -\lambda 8.0e^{-0.16r^2} + 2.0e^{-0.04r^2}$ (a.u.) potenciálban mozgó $l = 0$ impulzumomentumú egységnyi tömegű részecske rezonanciaállapotainak helye, szélessége, négyzetes középtávolsága, középtávolsága, a.u.-ban kifejezve. Az eredményeimet az numerikusan egzakt (DNI) számításokkal hasonlítom össze.

ACCC / λ	0.4	0.35	0.3	0.25	0.2	0.15
E_R	0.37618	0.59835	0.8024	0.9926	1.1729	1.347
$\Gamma/2$	$3.0244 \cdot 10^{-3}$	$1.4217 \cdot 10^{-2}$	$4.198 \cdot 10^{-2}$	$9.22 \cdot 10^{-2}$	0.1690	0.2776
$\langle r^2 \rangle$	4.44172 + $i0.58263$	4.94979 + $i1.46927$	5.03326 + $i2.57744$	4.70099 + $i3.66989$	4.01388 + $i4.57424$	3.17748 + $i5.23907$
$\langle r \rangle$	1.89578+ $i0.084048$	2.04357+ $i0.23432$	2.13056+ $i0.44506$	2.14843+ $i0.67007$	2.11643+ $i0.89158$	2.03642+ $i1.11624$
$(\langle r^2 \rangle)^{1/2}$	2.11205+ $i0.13793$	2.24867+ $i0.3267$	2.31171+ $i0.55747$	2.30920+ $i0.79462$	2.24716+ $i1.01778$	2.15694+ $i1.21446$
DNI / λ	0.4	0.35	0.3	0.25	0.2	0.15
E_R	0.37618	0.59836	0.80240	0.99248	1.1734	1.3492
$\Gamma/2$	$3.0250 \cdot 10^{-3}$	$1.4214 \cdot 10^{-2}$	$4.1936 \cdot 10^{-2}$	$9.2446 \cdot 10^{-2}$	0.16970	0.27734
$\langle r^2 \rangle$	4.4418+ $i0.58283$	4.950+ $i1.4684$	5.0318+ $i2.5815$	4.6965+ $i3.6615$	4.0305+ $i4.5486$	3.3888+ $i5.5117$
$\langle r \rangle$	1.8958+ $i0.084055$	2.0434+ $i0.23431$	2.1311+ $i0.44452$	2.1496+ $i0.67201$	2.1116+ $i0.89324$	2.0389+ $i1.1183$
$(\langle r^2 \rangle)^{1/2}$	2.11206+ $i0.13797$	2.2559+ $i0.3732$	2.31161+ $i0.55837$	2.3077+ $i0.79329$	2.2481+ $i1.0116$	2.2202+ $i1.2412$

Az egyezés nemcsak a rezonanciák helye és szélessége esetén jó, hanem a számított mátrixelemek esetén is.

A 3.5. ábrán a $-\lambda 8.0e^{-0.16r^2} + V_{02}e^{-0.04r^2}$ potenciálban mozgó $l = 0$ impulzusmomentumú egységnyi tömegű részecskére kapott $\langle r^2 \rangle$ négyzetes középtávolságot ábrázoltam a csatolási állandó függvényében. A folytonos vonal a kötött állapot tartományban, a pontozott vonal pedig a rezonanciatartományban számított átlagértékeket adja meg. A rezonanciatartományra jellemző függés csak az $\langle r^2 \rangle$ valós részét tartalmazza. Az ábrából látszik, hogy a küszöb (λ_0 az elágazási pont csatolási állandója) közelében a kötött állapotra kapott átlagérték hirtelen növekszik, ami teljesen természetes hiszen a küszöb közelében a hullámfüggvény egyre inkább szétterül. A rezonanciatartomány és a kötött állapot tartomány között a függ-



3.5. ábra. A $-\lambda 8.0e^{-0.16r^2} + V_{02}e^{-0.04r^2}$ potenciálban mozgó $l = 0$ impulzusmomentumú egységnyi tömegű részecskére kapott $\langle r^2 \rangle$ négyzetes középtávolság a λ csatolási állandó függvényében. A folytonos vonal a kötött állapot tartományra, míg a pontozott vonal a rezonancia tartományra kapott értékeket adja meg. λ_0 az elágazási pont csatolási állandója.

vénynek egy szakadási pontja van, a függvény nem folytonos ebben a pontban, a jobb és baloldali deriváltjai $+\infty$, illetve $-\infty$. Az S -mátrix pólusa a kötött állapot tartományból a virtuálisállapotok érintésével megy át a bomló rezonanciák tartományába. A virtuálisállapotok hullámfüggvénye exponenciálisan növekvő függ-

vény, és a Berggrenn-reprezentációban értelmezett skalárszorzatot figyelembe véve ((3.15) egyenlet) kapunk az $\langle r^2 \rangle$ átlagértékre $-\infty$ -t. A szakadási pontot kivéve, a két (kötött állapot, valamint rezonanciaállapot) görbe egymás folytatásait képezik. A rezonanciaállapotokra kapott átlagérték valós része sekélyen változó viselkedést mutat, a potenciálgátnak köszönhetően pedig van egy maximuma. Körülbelül kétszer nagyobb az értéke a küszöbtől távoleső kötött állapotokra kapott értékektől. Vagyis rezonanciaállapotban nagyobb a rendszer mérete.

A kötött állapot tartományban a négyzetes középtávolság és a középtávolság értékekre teljesül az úgynevezett Schwartz-egyenlőtlenség, vagyis $\langle r^2 \rangle \geq \langle r \rangle^2$. Megvizsgálva a 3.3. táblázatban közölt analitikusan folytatott mátrixelemek értékeit, azt láthatjuk, hogy a Schwartz-egyenlőtlenség nemcsak a kötött állapotok esetén teljesül, hanem a rezonanciaállapotokra kapott értékek valós részére is. Így elmondhatjuk, hogy az analitikus folytatással nem csak a radiális Schrödinger-egyenlet, mint sajátérték-egyenlet, sajátértékeit, a mérhető fizikai mennyiségeket, és mint később látni fogjuk a sajátfüggvényeit tudjuk helyesen folytatni a megfelelő Riemann-felületre, hanem a várható értékekre jellemző általános egyenlőtlenségek is megfelelően mennek át.

3.2.3. A hullámfüggvény

A bomló rezonanciaállapotok tulajdonságairól az energia-sajátérték mellett a sajátfüggvények ismerete is sokat elárul. Az 1.1. alfejezetben elmondottak alapján, a rezonanciaállapotokat kifutó hullámos aszimptotikájú Gamow-állapotokkal reprezentáljuk.

A (3.4) Padé-közelítés vagy a neki megfelelő lánctört segítségével a hullámszám, illetve a mátrixelemek mintájára, a radiális hullámfüggvény (továbbiakban csak hullámfüggvény) is analitikusan folytatható. Ez esetben a Padé-közelítéssel való analitikus folytatást pontról-pontra kell elvégeznünk a (k, r) -síkon. Kiindulva az exponenciálisan lecsengő kötött állapot hullámfüggvényből meghatározzuk az $a_i(r), b_j(r)$ paramétereket, amelyek közül a páratlan számú hatványkitevőhöz tartozók imaginárius számok, hiszen a kötött állapotok esetén a hullámfüggvény valós.

Több lehetőséget is kipróbáltam a hullámfüggvények extrapolációja során. Ezeket a következőkben fogom részletesebben tárgyalni. Elsőként a fentiekben vázolt eljárást végeztem el. Behelyettesítve a (3.4) egyenletbe a rezonanciaállapot energi-

áját (hullámszámértékét \tilde{k}) a hullámfüggvényre a következőt kapjuk (*ACCC-pp*):

$$\Psi(\tilde{k}, r) \approx \Psi^{[N, M]}(\tilde{k}, r) = \frac{a_0(r) + a_1(r)\tilde{k} + a_2(r)\tilde{k}^2 + \dots + a_N(r)\tilde{k}^N}{1 + b_1(r)\tilde{k} + b_2(r)\tilde{k}^2 + \dots + b_M(r)\tilde{k}^M}.$$

Második lehetőségként említem meg azt az eljárást, amelyben a $\Psi(k, r)$ -t négyzetesen integrálható bázisfüggvények lineáris kombinációjaként adjuk meg, bázisként pedig Gauss-függvényeket használunk. Az 1.2.3. fejezet tanulsága szerint a választott bázisfüggvények ugyanolyan jónak bizonyultak, mint bármely ortonormált bázis. A számításokat egy olyan bázison is elvégeztem, amelyet a Gauss-függvényekből a Gram–Schmidt-féle ortogonalizációs eljárással nyertem. Kiindulva a $\psi_i(\mathbf{r})$ bázisfüggvényekből (az összefüggések mind a nem ortogonális, mind az ortonormált bázisfüggvényekre érvényesek) a p darab, a λ értékének a változtatásával megoldott kötött állapoti problémák hullámfüggvényére kapjuk:

$$\Psi_j(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^K c_i(k_j) \psi_i(\mathbf{r}), \quad j = 1, \dots, p.$$

Mivel a bázis rögzítve van, a rezonanciaállapotok hullámfüggvényét oly módon kapjuk meg, hogy a lineáris paramétereket folytatjuk analitikusan, felhasználva 3.3. fejezetben elmondottakat. A $c_i(k_j)$ paraméterek Padé-közelítése:

$$c_i(k_j) = \frac{a_0 + a_1 k_j + a_2 k_j^2 + \dots + a_N k_j^N}{1 + b_1 k_j + b_2 k_j^2 + \dots + b_M k_j^M}, \quad i = 1, \dots, K \quad \text{és} \quad j = 1, \dots, p.$$

Az előző két egyenletbe behelyettesítve a rezonanciaállapot energiáját, a hullámfüggvényre a következőt kapjuk (*ACCC-Gb*):

$$\Psi(\tilde{k}, \mathbf{r}) \approx \sum_{i=1}^K c_i(\tilde{k}) \psi_i(\mathbf{r}).$$

Egy harmadik lehetőségként megvizsgáltuk, mi történik, ha az aszimptotikus tartományra vonatkozó *a priori* ismeretünket explicit módon felhasználva csupán a potenciál hatótávolságán belüli tartományban végezzük el az analitikus folytatást. Ennek érdekében a hullámfüggvényt

$$\Psi(k_i, r) = \Psi_{core}(k_i, r) \Psi_{as}(k_i, r) \quad (3.16)$$

alakban írtuk fel, ahol a $\Psi_{core}(k, r) = 1$ lesz, ha r a potenciál sugaránál nagyobb, vagyis az aszimptotikus tartományban. A (3.4) egyenletet a $\Psi_{core}(k, r)$ -ra alkalmazva kapjuk

$$\Psi_{core}^{[N, M]}(k, r) = \frac{a_0(r) + a_1(r)k + a_2(r)k^2 + \dots + a_N(r)k^N}{1 + b_1(r)k + b_2(r)k^2 + \dots + b_M(r)k^M},$$

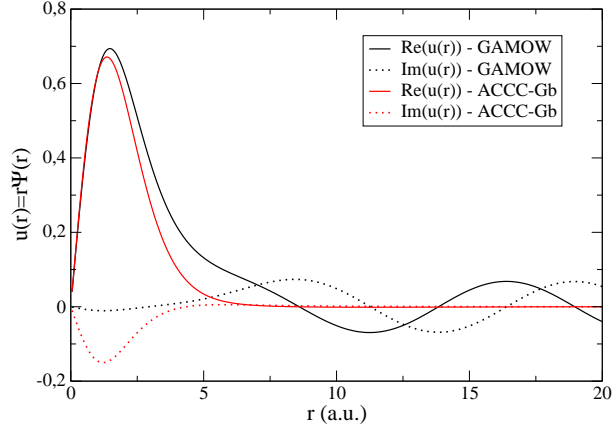
majd az analitikusan folytatott $\Psi_{core}(\tilde{k}, r)$ -t és a helyesen megválasztott $\Psi_{as}(\tilde{k}, r)$ függvényeket a (3.16) egyenletbe behelyettesítve a rezonanciaállapot hullámfüggvényére kapjuk (*ACCC-as*):

$$\Psi(\tilde{k}, r) \approx \Psi_{core}(\tilde{k}, r)\Psi_{as}(\tilde{k}, r). \quad (3.17)$$

ahol \tilde{k} a rezonanciaállapot hullámszáma.

A három módszerrel kapott hullámfüggvényeket a 3.6. és a 3.7. ábrákon adom meg. Az egyszerűség kedvéért az $u(r) = r\Psi(k, r)$ függvényt ábrázoltam. A 3.6. ábrán a rögzített nem ortogonális (*ACCC-Gb*) bázison való sorfejtéssel kapott hullámfüggvényeket hasonlítottam össze a numerikusan egzakt eljárással (*GAMOW*). A hullámfüggvény belső, nem aszimptotikus tartományában a függvények jellege azonos, azonban az analitikusan folytatott alul becsüli a maximum helyét. A nemortogonális és ortogonális bázissal kapott eredmények megegyeznek. Valójában arra voltunk kíváncsiak, hogy a bázis nemortogonális mivolta nincsen-e kedvezőtlen hatással a rezonanciaállapotra kapott hullámfüggvényre. A növekvő amplitúdóval történő oszcillációt nem adja helyesen vissza, igaz egy kis oszcilláció látható az aszimptotikus tartományban. Ez érthető, hiszen nagyobb r esetén a kötött állapoti hullámfüggvény exponenciálisan lecsengő viselkedést mutat, és az analitikusan folytatott lineáris paraméterek ezt a viselkedést nem tudják kompenzálni, és ezáltal a növekedő amplitúdójú aszimptotikát visszaadni. Ezzel szemben a 3.7. ábrán látható Gamow-függvények már sokkal közelebb állnak a valós alakhoz. A belső tartományban mindkét eljárással kapott hullámfüggvény teljesen azonos a numerikusan egzakt eljárással kapottal, azonban a pontról-pontra történő analitikus folytatás esetén a farokrész felveszi a kötött állapotra jellemző exponenciálisan lecsengő viselkedést, és igazából itt érthető meg a legutoljára bemutatott lehetőség hasznossága: csak a belső tartományban kell helyesen elvégeznünk az analitikus folytatást.

A Gamow-állapotok farok részének jellegzetes viselkedéséért pedig a $\Psi_{as}(\tilde{k}, r)$ tag a felelős. Így elég pontosan tudjuk a növekvő amplitúdóval oszcilláló farokrészt



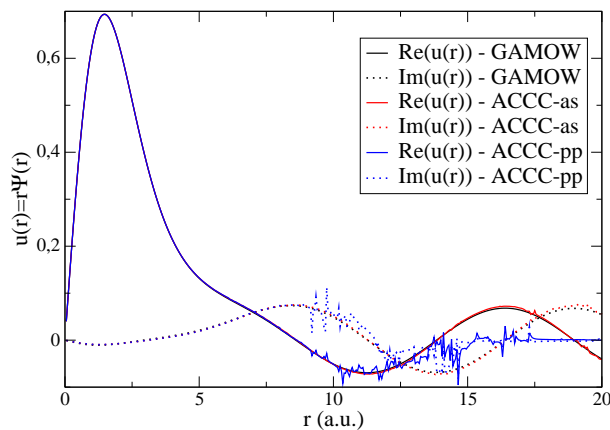
3.6. ábra. A $-3.2e^{-0.16r^2} + V_{02}e^{-0.04r^2}$ potenciálban mozgó s -hullám hullámfüggvénye a.u.-ban kifejezve. A rögzített nemortogonális Gauss-bázison való sorfejtés lineáris paramétereinek analitikus folytatásával kapott (ACCC-Gb) hullámfüggvény, és a direkt numerikus integrálással (GAMOW) kapott hullámfüggvény valós és képzetes része.

is reprodukálni. A 3.7. ábra aszimptotikus ($r > 12.5$ a.u.) tartományban található kis, numerikus pontatlanság okozta fűrészfogak, de ezek mértéke sokkal kisebb mint a többi bemutatott eljárás esetén.

Természetesen meg kell említenem azt is, hogy a fenti eredményeket, egy a szórási küszöb közelében található rezonancia esetén ábrázoltam. Ha egy távolabbi, szélesebb rezonancia hullámfüggvényét ábrázolom, amint azt a következő alfejezetben majd látni fogjuk, a numerikus pontatlanság egyre nagyobb mértéket ölt.

A numerikus hibák kiküszöbölhetőek lennének, ha az első két módszer esetén végtelen nagyra választanánk a függvényteret kifesztő bázis dimenzióját, továbbá ha nem korrelált Gauss-függvényeket használnánk bázisfüggvényként, hiszen a kötött állapot hullámfüggvény exponenciálisan lecsengő viselkedést mutat, amit mondjuk az exponenciális függvények jobban leírnának. Ekkor viszont a kötött állapot számítások lennének nehezebben kivitelezhetőek.

Összefoglalva az előző fejezetek tanulságait, az analitikus folytatáson alapuló



3.7. ábra. A $-3.2e^{-0.16r^2} + V_0e^{-0.04r^2}$ potenciálban mozgó s -hullám hullámfüggvénye $a.u.$ -ban kifejezve. A pontról-pontra történő analitikus foytatás mellett (ACCC-pp), az aszimptotikus viselkedést figyelembevevő módszerrel (ACCC-as) és a direkt numerikus integrálással (GAMOW) kapott hullámfüggvények valós és képzetes részét ábrázoltam.

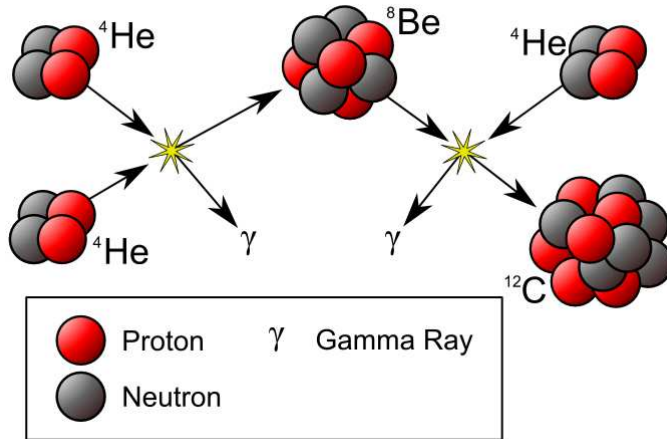
módszer akkor adja a legpontosabb eredményeket, ha a rezonanciaállapotok energia lokalizálásához (hely és szélesség) és a fizikai mennyiségek várható értékének meghatározásához a (3.11) egyenlettel megadott lánc törtes Padé-közelítést használom, és a hullámfüggvényt a (3.16)-tal megadott összefüggés segítségével folytatom analitikusan.

3.3. A ${}^8\text{Be}$ rezonanciaállapotai

Ebben a fejezetben az előzőekben bemutatott módszert alkalmazom a ${}^8\text{Be}$ instabil mag rezonanciáinak lokalizálására. A nyolc nukleonból (négy proton és négy neutron) álló elemnek nincs kötött állapota. Diszkrét állapotainak ismerete, mégis több okból is alapvető fontosságú.

A világegyetembeli szén (a földi élet alapeleme) a vörös óriáscsillagokban történő fúzió végtermékeként áll elő. A ${}^8\text{Be}$ „alapállapotának” élettartama azonban

elég hosszú ahhoz, hogy az $\alpha + \alpha = {}^8\text{Be}$ reakcióban makroszkopikus mennyiségű ${}^8\text{Be}$ termelődjön. Ezt követően a 3.8. ábrán szemléltetett, úgynevezett 3α folyamaton keresztül (az alfa-részecskének a ${}^8\text{Be}$ magon történő befogása) eljutunk a stabil ${}^{12}\text{C}$ maghoz.

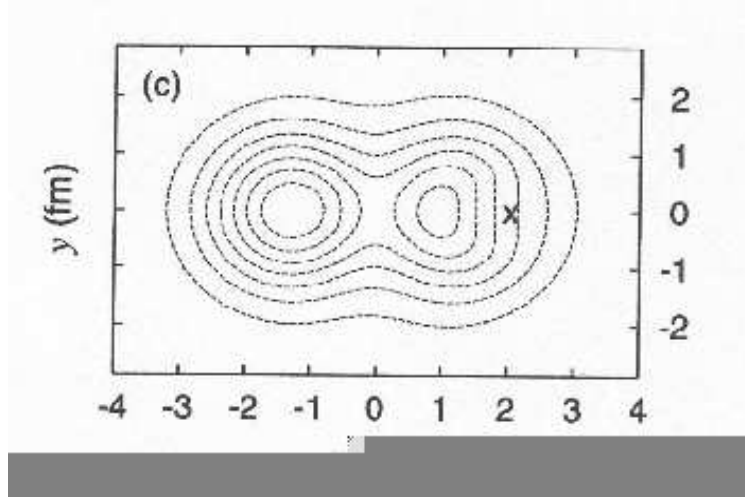


3.8. ábra. ${}^{12}\text{C}$ kialakulását szemléltető három- α -ús folyamat reakció ábrája [60].

Ennek a folyamatnak azonban nagyon alacsony a hozama a kis ${}^8\text{Be}$ -sűrűség miatt. A [61] munka szerint a ${}^8\text{Be}(\alpha, \gamma){}^{12}\text{C}$ reakciót egy alacsonyenergiájú rezonancia felerősíti. Ezt a rezonanciát vélték felismerni a ${}^{12}\text{C}$ mag második gerjesztett (0^+) állapotában, amelynek energiájára és szélességére $E_r = 0.3796$ MeV-et és $\Gamma/2 = 4.25 \cdot 10^{-6}$ MeV-et kaptak [62, 63, 64].

A ${}^8\text{Be}$ magot alkotó nukleonok (négy proton és négy neutron) száma azt sugallja, hogy a rendszert ne nyolcrészecskés modellel, hanem inkább két α -csomóból álló rendszerként kezeljük. Ennek a feltevésnek az igazolására egy *ab initio* számítást végeztek el [58]. A Minnesota-potenciállal (a Coulomb-kölcsönhatást figyelembe veszi, de nincs spin-pálya tag, ettől függetlenül jól adja vissza a d,t,h és α magok energiáját és méretét) elvégzett nyolcnukleon-számítások egyértelmű jeleit mutatják a csomósodásnak. A 3.9. ábrán a párkorrelációs függvényeket ábrázolták „kontúrtérképeként”. Az ábra azt fejezi ki, hogy az \times szimbólummal jelölt pontba

elhelyezett, jól meghatározott tulajdonságú, pl. \downarrow spinállású, próbanukleon milyenek látja a többi nukleon sűrűségeloszlását.



3.9. ábra. A ^8Be mag „kontúrtérképként” ábrázolt párcorrelációs függvénye. Az \times szimbólummal jelölt pontban $(x, y) = (1.91 \text{ fm}, 0)$ elhelyezett próbanukleon ilyenek látja a többi nukleon sűrűségeloszlását.

Az ábrából az is egyértelműen kitűnik, hogy a ^8Be két α -csomóból (klaszterből) álló rendszerként képzelhető el. Ezekből kiindulva nem tűnik megalapozatlannak, hogy a ^8Be mag diszkrét állapotait egy már-már naivnak nevezhető modell segítségével próbáltuk meg lokalizálni.

A számításaimban a ^8Be magot szerkezet nélküli két pontszerű, nulla spinű „ α ” részecskéként modelleztem. A számításokban Ali–Bodmer-típusú, vonzó és taszító Gauss-függvényekből álló kéttest-kölcsönhatást használtam [65]. A protonok között ható Coulomb-taszítást is figyelembe vettem. Tehát a kölcsönhatás alakja:

$$V_{\alpha\alpha}(r) = \begin{cases} -130e^{-(0.475r)^2} + 500e^{-(0.7r)^2} + \frac{(Z_\alpha e)^2}{r}, & l = 0 \\ -150e^{-(0.5r)^2} + 640e^{-(0.8r)^2} + \frac{(Z_\alpha e)^2}{r}, & l = 2, 4. \end{cases}, \quad (3.18)$$

ahol $Z_\alpha = 2$ az α részecske töltése, a távolságegység fm, a $V_{\alpha\alpha}(r)$ pedig MeV-

ban értendő. Ezen kívül az is megfigyelhető, hogy az α -szórási kísérleti értékekhez illesztett Ali–Bodmer-kölcsönhatás különbözik az $l = 0$ és az $l \neq 0$ esetekben.

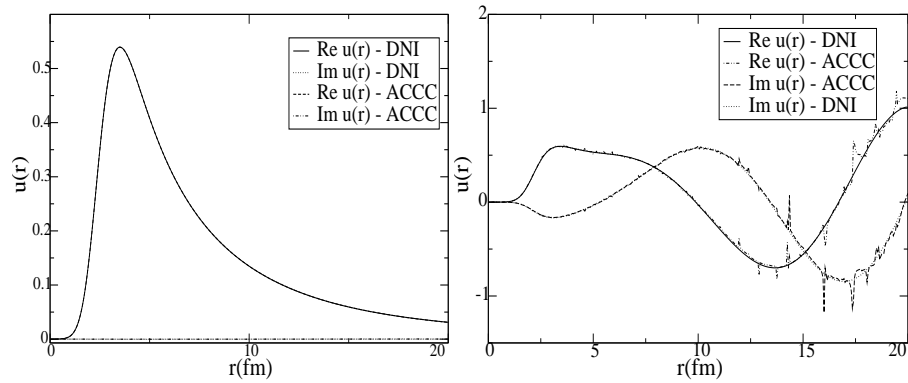
Az analitikus folytatást oly módon végeztem el, hogy $\lambda > 1$ csatolási állandóval mélyítettem a potenciálvölgyet, Gauss-bázisos variációs módszerrel meghatároztam a már bekötött rendszer kötött állapotát, majd a 3.1. fejezetben leírtak alapján analitikusan folytattam $\lambda = 1$ -be.

3.4. táblázat. A ${}^8\text{Be}$ magbéli rezonanciák energiái és szélességei (a két α -küszöbhez viszonyítva) MeV-ban megadva. ACCC-vel az analitikus folytatással kapott eredményeket, DNI-vel jelölt számítási eredményeket a GAMOW-program segítségével kaptam meg [66], az MN-nel a Csótó Attila eredményeit adom meg [67], a kísérleti eredmények forrása pedig [68].

Módszer	l	0	2	4
ACCC	E_R	9.6344×10^{-2}	3.0021	15.010
	$\Gamma/2$	3.8×10^{-6}	0.6377	7.40
	$\langle r^2 \rangle$	$32.174 + i0.04170$	$10.885 + i7.6585$	$8.1870 + i7.2055$
	$(\langle r^2 \rangle)^{1/2}$	$5.672 + i0.0036$	$3.478 + i1.1009$	$3.089 + i1.1660$
DNI	E_R	9.633×10^{-2}	3.0018	15.108
	$\Gamma/2$	4.69×10^{-6}	0.6366	7.307
	$\langle r^2 \rangle$	$35.640 + i0.93816$	$10.7788 + i0.81873$	$8.9709 + i8.0125$
	$(\langle r^2 \rangle)^{1/2}$	$5.9704 + i0.07856$	$3.4866 + i1.1741$	$3.2403 + i1.2364$
MN	E_R	9.2×10^{-2}	3.03	13.10
	$\Gamma/2$	3.07×10^{-6}	0.699	2.055
Kísérlet	E_R	9.189×10^{-2}	3.04 ± 0.03	11.4 ± 0.03
	$\Gamma/2$	$(3.4 \pm 0.85) \times 10^{-6}$	0.75 ± 0.01	~ 1.75

A számítási eredményeket a 3.3. táblázatban adom meg. A táblázatban az eredményeimet a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásán alapuló módszerrel, de ugyanazon modellen belül hasonlítottam össze. Egy Minnesota-potenciállal végzett mikroszkopikus számítás mellett a kísérleti eredményeket is feltüntettem. Összehasonlítva az energiák helyére és szélességére kapott eredményeket láthatjuk, hogy a különböző eljárásokkal de azonos modellben végzett számítások eredményei több számjegyre azonosak. A módszerek a küszöb közeli 0^+ állapotra, és a közepesen széles 2^+ rezonanciára a realisztikus potenciállal végzett számításokkal és a mé-

résekkel is jó egyezést mutatnak. Érdekes megfigyelni, minél kisebb a rezonancia energiája, annál nagyobb a sugara. Ez a küszöb körüli állapot kiterjedt voltával magyarázható (a nulla energiájú állapot végtelen kiterjedésű). A 4^+ -os rezonancia-állapotra kapott eredmények, ugyan jó egyezést mutatnak a DNI-vel kapott eredményekkel, de csak nagyságrendben egyeznek meg a kísérleti értékekkel. Ezt azzal magyarázzuk, hogy a modellünkben használt $V_{\alpha\alpha}(r)$ Ali–Bodmer-kölcsönhatás, igazából az $l = 2$ -es állapotra lett helyesen illesztve, és nem teljesen helyes a g-hullámokra. Ennek igazolására teszünk kísérletet oly módon, hogy nem a $\lambda = 1$ -be végezzük el az extrapolációt, hanem egy olyan λ értéket keresünk ahol az extrapolált rezonanciahelye egyezik az MN-nel jelzett számítás rezonanciahelyével, és összevetjük a kapott szélességeket. Azt kaptuk, hogy $\lambda = 1.324$ -nél ACCC-vel $E_r - i\Gamma/2 = 13.102 - i3.493$ MeV-et kapunk, ami jobb egyezést mutat az MN-nel jelzett számítási eredményekkel. Az extrapolációt a kísérleti energiaértékekre elvégezve azt kapjuk, hogy $\lambda = 1.5$ -nél az ACCC módszer $E_r - i\Gamma/2 = 11.3127 - i1.9826$ MeV-et ad, ami már kifejezetten jól egyezik a kísérleti eredménnyel.



3.10. ábra. Két Ali–Bodmer-potenciállal kölcsönható α -csomóként modellezett ${}^8\text{Be}$ mag $l = 0, 2$ impulzusmomentumú rezonanciáinak a hullámfüggvénye. DNI a numerikusan egzakt módszert, míg ACCC a (3.16) egyenlet szerint elvégzett analitikus folytatást jelenti.

A fenti eredmények igazolták sejtésünket, vagyis az $l = 4$ impulzusmomentumú rezonanciák lokalizálásához mélyebb potenciálvölgyet kell használni a modell $V_{\alpha\alpha}(r)$ Ali–Bodmer-kölcsönhatásban. További javítást érhetnénk el, ha a modellben nem

pontszerű, nem szerkezet nélküli α -részecskéket használnánk. Természetesen próbálkozhatnánk jobb kéttest-kölcsönhatásokkal is.

A ${}^8\text{Be}$ mag négyzetes középsugarára az α -részecskék méretét is figyelembe véve az $\langle r^2 \rangle^{1/2} = 3.42$ fm értéket kaptuk. Ez az érték a nemrég elvégzett [69, 70] kötött állapoti számításoknál (2.07–2.3 fm) jóval nagyobbak adódott. Ez a tény arra utal, hogy egyetlen kötött állapoti módszer sem ad igazán realiztikus eredményt.

Végezetül a 3.10. ábrán az analitikus folytatással, és a numerikusan egzakt Schrödinger-egyenlet-megoldással kapott $u(r) = r\Psi(r)$ hullámfüggvények valós és képzetes részét ábrázoltam az α -részecskék közötti távolság függvényében. Tűrhetően jó egyezést kapunk mindkét 0^+ és 2^+ állapotra. Igaz, az $l = 0$ relatív impulzumomentumú állapotra kapott hullámfüggvény $R = 20$ fm-ig még nem érte el a Gamow-állapotok jellegzetes aszimptotikus tartománybeli viselkedését (bal oldali ábra), amelyre viszont jellemző példát ad az $l = 2$ -es állapotra kapott hullámfüggvény (jobb oldali ábra).

Összefoglalásként elmondható, hogy a Gauss-bázist használó variációs módszerrel kombinált analitikus folytatáson alapuló módszer nem marad alul a rezonancia lokalizására használt egyéb eljárásokkal szemben. Előnyére válik viszont egyszerűsége.

4. fejezet

A Fagyjev–Merkurjev-formalizmus

4.1. Elméleti összefoglalás

Az egységnyi töltésű atomi részecskékből álló háromtest-rendszerek kötött állapotainak meghatározására az 1.2.3. fejezetben tárgyalt variációs módszer ad megbízható és pontos megoldást. A rezonanciaállapotok vizsgálata azonban komolyabb feladat, hiszen a Gamow-állapotok hullámfüggvényei nem négyzetesen integrálható függvények. A csatolási állandó szerinti analitikus folytatás módszereinek (ACCC, 3.1. fejezet) alkalmazhatósága nehézségekbe ütközik a háromtest–Coulomb-rendszerek esetén. A tömeg- vagy töltésskálázás nem ideális. Ha egyöntetűen skálázzuk e mennyiségeket, a kötött állapot mindig kötött állapot marad. Ha viszont a részecskék paramétereit külön-külön változtatjuk meg, a küszöbök egymáshoz képest tolódnak el, ami nehezzé teszi az extrapolációt.

Az egységnyi töltésű háromtest-rendszerek rezonanciáinak lokalizálásához egy nehezebb, de közelítésmentes, a kvantummechanika elvein alapuló eljárást választottam, nevezetesen a Fagyjev–Merkurjev-féle homogén egyenletek megoldásán alapuló módszert.

A háromtest-szórásproblémára kidolgozott Fagyjev-egyenletekben [72] eredetileg csak rövid hatótávolságú kölcsönhatások szerepeltek. Feltételezték, hogy ha

valamelyik részecske a három közül eléggé eltávolodik a másik kettőtől, akkor kölcsönhatásmentesen mozog. A Coulomb-kölcsönhatás figyelembevétele nehézségekhez vezetett, hiszen a részecskék az aszimptotikus tartományban a Coulomb-aszimptotikát érzik, vagyis nem mozognak szabadon. Ennek következtében az egyenletek szingulárisává válnak, így a megoldások nem egyértelműek.

Az első formálisan egzakt kezelése a problémának Noble nevéhez fűződik [71]. A taszító Coulomb-kölcsönhatást tartalmazó magfizikai háromtest-probléma esetén a Coulomb-kölcsönhatást rövid és hosszú hatósugarú tagokra bontotta, és a hosszú hatósugarú tagot formálisan a „szabad” Green-operátorba illesztette bele. Így a formalizmus matematikailag korrekt egyenletekhez vezetett, viszont gyakorlati haszna annál kevesebb volt. A taszító Coulomb-kölcsönhatás hiányában a csak rövid hatósugarú kölcsönhatást tartalmazó Fagyjejev-egyenlethez jutunk, amelyek megoldhatók.

A Noble ötletét tovább fejlesztő Merkurjev [72] azt javasolta, hogy a Coulomb-kölcsönhatás szétválasztását nem a kéttest-, hanem a háromtest-konfigurációs térben kell elvégezni. A kidolgozott elméletben, mivel a coulomb-i háromtest–Green-operátor nem ismert, a problémára az jelentette a megoldást, hogy az integrálegyenleteket a konfigurációs térbeli differenciálegyenletekké alakította át, és megfelelően megválasztott határfeltételekkel oldotta meg őket.

4.1.1. A Fagyjejev–Merkurjev-egyenletek

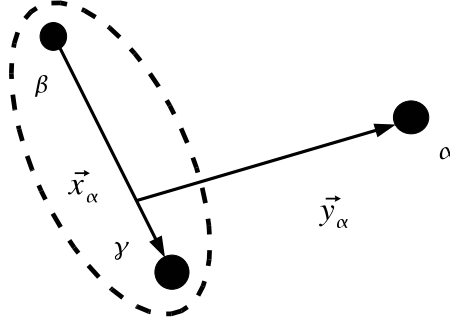
A továbbiakban a csatolt Lippmann–Schwinger- és Fagyjejev–Merkurjev-integrálegyenleteknek a Coulomb–Sturm-bázison történő megoldásán alapuló módszerét vázolom. A közelítő eljárást Papp Zoltán és munkatársai sikeresen alkalmazták háromtest-rendszerek kötött állapotainak meghatározására mind a magfizika, mind az atomfizika területén [73]. Az atomfizikai Coulomb-kölcsönhatás és a részecskefizikai bezáró potenciál közötti hasonlóság kibővítette a módszer alkalmazási lehetőségeit [75]. Papp munkássága nyomán [73, 74, 75, 77] a formalizmus és a numerikus alkalmazása egy számítógépes-program formájában is készen állt.

A három testből álló atomi rendszer Hamilton-operátorát a következő módon írhatjuk fel:

$$H = H^0 + v_\alpha^C + v_\beta^C + v_\gamma^C, \quad (4.1)$$

ahol H^0 a háromtest-rendszer kinetikusenergia-operátorát jelöli, $v_\alpha^C, v_\beta^C, v_\gamma^C$ pe-

dig az α, β, γ kéttest-alrendszerekben ható Coulomb-kölcsönhatásokat adják meg. A szokásos x_α és y_α Jacobi-koordinátákat használjuk, így x_α a (β, γ) kéttest-alrendszer relatív koordinátáját adja meg, az y_α pedig a (β, γ) pár tömegközéppontját köti össze az α -val jelölt harmadik részecskével. Mindezt a 4.1. ábrán szemléltetem. A β és γ részecskék között ható v_α^C Coulomb-potenciál természetesen csak az x_α koordinátától függ. A fentiekben értelmezett Hamilton-operátort



4.1. ábra. A három részecske egy lehetséges Jacobi-koordináta-rendszere. A szaggatott vonallal körülhatárolt, β és γ részecskék alkotta alrendszert a továbbiakban az α kéttest-alrendszernek fogom nevezni.

a háromtest–Hilbert-terében adtuk meg. A kinetikusenergia-operátor alakja a tömegközépponti mozgás leválasztása után a következőképpen alakul:

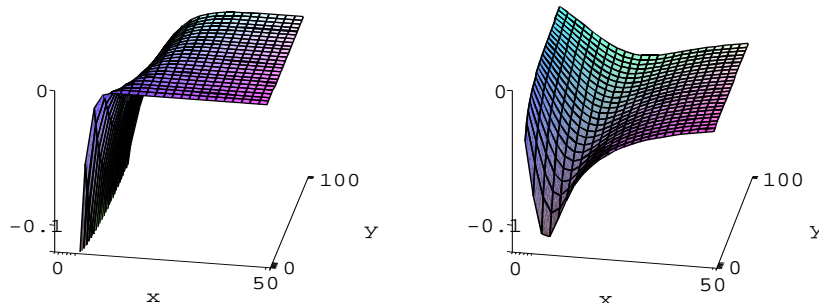
$$H^0 = h_{x_\alpha}^0 + h_{y_\alpha}^0 = h_{x_\beta}^0 + h_{y_\beta}^0 = h_{x_\gamma}^0 + h_{y_\gamma}^0, \quad (4.2)$$

ahol h_i^0 a megfelelő Jacobi-koordinátához tartozó kinetikusenergia-operátor. A potenciális energia kéttest-operátorait formálisan a háromtest–Hilbert-térbeli operátorokká alakítjuk: $v_i^C = v_i^C(x)\mathbf{1}_y$, ahol $\mathbf{1}_y$ az y koordinátához tartozó Hilbert-tér egységoperátora, és $i = \alpha, \beta, \gamma$. A Merkurjev-féle közelítésben a Coulomb-kölcsönhatást felosztjuk egy rövid és egy hosszú hatósugarú tagra:

$$v_\alpha^C = v_\alpha^{(s)} + v_\alpha^{(l)}. \quad (4.3)$$

A két tag egy „vágási függvény” segítségével definiálható:

$$\begin{aligned} v_\alpha^{(s)} &= v_\alpha^C \zeta(x_\alpha, y_\alpha) \\ v_\alpha^{(l)} &= v_\alpha^C [1 - \zeta(x_\alpha, y_\alpha)], \end{aligned}$$



4.2. ábra. A $v^{(s)}$ és $v^{(l)}$ rövid, illetve hosszú hatósugarú potenciálok alakja egy vonzó Coulomb-potenciál esetén.

ahol a vágási függvénynek eleget kell tennie a következő tulajdonságnak:

$$\lim_{x,y \rightarrow \infty} \zeta(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{ha } |x| < x_0 (1 + |y|/y_0)^{1/\nu} \\ 0, & \text{ha } |x| \geq x_0 (1 + |y|/y_0)^{1/\nu} \end{cases} .$$

x_0 és y_0 pozitív valós számok, míg $\nu > 2$. Következésképpen a háromtest-konfigurációs tér azon részében, amelyben a β és a γ részecske elég közel van egymáshoz, $v_\alpha^{(s)} \sim v_\alpha^C$ és $v_\alpha^{(l)} \sim 0$, a másik szélső esetben pedig $v_\alpha^{(l)} \sim v_\alpha^C$ és $v_\alpha^{(s)} \sim 0$. A gyakorlatban a vágási függvényre a következő alakot használjuk:

$$\zeta(x,y) = \frac{2}{1 + \exp \left[\frac{(x/x_0)^\nu}{1+y/y_0} \right]} . \quad (4.4)$$

A $v^{(s)}$ rövid hatósugarú és a $v^{(l)}$ hosszú hatósugarú potenciál egy tipikus alakját a 4.2. ábra szemlélteti. A már szétválasztott Coulomb-kölcsönhatással a háromtest-rendszer Hamilton-operátora a következő alakú:

$$H = H^{(l)} + v_\alpha^{(s)} + v_\beta^{(s)} + v_\gamma^{(s)}, \quad (4.5)$$

ahol a hosszú hatósugarú rész a rendszer kinetikusenergia-operátora mellett a hosszú hatósugarú potenciálokot is magába foglalja:

$$H^{(l)} = H^0 + v_\alpha^{(l)} + v_\beta^{(l)} + v_\gamma^{(l)}. \quad (4.6)$$

A teljes és a hosszú hatósugarú Hamilton-operátor rezolvensét vagy Green-operátorát a következő összefüggések adják meg:

$$G(z) = (z - H)^{-1}, \quad G^{(l)}(z) = (z - H^{(l)})^{-1}. \quad (4.7)$$

A Fagyjev-formalizmus alapgondolata szerint a hullámfüggvényt három komponensre osztjuk fel:

$$|\Psi\rangle = |\psi_\alpha\rangle + |\psi_\beta\rangle + |\psi_\gamma\rangle, \quad (4.8)$$

és a komponenseket definiáló homogén-egyenletek alakja:

$$|\psi_i\rangle = G^{(l)}(z)v_i^{(s)}|\Psi\rangle, \quad \text{ahol } i = \alpha, \beta, \gamma. \quad (4.9)$$

Felhasználva a hullámfüggvény (4.8) egyenlettel értelmezett felbontását, valamint a Fagyjev-egyenleteket jutunk el a homogén Fagyjev–Merkurjev-integrálegyenletekhez, amelyeket a rendszer kötött és rezonanciaállapotai egyaránt kielégítenek. Így tehát a három csatolt egyenlet:

$$|\psi_i\rangle = G_i^{(l)}(z)v_i^{(s)} [|\psi_j\rangle + |\psi_k\rangle], \quad (4.10)$$

ahol $(i, j, k) = (\alpha, \beta, \gamma)$ és ezek ciklikus permutációja. A hosszú hatósugarú csatorna Hamilton-operátora és rezolvense pedig a következőképpen néz ki:

$$G_\alpha^{(l)}(z) = (z - H_\alpha^{(l)})^{-1}, \quad \text{ahol } H_\alpha^{(l)} = H^{(l)} + v_\alpha^{(s)} = H^0 + v_\alpha^C + v_\beta^{(l)} + v_\gamma^{(l)}. \quad (4.11)$$

A (4.10) egyenletekről bebizonyítható, hogy matematikailag kedvező tulajdonságúak, és ezt a jó tulajdonságukat a $z = E - i\Gamma/2$, $\Gamma > 0$ komplex energiaértékekre is megőrzik.

A továbbiakban a Schrödinger-féle differenciálegyenletes és a Fagyjev-féle integrálegyenletes formalizmusok ekvivalenciájára szeretnék rámutatni. Induljunk ki a (4.9) Fagyjev-komponensek definíciós egyenleteiből. Formális operátorműveletek elvégzése után, és felhasználva a (4.11)-es definíciókat eljutunk a következő egyenletekhez:

$$\left[z - \left(H^{(l)} + v_i^{(s)} \right) \right] |\psi_i\rangle = v_i^{(s)} [|\psi_j\rangle + |\psi_k\rangle], \quad (4.12)$$

ahol $(i, j, k) = (\alpha, \beta, \gamma)$ és ezek ciklikus permutációja. A három (4.12) egyenletet összeadva és átrendezve kapjuk:

$$\left[z - \left(H^{(l)} + v_\alpha^{(s)} + v_\beta^{(s)} + v_\gamma^{(s)} \right) \right] (|\psi_\alpha\rangle + |\psi_\beta\rangle + |\psi_\gamma\rangle) = 0, \quad (4.13)$$

ami nem más, mint a Schrödinger-egyenlet.

Az előzőekben bemutatott formalizmust atomi rendszerek rezonanciaállapotaik vizsgálatára használom. Ilyen esetben a Merkurjev-féle potenciál felbontást

((4.3) egyenlet) csak a vonzó Coulomb-kölcsönhatásokra végezzük el. Ily módon két rövid hatósugarú potenciál tagunk lesz, mert a harmadikat beleillesztettük a Green-operátorba, vagyis a Fagyjev-komponensek száma maximum kettő lehet. Azonos részecskéket tartalmazó rendszerek esetén a két Fagyjev-komponensnek saját Jacobi-koordinátaiban azonos függvényalakja van, ezáltal a formalizmus egy-komponensűre redukálódik. Ezekről függetlenül a közelítő eljárást teljes általánosságában mutatom be, az egyszerűsödésekre visszautalva az eredményeket tárgyaló fejezetben.

4.1.2. A közelítő eljárás

4.1.2.1. A Coulomb–Sturm-bázis

A (4.10) egyenletet a Sturm-féle szeparábilis sorfejtés módszerével oldjuk meg, ahol a Coulomb–Sturm-függvények (CS) eleget tesznek a coulomb-i Sturm–Louville-feladatnak. A Sturm-probléma általánosan a következőképpen fogalmazható meg. Keressük a következő egyenlet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + \alpha_{nl} V(r) \right] S_{nl} = ES_{nl} \quad (4.14)$$

α_{nl} sajátértékeit és S_{nl} sajátfüggvényeit (Sturm-függvények) rögzített E energiaértékek esetén, megfelelő határfeltételek mellett. Coulomb-kölcsönhatás esetén a fenti egyenletet átrendezve, és az általunk használt jelölésre áttérve kapjuk meg a coulomb-i Sturm–Louville-feladatot:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2b(n+l+1)}{r} + b^2 \right] |nl; b\rangle = 0, \quad (4.15)$$

ahol $b^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ és $\alpha_{nl} = \frac{2b(n+l+1)\hbar^2}{2\mu Z_1 Z_2 e^2}$. A keresett sajátfüggvények, a Coulomb–Sturm-függvények pedig a következő alakban adhatók meg:

$$|nl; b\rangle = \left[\frac{n!}{(n+2l+1)!} \right]^{1/2} (2br)^{l+1} e^{-br} L_n^{2l+1}(2br), \quad (4.16)$$

ahol n és l a radiális, illetve impulzusmomentum kvantumszámokat jelöli, b pedig a bázis energiától függő méretparamétere. L -lel a Laguerre-polinomokat jelöltük. Az $\{|nl; b\rangle\}$ CS függvények egy biortonormált bázist alkotnak a kéttest–Hilbert-térben, az $|nl; b\rangle$ biortonogonális partnerét pedig az $|\widetilde{nl}; b\rangle = |nl; b\rangle/r$ összefüggéssel

értelmezzük. A CS-bázisra az ortogonalitás és teljességi reláció a következőképpen adható meg:

$$\langle \widetilde{n'l}; b | nl; b \rangle = \langle n'l; b | \widetilde{nl}; b \rangle = \delta_{nn'}, \quad (4.17)$$

és

$$\mathbf{1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N |\widetilde{nl}; b\rangle \langle nl; b| = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N |nl; b\rangle \langle \widetilde{nl}; b|. \quad (4.18)$$

4.1.2.2. A kéttest–Green-operátor mátrixelemei

A Coulomb–Sturm-bázissal vett kéttest–Green-operátor mátrixelemek egyszerűen számíthatók. A kéttest Green-operátor alakja a következő:

$$g_l^C(z) = (z - h_l^C)^{-1}, \quad \text{ahol } h_l^C = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + \frac{Z}{r}. \quad (4.19)$$

A cél a $\underline{g}_{nn'}^C = \langle \widetilde{nl}; b | g_l^C | \widetilde{n'l}; b \rangle$ mátrixelemek meghatározása. Kiindulunk a következő egyenletből:

$$(z - h_l^C) g_l^C(z) = \mathbf{1}. \quad (4.20)$$

Jobbról és balról hatva egy-egy CS bázisra és felhasználva a teljességi relációt kapjuk:

$$\sum_{i'=0}^{\infty} \langle il; b | (z - h_l^C) | i'l; b \rangle \langle \widetilde{i'l}; b | g_l^C | \widetilde{j'l}; b \rangle = \delta_{ij}. \quad (4.21)$$

(4.21) egyenlet $\underline{J}_{i'i'}^C = \langle \widetilde{il}; b | (z - h_l^C) | \widetilde{i'l}; b \rangle$ mátrixelemek végtelen tridiagonális (Jacobi-alakkal rendelkező) mátrixot alkotnak és zárt alakban megadhatók. A (4.21) egyenlet tehát nem más, mint egy rekurziós összefüggés az ismeretlen Green-operátor mátrixelemeire: $\underline{J}_{ii-1} \underline{g}_{i-1j}^C + \underline{J}_{ii} \underline{g}_{ij}^C + \underline{J}_{ii+1} \underline{g}_{i+1j}^C = \delta_{ij}$. A \underline{g}_{00}^C ismeretében a többi ismeretlen Green-operátor mátrixelem meghatározható. Annak ellenére, hogy \underline{g}_{00}^C zárt alakban megadható a rekurzióval meghatározott Green-operátor mátrixelemek nem konvergáltak be. Viszont a Jacobi-alakkal rendelkező mátrixok inverzének kedvező tulajdonságait kihasználva egy másik rekurziós összefüggés vezethető le [73, 76], amely szerint egy $\infty \times \infty$ -es Green-mátrix vezető $N \times N$ -es almátrixa megadható egy szintén $N \times N$ -es Jacobi-mátrix segítségével. Vagyis a következő rekurziós összefüggést kapjuk $z < 0$ esetre:

$$\underline{g}^{C[N]} = [\underline{J}^C + \delta_{jN} \delta_{iN} J_{NN+1}^C]^{-1}, \quad (4.22)$$

ahol C a J Jacobi-mátrix mátrixelemeiből felépített lánc törtes alak, amely a hullámfüggvény négyzetesen integrálható volta miatt negatív energiaértékeknel konvergál. Pozitív energiáknál ($z > 0$) – az állapotok szórási állapotok vagyis nem négyzetesen integrálhatók – a C lánc tört nem konvergál. Mivel a Green-mátrix a kötött állapotok tartományán analitikus függvény, ezért C analitikusan folytatható a $z > 0$ esetekre is, és így konvergense válik. Ezáltal meghatároztuk a Coulomb–kéttest–Green-operátor CS-bázissal vett mátrixelemeit a teljes komplex energiasíkon.

4.1.2.3. A CS-szeparációs eljárás Fagyjev-típusú egyenletek megoldásához

A háromtest–Hilbert-teret kéttest–Hilbert-terek direkt szorzataként adhatjuk meg, így a teljes Hilbert-teret lefedő bázis impulzusmomentum-csatolt kéttest-bázisok direkt szorzataként állítható elő:

$$|n\nu l \lambda; b_x b_y\rangle_\alpha = |nl; b_x\rangle_\alpha \otimes |\nu \lambda; b_y\rangle_\alpha, \quad (n, \nu = 0, 1, 2, \dots), \quad (4.23)$$

ahol $|nl; b_x\rangle_\alpha$ és $|\nu \lambda; b_y\rangle_\alpha$ bázisfüggvények az x_α és y_α koordinátákhoz tartozó CS-bázisfüggvények. A felépített bázisban a teljességi reláció a következőképpen írható:

$$\mathbf{1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n, \nu=0}^N |\widetilde{n\nu l \lambda; b_x b_y}\rangle_i \langle n\nu l \lambda; b_x b_y| = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{1}_i^N, \quad (4.24)$$

ahol $\mathbf{1}_i^N = \sum_{n, \nu=0}^N |\widetilde{n\nu l \lambda; b_x b_y}\rangle_i \langle n\nu l \lambda; b_x b_y|$, és $\langle x_\alpha y_\alpha | \widetilde{n\nu l \lambda; b_x b_y}\rangle_\alpha = \langle x_\alpha y_\alpha | n\nu l \lambda; b_x b_y\rangle_\alpha / \langle x_\alpha y_\alpha |$. Meg kell említenem, hogy a háromrészesekés Hilbert-térben három különböző báziskészlet értelmezhető, az α, β, γ kéttest-alrendszereknek megfelelően ($i = \alpha, \beta, \gamma$). Így a (4.10) Fagyjev–Merkurjev-egyenleteket a következőképpen közelíthetjük:

$$|\psi_i\rangle = G_i^{(l)} \mathbf{1}_i^N v_i^{(s)} [\mathbf{1}_j^N |\psi_j\rangle + \mathbf{1}_k^N |\psi_k\rangle] = G_i^{(l)} \mathbf{1}_i^N v_i^{(s)} \sum_{q \neq i} \mathbf{1}_q^N |\psi_q\rangle, \quad (4.25)$$

ahol $(i, j, k) = (\alpha, \beta, \gamma)$ és ezek ciklikus permutációi, valamint $i \neq q = j, k$.

A háromtest–Hilbert-térben ható $v_i^{(s)}$, $i = \alpha, \beta, \gamma$ rövid hatósugarú potenciál

szeparálható alakkal közelíthető, ahol felhasználtuk a (4.25) egyenletet:

$$\begin{aligned} v_i^{(s)} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{1}_i^N v_i^{(s)} \mathbf{1}_j^N \approx \mathbf{1}_i^N v_i^{(s)} \mathbf{1}_j^N \\ &\approx \sum_{n, \nu, \nu', \nu'=0}^N |n\nu l \lambda; b_x b_y\rangle_i \underline{v}_{ij}^{(s)} \langle n' \nu' l' \lambda'; b_x b_y|, \end{aligned} \quad (4.26)$$

ahol $\underline{v}_{ij}^{(s)} = {}_i \langle n\nu l \lambda; b_x b_y | v_i^{(s)} | n' \nu' l' \lambda'; b_x b_y \rangle_j$ és $i, j = \alpha, \beta, \gamma$, valamint $i \neq j$. Ez a szeparációs sorfejtés azért tehető meg, mert a $v_i^{(s)} |\psi\rangle$ is négyzetesen integrálható, Hilbert-térbeli függvény. A fenti közelítés segítségével a homogén Fagyejev–Merkurjev-egyenletek megoldási eljárását átalakítottuk a $\underline{\psi}_i = {}_i \langle n\nu l \lambda; b_x b_y | \psi_i \rangle$ hullámfüggvény-komponensekre érvényes mátrixegyenletekre:

$$\underline{\psi}_i = \underline{G}_i^{(l)}(z) \sum_{j \neq i} \underline{v}_{ij}^{(s)} \underline{\psi}_j, \quad (4.27)$$

ahol $\underline{G}_i^{(l)} = {}_i \langle n\nu l \lambda; b_x b_y | G_i^{(l)} | n' \nu' l' \lambda'; b_x b_y \rangle_i$. A fenti egyenletrendszernek akkor és csak akkor van megoldása, ha az egyenletrendszer Fredholm-determinánsa nulla, vagyis általános alakban:

$$D(z) \equiv \det \{ [\underline{G}^{(l)}(z)]^{-1} - \underline{v}^{(s)} \} = 0, \quad (4.28)$$

ahol $[\underline{G}^{(l)}(z)]^{-1}$ és $\underline{v}^{(s)}$ 3×3 -as tömbmátrixok. Így a rezonanciák lokalizálásához nem kell más tennünk, mint megkeresni a $D(z)$ determináns zérushelyeit a komplex energiasíkon.

A $G_i^{(l)}$ Green-operátor, a $H_i^{(l)}$ csatorna Hamilton-operátorának a rezolvense, első ránézésre ugyanolyan bonyolultnak tűnik, mint a rendszer eredeti Hamilton-operátorához tartozó Green-operátor. Azonban $H_\alpha^{(l)}$ azzal a különleges tulajdonsággal rendelkezik, hogy csak az α alrendszerben vannak kötött állapotai, tehát csak egyetlen aszimptotikus csatorna létezik, és ez maga az α csatorna. Ha jól kezeljük az aszimptotikus tartományt akkor egyetlen Lippmann–Schwinger-egyenlet is elég a megoldáshoz [78]. Merkurjev a következő egyenletet javasolta [79, 72]:

$$G_\alpha^{(l)} = G_\alpha^{as} + G_\alpha^{as} V_\alpha^{as} G_\alpha^{(l)}, \quad (4.29)$$

és megmutatta, hogy V_α^{as} háromtest-potenciál a konfigurációs tér minden irányában gyorsabban cseng le $1/R$ -nél, ahol R a rendszer méretét leginkább kifejező

koordinátában (hiperszférikus koordinátákban) a sugár. Ezen kívül a konfigurációs tér különböző tartományaira bonyolult közelítő alakokat is megadott. A V_α^{as} gyors lecsengése miatt alkalmazható a potenciál szeparációs sorfejtés. Vagyis

$$V_\alpha^{as} \approx \sum_{n,\nu,n',\nu'=0}^N |\widetilde{n\nu l\lambda; b_x b_y}\rangle_\alpha \underline{V}_\alpha^{as} \langle n\nu l\lambda; b_x b_y|, \quad (4.30)$$

ahol $\underline{V}_\alpha^{as} = {}_\alpha \langle n\nu l\lambda; b_x b_y | V_\alpha^{as} | n'\nu' l'\lambda'; b_x b_y \rangle_\alpha$. Ezeket felhasználva következik, hogy a (4.29) egyenlet a mátrixelemekre is teljesül:

$$\underline{G}_\alpha^{(l)} = \underline{G}_\alpha^{as} + \underline{G}_\alpha^{as} \underline{V}_\alpha^{as} \underline{G}_\alpha^{(l)}. \quad (4.31)$$

A G_α^{as} és V_α^{as} bonyolult háromtest-operátorok véges számú, négyzetesen integrálható CS-bázison vett mátrixelemeit kell kiszámítani. A konfigurációs tér azon részén, amelyet a CS bázis lefed, a G_α^{as} és V_α^{as} egyszerűbb alakot vesznek fel. Vagyis a (4.31) egyenlet a következő alakú lesz:

$$\underline{G}_i^{(l)} = \underline{\tilde{G}}_i + \underline{\tilde{G}}_i \underline{U}^i \underline{G}_i^{(l)}, \quad i = \alpha, \beta, \gamma, \quad (4.32)$$

ahol $\underline{\tilde{H}}_i$ és $\underline{\tilde{G}}_i$ a torzított csatorna-Hamilton-operátora és rezolvense,

$$\underline{\tilde{H}}_i = H^0 + v_i^C + u_i^C \quad \text{és} \quad \underline{\tilde{G}}_i = \left(z - \underline{\tilde{H}}_i \right)^{-1}, \quad i = \alpha, \beta, \gamma, \quad (4.33)$$

és $\underline{U}^i = v_j^C + v_k^C - u_i^C$, $(i, j, k) = (\alpha, \beta, \gamma)$. Az u_i^C segédpotenciál csak az y_i koordinátától függ, és oly módon értelmeztük, hogy ne alakulhasson ki benne kötött állapot. Az aszimptotikus viselkedése pedig $u_i^C \approx e_i(e_j + e_k)/y_i$ alakú, ha $y_i \rightarrow \infty$, ahol $(i, j, k) = (\alpha, \beta, \gamma)$ és ezek ciklikus permutációi. Vagyis ez olyan effektív Coulomb-kölcsönhatás, amely az i kötött alrendszer tömegközéppontja és a harmadik részecske között hat. A végtelen távol levő harmadik részecske által érzékelt kölcsönhatást adja meg.

Az (4.32) egyenletből következik, hogy:

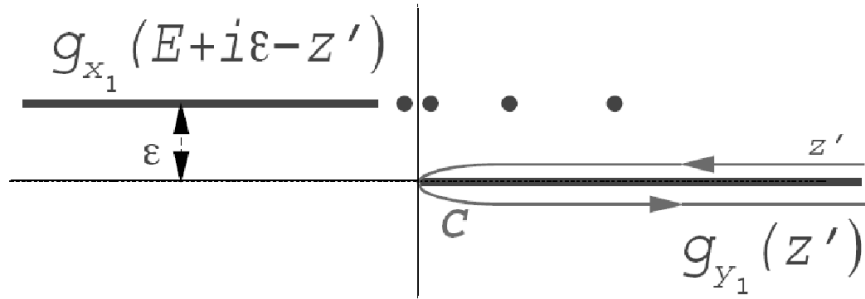
$$\left(\underline{G}_i^{(l)} \right)^{-1} = \left(\underline{\tilde{G}}_i \right)^{-1} - \underline{U}^i, \quad (4.34)$$

ahol $\underline{\tilde{G}}_i = {}_i \langle \widetilde{n\nu l\lambda; b_x b_y} | \underline{\tilde{G}}_i | \widetilde{n'\nu' l'\lambda'; b_x b_y} \rangle_i$ és $\underline{U}^i = {}_i \langle n\nu l\lambda; b_x b_y | U^i | n'\nu' l'\lambda'; b_x b_y \rangle_i$, és $(i, j, k) = (\alpha, \beta, \gamma)$ és ezek ciklikus permutációi. Az \underline{U}^i segédpotenciál mátrixelemei numerikusan minden esetben meghatározhatók.

Nem maradt más hátra, mint a \tilde{G}_i mátrixelemek meghatározása. Ez a Green-operátor – az eddigiekkel ellentétben – két különböző kéttest–Hilbert-térbeli, kommutáló Hamilton-operátor összegéhez tartozik: $\tilde{H}_i = h_{x_i} + h_{y_i}$, ahol $h_{x_i} = h_{x_i}^0 + v_i^C(x_i)$ és $h_{y_i} = h_{y_i}^0 + u_i^C(y_i)$. Ennek következtében a \tilde{G}_i kéttest–Green-operátorok mátrixelemeinek egy speciális pálya menti integrállal definiált konvolúciójaként adható meg:

$$\tilde{G}_i(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz' \underline{g}_{x_i}(z - z') \underline{g}_{y_i}(z'), \quad (4.35)$$

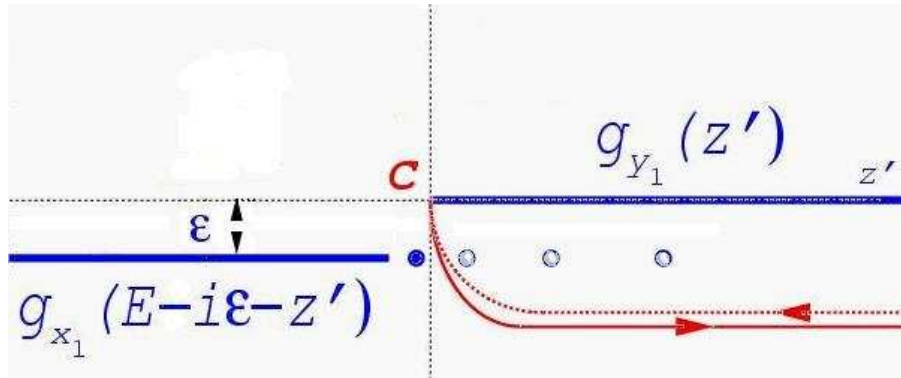
ahol $g_{x_i}(z) = (z - h_{x_i})^{-1}$ és $g_{y_i}(z') = (z' - h_{y_i})^{-1}$. Az integrálási kontúrt olyannak kell választani, hogy az óramutató járásával ellentétes irányban járja körül a h_{y_i} Hamilton-operátor folytonos spektrumát oly módon, hogy a g_{x_i} Green-függvény analitikus legyen a C által közrezárt tartományban. A (4.35) egyenlet integrandusában szereplő kéttest–Green-operátorok CS-vel vett mátrixelemei analitikusan meghatározhatók bármely komplex energiaértékre, lásd a 4.1.2.2. alfejezetet. A C kontúr kiválasztása viszont nem egyszerű feladat. Induljunk ki a szórás feladattól, ahol a Green-operátor a következőképpen értendő $\tilde{G}_i(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \tilde{G}_i(E + i\varepsilon)$, ahol $\varepsilon > 0$ és $E < 0$, hiszen a rendszer háromtest-bomlási küszöb alatti folyamataira vagyunk kíváncsiak. Véges értékű ε esetén a g_{x_i} és g_{y_i} Green-operátorok



4.3. ábra. A $g_{x_1}(E + i\varepsilon - z')g_{y_1}(z')$ analitikus tulajdonságai és az integrálási kontúr. További magyarázatért lásd a 4.4. ábra kísérő szövegét.

szingularitásai szeparálódnak. Így a g_{y_i} szabad Green-operátornak a $[0, \infty)$ intervallumon szakadása van, míg a g_{x_i} -nek a $(-\infty, E + i\varepsilon]$ szakadása mellett végtelen

sok az $E + i\varepsilon$ energiaértékhez torlódó pólusa van. A 4.3. ábrán szemléltetett kontúrral véges ε érték esetén eleget teszünk a (4.35) integrál elvégzéséhez szükséges feltételeknek. Ha azonban $\varepsilon \rightarrow 0$ -hoz, a g_{x_i} pólusait már nem kerüli ki a C kontúr, így ez nem lesz analitikus a kontúr által határolt tartományban, tehát a (4.35) integrál nem végezhető el. Ezért változtatni kell a kontúron. Oly módon járunk el, hogy a C kontúr felső ágát a g_{y_i} Green-operátor nem fizikai Riemann-felületére vezetjük, míg a másik (alsó) ágat oly mértékben deformáljuk, hogy kerülje el a g_{x_i} pólusait. Ily módon mind a szórási probléma mind a rezonanciafeladatok esetén a (4.35) konvolúciós integrál kiszámítható. Ezt szemléltetjük a 4.4. ábrán.



4.4. ábra. A $g_{x_1}(E - i\varepsilon - z')g_{y_1}(z')$ analitikus tulajdonságai és az integrálási kontúr. A $g_{y_1}(z')$ Green-operátornak a $[0, \infty)$ intervallumon, míg a $g_{x_1}(E - i\varepsilon - z')$ operátornak a $(-\infty, E - i\varepsilon]$ intervallumon van vágása (folytonos vastag vonal), és $\varepsilon > 0$. g_{x_1} -nek végtelen sok $E - i\varepsilon$ -nél torlódó pólusa van (körök). A C kontúr a g_{y_1} vágását oly módon zárja körbe, hogy egy része a nem fizikai Riemann-felületen halad át (szaggatott vonal) és a másik ág elkerüli a vágást. A g_{x_1} vágási vonala és néhány pólusa (telt körök) a fizikai Riemann-felületen vannak, míg más pólusok (üres körök) a g_{y_1} nem fizikai Riemann-felületén helyezkednek el. A kontúr elkerüli a g_{x_1} szingularitásait.

A \tilde{G}_i és U^i a CS-függvényekkel vett mátrixelemek ismeretében a rendszer diszkrét állapotainak meghatározásához meg kell keresni a (4.28) egyenlettel értelmezett determináns (Fredholm-determináns) zérushelyeit a komplex energiasíkon.

4.2. Rezonanciaállapotok torlódása Coulomb–háromtest-rendszerekben

Az előzőekben bemutatott módszert az $\text{Ps}^-(e^-, e^+, e^-)$ háromtest-rendszer diszkrét nem kötött állapotainak a lokalizálására alkalmaztuk. Ezt a rendszert sokan tanulmányozták az elmúlt időszakban [49, 80, 81, 82]. A H^- -hoz való hasonlósága valamint az a tény, hogy ez az egyedüli pozitronos többtest-rendszer, amelyet kísérletileg is kimutattak, arra sarkall, hogy további vizsgálatokat végezzünk rajta. A korábbi vizsgálatok során azt találták, hogy csak egy kötött ($E = -0.26005070226$ hartree) állapota és nagyon sok (talán végtelenül sok) rezonanciaállapota van. A kötési energia kis értékéből ($E_{\text{kötési energia}} = E_{\text{küszöb}}^1 - E_{\text{rendszer}} = 0.01$ a.u.) arra következtetünk, hogy a rendszer egy semleges „pozitroniumatomból” ($\text{Ps}=(e^-, e^+)$) és egy ehhez gyengén kötődő harmadik elektrontól áll. A részecskék közötti átlagtávolságok variációs módszerrel végzett számításokkal kapott értékei is igazolják ezt a feltételezést. Tehát a $\text{Ps}^-(e^-, e^+, e^-)$ rendszer egyetlen kötött alrendszerrel rendelkezik ($\text{Ps}=(e^-, e^+)$). A kéttest-alrendszernek (Ps atom) pedig végtelen sok, a szórási küszöbhez torlódó, kötött állapota van (Rydberg-állapotok, energiájuk $E_n = -1/(4n^2)$ hartree, ahol n a kéttest-alrendszer főkvantumszáma). Minden egyes n -re (kivéve $n = 1$ -et) degenerált nívók együttesét kapjuk. Ezek a kéttest-nívók képezik a háromtest-rendszer küszöbenergiáit ($E_{\text{küszöb}}^n$).

A tanulmányozott rendszerben csak egy kötött kéttest-alrendszer létezik hiszen a két elektron megkülönböztethetetlen. Az azonos részecskékhez rendelt $|\psi_i\rangle$ és $|\psi_j\rangle$ Fagyejev-komponensek a saját Jacobi-koordinátájukban azonos függvényalakokkal rendelkeznek. Jelöljük 1-essel az egyik elektront, 2-essel a másikat, így a pozitron lesz a 3-assal jelzett részecske. Vagyis $\langle x_1 y_1 | \psi_1 \rangle = \langle x_2 y_2 | \psi_2 \rangle = \langle xy | \psi \rangle$, így csak egy komponensű a formalizmus. Ennek a matematikai leírására bevezetjük a \mathcal{P} operátort, amely az 1-es és 2-es indexeket felcserélő operátor, és amelynek $p = \pm 1$ a lehetséges sajátértékei, annak függvényében, hogy az állapot teljesen szimmetrikus vagy antiszimmetrikus. Így a három egyenletből álló (4.10) csatolt egyenletrendszer a következő alakúra egyszerűsödik:

$$|\psi_1\rangle = G_1^{(l)} v_1^{(s)} p \mathcal{P} |\psi_1\rangle. \quad (4.36)$$

Továbbá azt is állítjuk, hogy a (4.36) egyenlet egzakt, és az egyetlen komponens ellenére is teljesen jól írja le a rendszer aszimptotikáját és szimmetriatulajdonsá-

gait (a Pauli-elvre vonatkozó tulajdonságokat). A numerikusan kiszámított mátrixelemek is egyszerűsödnek, hiszen az u_i^C segédpotenciál értéke nulla, így a (4.28) determináns értéke egyszerűbben határozható meg.

A diszkrét állapotok helyeinek meghatározásához a $D(z)$ Fredholm-determináns vágás közelében levő komplex zérushelyeit kell megkeresni. Ezt oly módon valósítjuk meg, hogy numerikusan kiszámítjuk a $D(z)$ determináns értékeit a komplex energiasík valós tengelye (vagy valamely véges θ értékkel elforgatott tengely) mentén, majd ezen $\{z_i, D(z_i)\}$ pontpárokra Padé-típusú racionális törtet illesztünk:

$$D^{[N,N]}(z) = \frac{P^N(z)}{Q^N(z)} = \frac{a_0 + a_1z + a_2z^2 + \dots + a_Nz^N}{1 + b_1z + b_2z^2 + \dots + b_Nz^N}. \quad (4.37)$$

A Padé-együtthatókat $2N + 1$ darab $\{z_i, D(z_i)\}$ pontpár segítségével határozzuk meg. A racionális tört ismeretében, a számlálóban levő $P^N(z)$ polinom zérushelyeit megkeressük, és ha találunk gyököt a valós tengely közelében, akkor feltételezhetjük, hogy $D(z)$ -nek is van ennek a közelében zérushelye, a megfelelő (második) Riemann-felületen.

A Padé-közelítéssel kapott zérushelyek körül egy újabb zérushely-kereső program segítségével (*ZERUS*) rákeresünk a valódi pólusokra. A *ZERUS* névű zérushely-kereső program azon a feltevésen alapszik, hogy egy $f(z) = 1/D(z)$ függvény elsőrendű pólussal rendelkezik a z_0 pontban. Ekkor a függvényt a Laurent-sorral közelíthetjük:

$$f(z) \approx \frac{c_{-1}}{z - z_0} + \sum_{n=0}^{\infty} c_n (z - z_0)^n,$$

és a $z \approx z_0$ esetén az $f(z)$ értéke tart a végtelenhez. A feltételezett zérushely körül elégséges, ha a Laurent-sor első néhány tagját használjuk. Amikor a zérushely közelében vagyunk, akkor a Laurent-sorral kapott függvényérték több nagyságrenddel nagyobb a kiindulási függvényértékeknél. Mindaddig folytatjuk a zérushely keresést (kezdőérték adás, zérushely közelítő meghatározása, újabb kezdőérték adás, felhasználva a közelítő zérushely értékét), amíg $D(z_0)$ értéke egy megkívánt nagyon kis értéket fel nem vesz. Ez az eljárás elég gyorsan bekonvergál, és pontos eredményt ad.

Természetesen a Padé-közelítéssel eljárás során álzérushelyek is megjelenhetnek. Ekkor azt tapasztaljuk, hogy a *ZERUS*-sal való keresés során nagyon eltávolodtunk

a kiindulási zérushelyektől távoli z -tartományokba, és a program nem konvergált be. Továbbá a CS-bázis méretparaméterének vagy a Merkurjev-féle vágási paramétereknek a változtatásával is kiszűrhetünk nem valódi rezonanciákat.

Végezetül azért, hogy egyetlen pólus se maradjon ki a valós tengely menti pásztázás során, a komplex analízis argumentumelvének segítségével meghatározható egy adott tartományban levő pólusok száma. Tehát, egy C' zárt görbe által körülhatárolt tartományban az analitikus $D(z)$ függvény gyökeinek $N_{C'}$ számát a következő integrál segítségével kapjuk meg:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} D'(z)/D(z) dz = N_{C'}, \quad (4.38)$$

ahol $D'(z) = dD(z)/dz$. A (4.38) integrál kiszámítását numerikusan végeztük el.

A $\text{Ps}^-(e^-, e^-, e^+)$ atomi rendszer azon rezonanciáira voltunk kíváncsiak, amelyeknél a teljes impulzusmomentum $L = 0$ (S-hullámú) és az eredő spin értéke $S = 1/2$. A két elektron eredő spinje két lehetséges értéket vehet fel az antiparalel ($s_{12} = 0$, szingulett állapot), illetve a paralel ($s_{12} = 1$ tripllett állapot) beállásnak megfelelően.

A számításokat a Coulomb-kölcsönhatás három teljesen különböző vágási paraméterére végeztük el: $x_0 = 18$ és $y_0 = 50$, $x_0 = 25$ és $y_0 = 50$, $x_0 = 5$ és $y_0 = 1000$, illetve $\nu = 2.1$ értékeket használtam mindhárom számításorozat esetén. Ily módon teszteltük a program konvergenciáját, és megvizsgáltuk azt is, hogy a kapott zérushelyek valódi rezonanciákhoz köthetők-e. Számításainkat olyan bázison végeztük el, amely $N = 20$ CS radiális állapotból épül fel, $l_{max} = \lambda_{max} = 10$ impulzusmomentum-csatorna figyelembevételével. Azt találtuk, hogy eredményeink gyorsan konvergálnak, és érzéketlenek a CS-függvények b méretparaméterére egy viszonylag széles tartományon belül. Ez esetben a potenciál szeparációs sorfejtésének bázisa $(N + 1)^2 \times (l_{max} + 1) = 21^2 \times 11 = 4851$ elemet tartalmaz. A számítások pontosságának ellenőrzése végett egy jóval nagyobb méretű számítást is elvégeztünk ($N = 30$ CS-bázisállapot és $l_{max} = \lambda_{max} = 14$ impulzusmomentum csatorna) és 5-6 értékes számjegynyi egyezést kaptunk az előző, kisebb méretű, számítási eredményekkel. Ez a pontosság az x_0 és y_0 vágási paraméterek változtatása esetén is megmaradt.

A leírt technikákat alkalmazva sikerült reprodukálni az (e^-, e^+, e^-) atomi rendszer összes eddig ismert rezonanciáját. Továbbá találtunk néhány új rezonanciát is

4.1. táblázat. *A Ps^- ion s -hullámú szingulett (az elektronok eredő spinje $s_{12} = 0$), kéttest-küszöb alatti rezonanciaállapotainak energiája és szélessége, atomi egységekben megadva. Eredményeinket a komplex skálázással elvégzett számításokkal hasonlítom össze.*

Küszöb	E_r (a.u.)	$\Gamma/2$ (a.u.)	E_r (a.u.)	$\Gamma/2$ (a.u.)
2	-0.07596457	0.00002134	-0.0760305	0.0000215 [81]
	-0.06361609	0.00000413	-0.0636	0.00004 [81]
	-0.06250453	0.000000334	—	—
3	-0.03533063	0.000037443	-0.035341881	0.00003721 [82]
	-0.02983161	0.000026792	-0.029846105	0.00002626 [82]
	-0.02805628	0.000010702	-0.028296	0.00000575 [82]
4	-0.027724943	0.000011103	-0.027725	0.000021 [82]
	-0.020213922	0.000064673	-0.020213985	0.00006506 [82]
	-0.017490957	0.000069084	-0.0175105	0.00006585 [82]
	-0.017309510	0.000078936	-0.0173109	0.00007895 [82]
5	-0.012953977	0.000056842	-0.01303094	0.00005265 [82]
	-0.011708829	0.000014448	-0.011722815	0.00002174 [82]

a kéttest-küszöbök közelében. Az eredmények egy részét a 4.1. és a 4.2. táblázatokban foglaltam össze. Ezeket az eredményeket a koordináták komplex elforgatásán alapuló számításokkal vettem össze. Látható, hogy nagyon jó az egyezés, sőt néhány esetben a már-már etalonnak számító Ho és társai [81, 82] által közölt

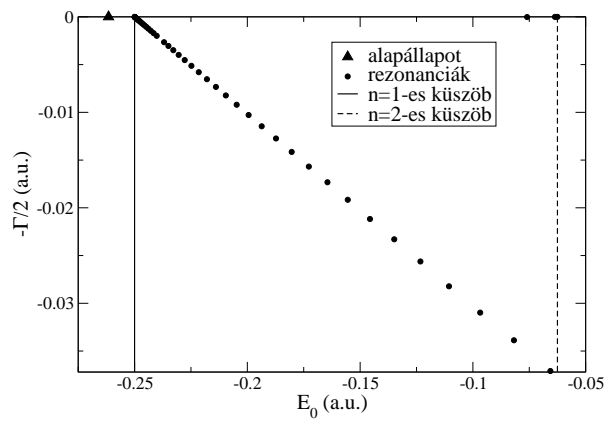
4.2. táblázat. *A Ps^- ion s -hullámú tripllett (az elektronok eredő spinje $s_{12} = 1$), kéttest-küszöb alatti rezonanciaállapotainak energiája és szélessége, atomi egységekben megadva. Eredményeinket a komplex skálázással elvégzett számításokkal hasonlítom össze.*

Küszöb	E_r (a.u.)	$\Gamma/2$ (a.u.)	E_r (a.u.)	$\Gamma/2$ (a.u.)
2	-0.063520876	1.458×10^{-9}	-0.063537356	8.1×10^{-9} [83]
	-0.062534269	2.24×10^{-10}	—	—
3	-0.02936920	9.3×10^{-8}	-0.029370695	9.25×10^{-8} [82]
	-0.02806984	5.76×10^{-8}	—	—

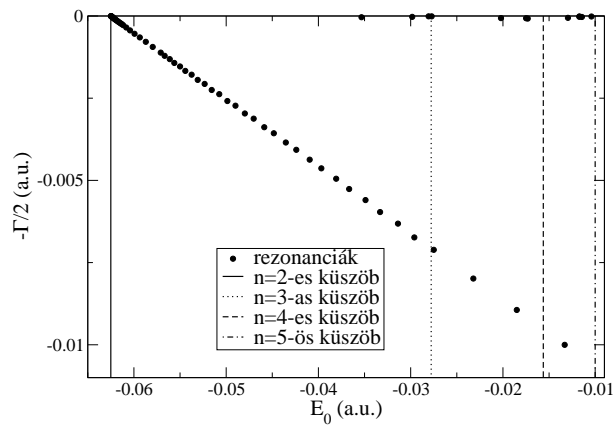
eredményeken is tudtunk javítani, amit a később elvégzett számítások is igazoltak [83, 84]. A fenti két táblázatban megadott rezonanciák lokalizálása közben olyan, küszöb fölötti rezonanciákra leltünk, amelyekre nem találtunk utalásokat az irodalomban, és ráadásul távol estek az eddig találtaktól is. Miután az ál-rezonanciaszűrősen sikeresen átmentek, elkezdtük a (4.37) egyenlettel megadott Padé-közelítéssel és az őt követő zerushely keresővel ezeket az energiatartományokat nagy alapossággal átfésülni. A kapott eredményeket a 4.5–4.12. ábrákon adom meg. A 4.5–4.9. ábrákon a Ps^- rendszernek a szingulett ($s_{12} = 0$) állapotaira kapott $n = 1, \dots, 8$ kéttest-küszöbök közötti rezonanciái láthatók. Az ábrákon az irodalomban közölt küszöb alatti rezonanciákat is feltüntettem, valamint az első ábrán a rendszer egyetlen kötött állapota is látható. Továbbá, a 4.10–4.12. ábrákon a rendszer triplett ($s_{12} = 1$) állapotára kapott rezonanciákat adtam meg. Az eredményeink atomi egységekben értendők. Azt találtuk, hogy a rendszernek nagy számú rezonanciája van, amelyek egy olyan egyenes mentén helyezkednek el, amely a küszöb irányába mutat. A komplex energiasíkon kapott egyenes iránytangensére $\text{tg}\theta \approx -0.1$ adódik, és az egyenesen elhelyezkedő rezonanciák, a torlódási küszöbötől kiindulva más kéttest-küszöbökön is áthaladnak. Magasabb küszöböknél nem egy hanem két egyenes mentén helyezkednek el a kapott rezonanciák (lásd 4.7–4.9. ábrákat).

Az elektronnak pozitroniumon való szórására irányuló számítások nem igazolták a hozzájuk fűzött reményt. A küszöb alatti más számítási módszerekkel is lokalizált rezonanciák esetén a fázistolásban jelentkezett a rezonanciákra jellemző $\pi/2$ -tes ugrás, amely a hatás keresztmetszetben kis struktúrákat, oszcillációkat eredményez. Az egyenes mentén torlódó rezonanciákra nem kaptunk meggyőző eredményeket, de ez magyarázható, hiszen a torlódó rezonanciák olyan közel vannak egymáshoz, hogy a hatás keresztmetszetben keletkezett struktúrák egymásra tevődésük során egyszerűen kioltják egymást, és marad a kiátlagolt függvény.

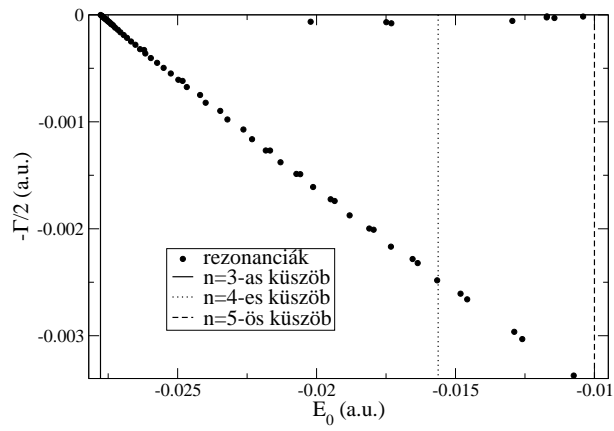
Más háromtest-rendszereken ($e^+ + \text{H}$, $e^- + \text{H}$) végzett előzetes tanulmányok is megerősítették az eredményeket, és alátámasztják abbéli hitünket, hogy a jelenleg általános a – részben vonzó – Coulomb-kölcsönhatást tartalmazó háromtest-rendszerekben. Torlódási pont gyanánt, akár a hidrogénatom kötött állapotai, akár a pozitronium kötött állapotai, vagyis a kéttest-küszöbök szolgálnak.



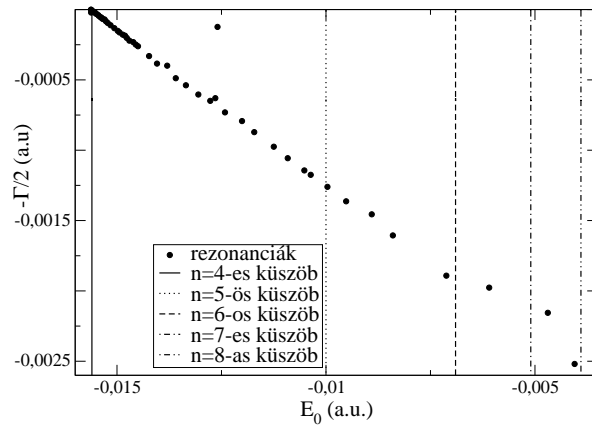
4.5. ábra. A Ps^- S -hullámú szingulett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 1$ -es kéttest-küszöbnél.



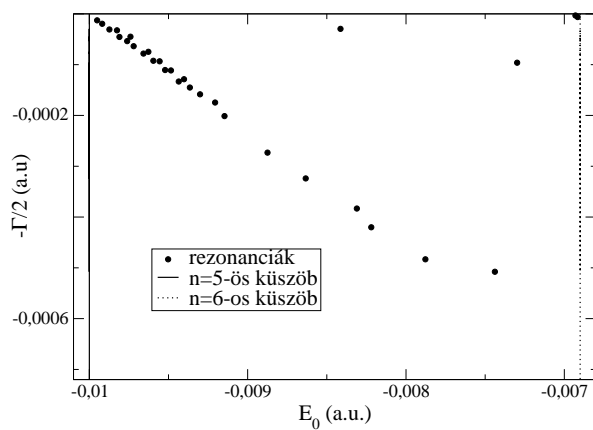
4.6. ábra. A Ps^- S -hullámú szingulett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 2$ -es kéttest-küszöbnél.



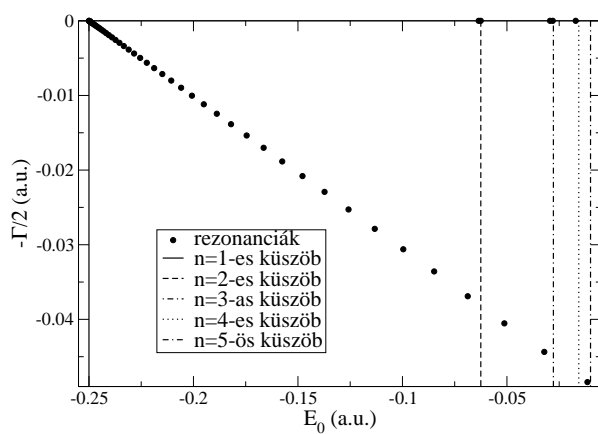
4.7. ábra. A Ps^- S -hullámú szingulett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 3$ -as kéttest-küszöbnél.



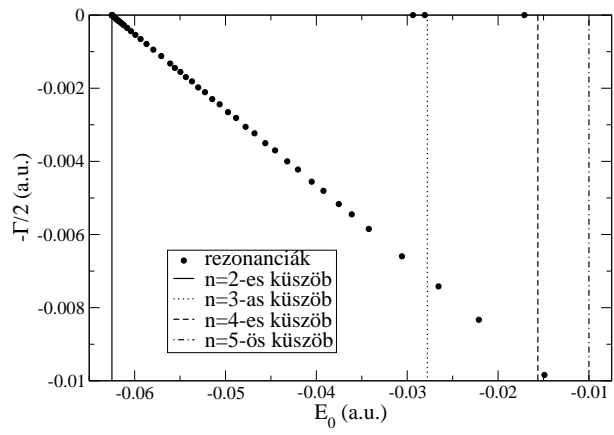
4.8. ábra. A Ps^- S -hullámú szingulett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 4$ -es kéttest-küszöbnél.



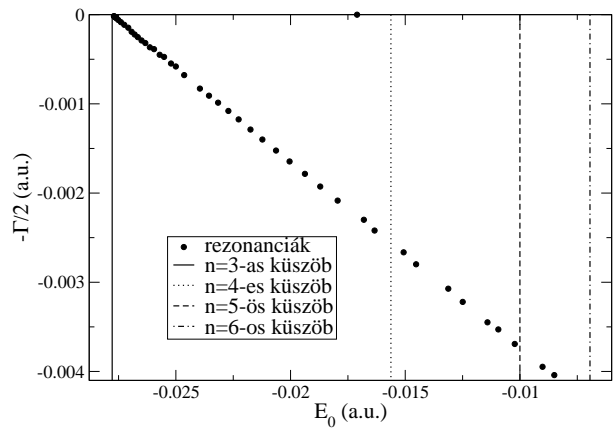
4.9. ábra. A Ps^- S -hullámú szingulett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 5$ -ös kéttest-küszöbnél.



4.10. ábra. A Ps^- S -hullámú triplett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 1$ -es kéttest-küszöbnél.



4.11. ábra. A Ps^- S-hullámú tripllett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 2$ -es kéttest-küszöbnél.



4.12. ábra. A Ps^- S-hullámú tripllett rezonanciaállapotainak torlódása az $n = 3$ -as kéttest-küszöbnél.

Köztudott, hogy rövid hatótávolságú potenciálban nulla vagy véges számú kötött állapot alakul ki. Az aszimptotikusan lecsengő, hosszú hatósugarú potenciálok esetén a helyzet egy kissé megváltozik. [1] szerint, amennyiben a potenciál aszimptotikus viselkedése olyan, hogy $r^2V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\infty$, vagyis $1/r^2$ -nél lassabban tart nullához, akkor megszámlálhatóan végtelen kötött állapotunk van. Ha azonban a kölcsönhatás $1/r^2$ -nél gyorsabban tart nullához, akkor a kötött állapotok száma véges. Problematikus helyzettel állunk szemben akkor, amikor a $V(r) = -\beta/r^2$. Ezidáig ugyanis az origóban a hullámfüggvény szinguláritása „jó tulajdonságú” volt ($r^2V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$). A $-\beta/r^2$ potenciálra azonban ez a jó tulajdonság megszűnik, és [2] szerint: ha $\beta > 1/4$, akkor a diszkrét spektrum végtelen sok negatív energianívót tartalmaz.

Ezeket felhasználva Nuttal és társai [85] a szoros csatolás módszere segítségével¹ azt találták, hogy degenerált kététest-küszöbök esetén (a kététest-rendszer főkvantumszáma $n \geq 2$) a háromtest–Schrödinger-egyenlet két független $V(r) \sim -\beta/r^2$ -tel arányos kölcsönhatást tartalmazó másodrendű differenciálegyenletre redukálódik, és a rendszerben kialakuló rezonanciaállapotok száma végtelen lesz.

A számítási eredményeink azonban, lásd 4.5. és 4.10. ábrák, azt mutatják, hogy a jelenség nem csak a degenerált, hanem a nemdegenerált küszöbű ($n = 1$) kététest-alrendszer esetén is jelentkezik. A szoros csatolásos számításban az $n = 1$ -es küszöb környékén, az úgynevezett polarizációs potenciál $V(r) \sim -\beta/r^4$ -nel arányos, és ez véges számú rezonanciát jósol. Tehát, nem lehet egyértelműen kijelenteni, hogy a polarizációs potenciál lenne a felelős a rezonanciák torlódásáért.

Egy másik mechanizmus, amellyel magyarázni lehet a torlódási jelenséget, az az ún. *Jefimov-jelenség* [86]. Ennek lényege abban áll, hogy ha a kététest-alrendszernek nagyon gyengén kötött (határesetben nulla energiájú) $L = 0$ impulzusmomentumú állapota van, akkor a háromtest-rendszerben nagyon sok (határesetben végtelen sok) kötött állapot alakul ki. Ha a kététest-kölcsönhatás erősségét drasztikusan megváltoztatjuk, erősen bekötve, vagy kontinuumba kitolva a kététest s-állapotot, akkor a jelenség megszűnik.

Coulomb–háromtest-rendszerekben, a kötött kététest-alrendszerek végtelen sok

¹A szoros csatolás módszere szerint a háromtest-hullámfüggvény kététest-atomi pályák, valamint a kététest-tömegközéppontja és a harmadik részecskét összekötő Jacobi-koordinátában ismeretlen függvény szorzataként írható fel, így a Schrödinger-egyenlet csatolt egyenletrendszerre alakul.

a nulla energiához torlódó kötött állapota van. Így el lehet képzelni, hogy ezek az állapotok - egy gyengén kötött állapot végtelen sok kötött állapotot hozhat létre a háromtest-rendszerekben - végtelen sok, a küszöböknél torlódó rezonanciaállapotot hozhatnak létre az atomi háromtest-rendszerekben.

A Jefimov-jelenség nagy figyelmet kapott az elmúlt időszakban. Magfizikában, illetve semleges atomok közötti szórás kísérletekben írták le létezését [10, 58, 88].

A jelenséget leíró elméleti munkák rövid hatósugarú magfizikai kölcsönhatást feltételeznek, illetve a semleges atomokra vonatkozóan, az atomok „molekulákká” (három atom kvázikötött rendszere) való alakulását Van der Waals-típusú kölcsönhatások segítségével írták le. Végeredményben elmondhatjuk [87, 89, 90], hogy a számítások során az effektív kölcsönhatás a rendszer méretét leginkább kifejező koordinátában (hiperszférikus koordinátákban) $1/R^2$ viselkedést mutat, ahol R a hipersugár. Az $1/r^2$ szerint változó kölcsönhatások esetén pedig, [85] végtelen sok rezonanciaállapot alakulhat ki a háromtest-rendszerekben.

Az Jefimov-állapotok két fontos tulajdonságát hangsúlyoznám ki:

- i)* ezek az állapotok gyengén kötött állapotok, és méreteik (négyzetes középtávolságaik) jóval nagyobbak, mint a kéttest-alrendszerre jellemző méretek;
- ii)* a gerjesztett Jefimov-állapotok skálázási tulajdonságot mutatnak, vagyis $E/E_0 \sim e^{-\frac{2\pi}{\gamma}n}$, ahol E_0 az első Jefimov-állapot energiája, n egy természetes szám, és γ pedig egy valós szám.

A kapott rezonanciahelyek küszöböktől vett távolságai eleget tesznek a második tulajdonságnak. Az első tulajdonság vizsgálata azonban még folyamatban van. Első lépésben azt a nem triviális feladatot szeretnénk megoldani, hogy a Fagyejev–Merkurjev-egyenletek segítségével a hullámfüggvény háromtest-konfigurációs térbeli közelítő alakját meghatározzuk. Azt várjuk, hogy a hullámfüggvény egy gyengén kötött állapotra jellemző szétterülő alakot mutat.

Összefoglalva az eddig elmondottakat, a rezonanciaállapotok küszöböknél való torlódási jelenségének magyarázatára két lehetséges mechanizmust említünk meg. Ezek közül mindkettőnek lehet szerepe a torlódó rezonanciák kialakulásában. Tehát, ezen kérdés is további vizsgálatokat igényel. Hasonlóan vizsgálni szeretnénk, hogy más típusú háromtest-rendszerek, mint például a molekuláris ionok (M^+, M^+, m^-), esetén jelentkezik-e ez a viselkedés. Érdekes lenne megvizsgálni, hogy a kéttest-kölcsönhatás drasztikus változtatására eltűnik-e a jelenség.

Összefoglalás

A dolgozatomban a néhánytest-fizika módszereinek és feladatainak több témakörét érintettem, a tanulmányozott két, három és öt, valamint hét részecskéből álló rendszereken keresztül. A két- és háromtest-rendszerek esetén a rezonanciaállapotok lokalizálása (energiájuk és szélességük meghatározása) és fizikai mennyiségek kiszámítása volt a cél, míg az öt részecskéből álló rendszereknél a legalacsonyabb kötött állapotokat határoztam meg, és a rendszerek stabilitását tanulmányoztam. Vizsgálataimhoz részben kész programok álltak rendelkezésemre, részben pedig saját fejlesztésű FORTRAN programokat használtam. A továbbiakban saját eredményeimet a dolgozatom felépítését követve fogom összefoglalni, kiemelve a legfontosabb eredményeket, következtetéseket.

Kötött állapot problémák

A korrelált Gauss-függvényekkel felépített, stochasztikus eljárással optimalizált variációs módszer [11] segítségével meghatároztam néhány érdekes néhánytest-rendszer legalacsonyabb energiájú állapotát, ezáltal mintegy igazolva kötött, stabil létüket is. Elég nagy azon rendszerek halmaza, amelyeket öt egységnyi töltésű, különböző tömegű részecskéből építhetünk fel. Vizsgálataimhoz ezek közül olyan rendszereket választottam, amelyek az atom- és molekulafizikában és a szilárdtest-fizikában játszanak fontos szerepet.

A kötött öttest-rendszerekre vonatkozó egyik fontos következtetés az, hogy a rendszer eredő töltése ± 1 , vagyis nem találtunk a természetben például $(+, -, -, -, -)$ típusú kötött rendszert. Egy másik fontos következtetés az, hogy amennyiben a $(+, +, -, -, -)$ vagy $(+, +, +, -, -)$ típusú rendszereket alkotó részecskék tömege azonos vagy közel azonos, de megkülönböztethetők egymástól,

akkor ezek akár kötött rendszert is alkothatnak. A stabilitást a Pauli-elv és a részecskék tömegaránya befolyásolja. A Pauli-elv erősen korlátozza a részecskék számára igénybe vehető fázistértartományt, sokszor mintegy tiltva azon legmélyebb állapotok betöltését, amelyek a rendszert kötötté tennék. Így például egy $(m^+, m^+, m^+, m^-, m^-)$ típusú megkülönböztethetetlen fermionokból álló rendszer nem kötött, de amennyiben megkülönböztetett részecskéként (vagy bozonokként) kezeljük őket, kötött rendszert alkotnak.

Azt találtuk továbbá, hogy a $(3e^-, 3e^+)$ hat fermionból alkotott rendszer sem kötött. Az öttest-rendszerhez hasonlóan, viszont a hattest-rendszer is kötötté válik, ha bozonokként kezeljük a részecskéket, vagy ha egy elektront és egy pozitront megkülönböztetünk társaiktól. A stabilitáshoz az kell ugyanis, hogy a felcseréléssel szemben teljesen szimmetrikus állapot, amely kötöttnek adódik, megengedett legyen. Az előbbieken elmondottak alapján az a sejtés fogalmazható meg, hogy az (ne^-, me^+) , $n, m > 2$ fermionokból álló rendszerek nem alkotnak stabil, kötött rendszert.

Vizsgálataim során általában valamelyik ismert stabil rendszerből indultam ki. A már ismert stabilitási eseteket úgy általánosítottam, hogy valamelyik vagy akár több összetevőjének a tömegét megváltoztattam. Így például a H_3^+ öttest-rendszerből kiindulva bebizonyítottam, hogy az $(M^+, M^+, M^+, m^-, m^-)$ típusú rendszerek $\sigma = m/M < 0.2$ tömegarányokra kötött rendszereket alkotnak, így a stabil H_3^+ mellett néhány egzotikus rendszer pl. a $(p^+, p^+, p^+, \mu^-, \mu^-)$ is stabil. A tömegarányra vonatkozó korlát megegyezik az adiabatikus leírhatóság feltételével, ezért azt mondhatjuk, hogy az ilyen rendszerek csak akkor stabilak, ha a három nehéz részecske lassú mozgása adiabatikusan kezelhető. A H_3^+ rendszer akkor is stabil marad, ha a két protonjának tömegét egy kicsivel az elektrontömeg alá csökkentjük. A H_2 és Ps_2 rendszerek közötti kapcsolathoz hasonlóan a módosított H_3^+ -ből (a három protonból egyet megkülönböztetünk a többektől) a $(p^+, e^+, e^+, e^-, e^-)$ rendszerekbe át tudunk menni, ha változtatjuk a kétféle pozitív töltésű részecske tömegét. Az ebbe a családba tartó stabil egzotikus atomi rendszerek közül megemlítem a $(p^+, p^+, \mu^+, e^-, e^-)$ és $(p^+, \mu^+, \mu^+, e^-, e^-)$ rendszereket.

Érdekes esettel állunk szemben, amikor három nehéz töltés pl. $(+, +, -)$ egy „összetett” részecskét alkot, és a hozzá csatlakozó két könnyű részecske nem polarizálja vagy változtatja meg az összetett részecske struktúráját. Ebben az esetben az öttest-rendszer jó közelítéssel három részecskéből állónak tekinthető, és alkal-

mazhatók a három testre kapott már jól ismert eredmények. Összetett részecskére példaként megemlíthetjük a (p^+, p^+, p^-) , (p^+, p^+, μ^-) , vagy a (t^+, d^+, μ^-) rendszereket, amelyekhez két könnyebb (elektron, vagy pozitron) részecskét csatlakoztathatunk. Ezen öttest-rendszerek háromtest-modelljét a részecskék közötti kiszámított átlagtávolság-értékek támasztják alá. Ezek a rendszerek jó közelítéssel úgy viselkednek, mint a H^- ion. A fennebb említett rendszerek mellett ebbe a családba tartozik az antiprotont bekötő hidrogénmolekula ($\bar{p}H_2 = (p^+, p^+, p^-, e^-, e^-)$) is. Az, hogy a $(+, +, -)$ összetett rendszer mikor tekinthető belső struktúra nélküli egységöltésnek, nagymértékben függ a háromtest-rendszer és a két „valencia”-részecske tömegarányától. Így a e^+H_2 vagy e^+Ps_2 öttest-rendszerek nem írhatók le (X^+, e^+, e^-) típusú háromtest-rendszerekként, mivel nincs bennük olyan $(+, +, -)$ alrendszer, amely belső struktúra nélkülüként viselkedne.

Érdekes, mekkora különbségre bukkantam két, szinte azonosnak vélhető rendszer között. A H_2 molekula akár egy pozitív, akár egy negatív müonnal kötött rendszert alkot. Míg az első esetben a három pozitív töltött részecske egy egyenlőszárú háromszög csúcspontjaiban helyezkedik el osztozva a két elektronon (a részecskék közötti átlagtávolság azonos nagyságrendű), addig az utóbbi esetén a három nehéz (két pozitív és egy negatív töltés) gyakorlatilag egységnyi töltésű egyetlen nehéz részecskeként viselkedik, és ehhez kötődik a két elektron. A nehéz részecskék közötti átlagtávolság öt nagyságrenddel kisebb, mint az elektronok nehéz töltésektől vett távolságának az átlaga.

Vizsgáltaim arra a kérdéskörre is kiterjedtek, hogy mely részecskék alkotnak kötött rendszert a Ps_2 dipozitróniummal. A protonnal alkotott stabil öttest-rendszer vizsgálatából levonható az a következtetés, hogy a Ps_2 „molekula” nagymértékben deformálódik, a rendszer egy kompakt HPs négytest-rendszerként és egy ehhez gyengén kötődő, a többi részecskétől jóval távolabb elhelyezkedő pozitronként szemléltethető. Ezt mutatják ugyanis a e^+HPs rendszerre meghatározott részecskék közötti átlagtávolság-értékek.

A két pozitront bekötő H^- ionra kapott eredmények hatására megvizsgáltam, hogy más negatív ion képes-e bekötni két pozitront, és kialakul-e a néhánytest-rendszerben egy kompakt Ps_2 „molekula”, vagy a e^+PsH -hoz hasonlóan egy eltorzult változata alakul-e ki. A $(Li^-, e^+, e^+) = Li^+Ps_2$ héttest-rendszerre, egy régebbi számítás javított változatát végeztem el, amelyben öt aktív részecske van: a Li atommaghoz erősen kötött két passzív elektron egyetlen részecskét alkot, és ef-

fektív erőt fejt ki a Ps_2 részecskéire. Hasonló modellben megvizsgáltam a Na^+Ps_2 rendszert is. Azt találtam, hogy a rendszerek stabil, kötött rendszert alkotnak, és a Ps_2 „molekula” a nehéz kationok torzító hatása ellenére megőrzi geometriai struktúráját.

Az előbbi modellszámítás eredményeit egy sokkal egyszerűbb modellben is megkaptam, amelyet a $(e^+, e^+, e^-, e^-, m_{x^+})$ szimbólummal jelölhetünk. Itt a „nehéz” részecske effektív tömege kisebb az elektronénál ($m_{x^+} = 0.7m_e$). Az m_{x^+} effektív tömeget az az előírás határozta meg, hogy az (m_{x^+}, e^-) rendszer kötési energiája megegyezzen a Li atom kötési energiájával.

A szilárdtest-fizikai kutatásokban nagy érdeklődés mutatkozik a félvezetőkben levő excitonkomplexek (elektronok (e) és lyukak (h) rendszere) iránt. Az $(M^+, m_{x^+}, m_{x^+}, e^-, e^-)$ -re és alrendszeire kapott eredményeim az (e, e, h) , (e, h, h) , (e, e, h, h) rendszerekre vonatkozathatók. A $(e^+\text{PsH})$ és az $(M^+, m_{x^+}, m_{x^+}, e^-, e^-)$ rendszerek kötött állapotai arra utalnak, hogy a biexciton (két-két elektrontól és lyuktól álló rendszer) képes kötött rendszert alkotni egy donor szennyezéssel (egy rögzített pozitív töltés a félvezetőben). Hasonló példa lehet a kötött öttest-rendszerekre (e, e, h, h, h) , illetve az általánosabb (e, e, h, h, h') rendszer, ahol az egyik lyuk különbözik a többitől.

Az ebben az alponthan ismertetett eredményeim az [A1]-gyel jelzett munkában jelentek meg.

Rezonanciaproblémák

A diszkrét nem kötött állapotok az S-mátrix pólusaihoz rendelhetők. Tanulmányozásuk általánosított kötött állapotú módszerekkel vagy a határfeltételeket magukba foglaló integrálegyenletek (Lippmann–Schwinger-, Fagyjev-egyenletek) segítségével végezhető el. A dolgozatom második felében két módszert mutattam be a rezonanciaállapotok tanulmányozására.

A csatolási állandóbeli analitikus folytatás

A potenciálban mozgó részecskéhez rendelt S-mátrix pólusa a potenciálvölgy mélységének változtatásával (a vonzó potenciáltághoz rendelt λ csatolási állandón keresztül) egy trajektória mentén mozog. Ily módon a potenciálvölgy emelésével a részecske kötött állapotai kitolhatók, a nemkötött tartományba (a komplex k -sík

fizikai Riemann-felületről a nemfizikai Riemann-felületre), ahol mint rezonanciák jelennek meg. Vagyis kötött állapotokból kiindulva analitikus folytatás segítségével a rezonanciaállapotok lokalizálhatók, illetőleg egy fizikai rendszer rezonanciáinak a helye meghatározható a λ segítségével elkészített kötött állapotú segédproblémák sorozatának megoldásával, és az eredmények a λ fizikai értékére való extrapolálásával. Az extrapoláció sikere attól függ, hogyan sikerül a pólus trajektóriáját a kötött és a rezonanciatartomány közötti törésponton/elágazási ponton átvezetni. A pólus helyzete a hullámszám-síkon mint λ függvénye, az elágazási pont környezetében legjobban racionális törttel (Padé-alak) közelíthető.

A csatolási állandóbeli analitikus folytatáson alapuló módszert, egy modellproblémán keresztül részletes vizsgálatnak vettem alá. Több eljárás segítségével meghatároztam az analitikus folytatáshoz szükséges paramétereket (Padé-együtthatókat), és kiválasztottam a legjobb eredményt adó lánctörtes Padé-közelítést. A Padé-paraméterek meghatározásához kötött állapotú számításokra van szükség. Ezeket egy geometriai sor segítségével felépített Gauss-bázisú variációs módszerrel végeztem el [11]. A numerikus kivitelezéshez FORTRAN programokat kellett kifejlesztenem. Ezen modellproblémára meghatároztam a pólusok által leírt trajektóriákat. Eredményeimet a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásán alapuló eredményekkel vettem össze [66].

A rezonanciaállapotok lokalizálása mellett meghatároztam a rendszer méretére utaló átlagtávolságokat. Azt találtam, hogy a rezonanciaállapotokra kapott $\langle r^2 \rangle$ átlagérték - mint λ függvénye - az elágazási pont környezetében levő szingularitás egy környezetét kivéve, folytatása a kötött állapotú átlagértéknek. A szingularitás annak felel meg, hogy a kötött és a rezonáns tartomány között egy keskeny virtuális tartomány is van. Ebből arra lehet következtetni, hogy ha a trajektóriának nincs virtuális szakasza (a potenciálproblémában $l > 0$ esetén), akkor az $\langle r^2 \rangle$ -nak nincs szinguláris szakasza.

A kötött állapotú hullámfüggvényekből kiindulva, több eljárás segítségével is elvégeztem a részecske hullámfüggvényének analitikus folytatását. A kapott hullámfüggvények a belső tartományban jól adják vissza a Gamow-függvényt, de az aszimptotikus viselkedést nem. Ezért egy új módszert dolgoztam ki a hullámfüggvény meghatározására, amelynek eredménye nagyon jól egyezik a numerikusan egzakt eljárással kapott hullámfüggvénnyel, még a nehezen kezelhető aszimptotikus tartományokban is.

A módszert az instabil ${}^8\text{Be}$ mag $l = 0, 2, 4$ impulzusmomentumú rezonanciaállapotainak a meghatározására alkalmaztam. Nagyon jó egyezést kaptam mind a azonos modellben végzett numerikusan egzakt számítási eredményekkel, mind egy realisztikusabb kéttest-kölcsönhatással végzett *ab initio* számítással. Mivel az egyezés a kísérleti eredményekkel jó, elmondható, hogy a két α -csomós modellünk jól írja le a ${}^8\text{Be}$ mag rezonanciaállapotait. Kéttest-kölcsönhatásként az Ali–Bodmer-kölcsönhatást [65] használtam, amelyet az $l = 0, 2$ impulzusmomentumú α szórási kísérleti adatok felhasználásával határoztak meg. Ez – kis változtatással – az $l = 4$ -es, g-hullámú rezonanciára kielégítően leírja a kísérletet.

Az ebben az alponban ismertetett eredményeim az [A2]-vel jelzett munkában jelentek meg.

A Coulomb-háromtest-rendszerek rezonanciaállapotainak a lokalizálása nehéz feladat a csatolási állandóbeli analitikus folytatás alkalmazásával hiszen, mint láttuk, a Hamilton-operátor tömeg- vagy töltésbeli skálázása nem befolyásolja a rendszer kötött mivoltát. Ily módon a kölcsönhatás mechanikus átskálázásával nem lehet a kötött állapotokat áttolni a rezonanciatartományba, sem pedig fordítva. Az analitikus folytatás a küszöböt nem befolyásoló kéttest- vagy háromtest-segédpotenciál segítségével elvben megvalósítható, de nehezen kivitelezhető.

Coulomb–háromtest-rezonanciaállapotok

Az egységnyi töltésű három testből álló Coulomb-rendszerek rezonanciaállapotainak energiáját a homogén Fagyjev–Merkurjev-egyenletek Coulomb–Sturm-bázison való megoldásával határoztam meg [73]–[77]. A két elektronból és egy pozitronból álló Ps^- pozitronium iont tanulmányoztam. A vizsgálataimhoz előzményként a [73] munkákat használtam fel. Az említett munkákban a rezonanciakeresés két lépésben valósult meg, az elv pedig a Fredholm-determináns zérushelyeinek megkeresésén alapszik. Első lépésként egy széles energiatartományon, különböző energiaértékekre meghatározták a Fredholm-determináns értékét, majd intuitív módon, a determinánsérték valós és képzetes részének a vizsgálatából egy becslést kaptak a rezonanciahelyre. A második lépésben a becsült rezonancia-energiaérték környezetében újra meghatározták néhány energiaértékre a Fredholm-determináns értékét, majd egy pontosabb zérushelykereső segítségével meghatározták ennek a zérushelyeit, azaz a rezonanciaenergiát.

Az előbbieken ismertetett eljárás első lépését, amely a rezonanciahelyek közelítő meghatározására irányul, egy új eljárással helyettesítettem. Ennek lényege abban áll, hogy a valós energiatengellyel párhuzamos egyenes, vagy a valós tengellyel tetszőleges szöget bezáró egyenes mentén meghatároztam a Fredholm-determináns értékeit. A kapott értékekre egy racionális törtet (Padé-alakot) illesztettem, majd meghatároztam a számláló zérushelyeit. A vizsgált energiatartományhoz közel eső zérushelyeket használtam fel a második lépésben. Ezzel az újítással könnyebbé vált a rezonanciák keresése.

A leírt technikákat használva sikerült reprodukálnom az összes eddig ismert rezonanciát a Ps^- atomi rendszer esetén, továbbá néhány újat is találtam a kéttest-küszöbök közelében.

Az energiatartományok alapos tanulmányozása rávilágított arra, hogy a rendszernek sok rezonanciája van, amelyek egy, a küszöb irányába mutató egyenes mentén helyezkednek el, és ezek a rezonanciák a küszöbök közelében torlódnak. Ez a jelenség nemcsak a magasabb küszöbök esetén, hanem már a első, a hidrogén alapállapotának megfelelő, küszöbenergíanál is jelentkezik. Továbbá az is kiderült, hogy magasabb küszöböknel ($n > 3$), nem egy, hanem két (vagy több) egyenes mentén helyezkednek el a torlódást mutató rezonanciák.

Rámutattam arra, hogy az egyenes mentén torlódó, végtelen sok rezonancia és a két egyenes léte, a háromtest-problémát közelítőleg helyettesítő kéttest-rendszerbeli $1/r^2$ -es aszimptotikus kölcsönhatással magyarázható. E viselkedés magyarázatára két lehetséges mechanizmust tekintettem át a dolgozatban. Az egyik a hidrogénszerű alrendszert polarizáló harmadik, gyengén kötött részecske hatása, a másik pedig az úgynevezett Jefimov-jelenség. Az eddigi vizsgálatok alapján nehéz egyértelműen kijelenteni, hogy melyik mechanizmus felelős a jeleségért, bár mi a Jefimov-jelenséget valószínűsítjük, mert a polarizáció az alapállapotú kéttest-küszöbhez illeszkedő rezonanciasorozatot nem magyarázza. De a mechanizmus tisztázására további tanulmányokra van szükség. Az általunk talált érdekes jelenség másutt is előfordul, amint ezt más háromtest-rendszereken ($e^+ + H$, $e^- + H$) végzett előzetes vizsgálataink alátámasztják.

Az ebben az alpontban ismertetett eredményeim az [A3, A4]-gyel jelzett munkákban jelentek meg.

Summary

The microscopic world as well as the macroscopic world consists of complex many-body systems with many degrees of freedom. The experimental studies of physical systems usually start with processes that involve just a few degrees of freedom, and the theoretical framework for understanding of the complex microscopic world is developed step by step. The theoretical description can be attained along two almost „orthogonal” paths. According to the many-body or statistical theory the system is considered an assembly of many or infinitely many interacting objects, to which statistical methods can be applied. But in the most typical modes of motion the many-body systems have just a few active degrees of freedom, so their description can be reduced to collective models or to few-body models. But even the statistical methods require the knowledge of the elementary processes involving few particles, and the applicability of the many-body methods to few-body systems may be a benchmark of the methods.

Exhaustive knowledge on the few-body systems which are the most trivial multiparticle systems belongs to the fundamental problems of quantum mechanics. Experimentally, this requires spectroscopic studies, while theoretically it requires quantum mechanical structure calculations. Not only the bound-states, but also the resonance and virtual states are to be studied.

In the thesis bound, resonance and virtual states of several few-body systems were studied with different well-established methods. The bound nature of systems was studied with the stochastic variational method. The discrete unbound states (resonance and virtual states) can be considered generalization of the bound-states because they also belongs to poles of the scattering matrix. That is why the discrete unbound states can be described via bound-state type methods of which analytic continuation in the coupling constant has been studied. The goal was to improve

the applicability of this method and to obtain new information on some few-body systems.

1. I have calculated the ground-state energies of several few-body systems using the stochastic variational method with correlated Gaussian bases. A system has been identified as bound (i.e., stable) if a state has been found below the lowest-lying threshold. The results of these studies can be summarized in the following way:
 - (a) I studied the stability of the (ne^\pm, me^\mp) , $n, m = 2, 3$ five and six-body systems. I have found that these systems have no bound states if the particles are considered fermions. However if the fifth and sixth particles are assumed to be distinguishable from the others, or they are treated as bosons, the systems will become stable [A1].
 - (b) Starting from a bound atomic five-body system and by changing the mass(es) of one (or several) particle(s) I determined stability conditions for the mass ratio(s). In this way I was able to evaluate the ground-state energies of other physical systems belonging to the same family of systems. Having determined the average distances between the particles I drew conclusions concerning the possible geometrical structures of the five-body systems studied. For example, in the $(M^+, M'^+, M'^+, m^-, m^-)$ system the three heavy particles (M) form an isosceles triangle and share the remaining two light particles (m). In contrast, in the apparently very similar $(M^+, M'^+, M'^-, m^-, m^-)$ system the three heavy particles behave as a single point-like positively charged entity, which bonds the two light particles. This simplified picture is corroborated by three-body model calculations [A1].
 - (c) It is an intriguing question whether a heavy positive unit charge can bind a Ps_2 positronium molecule. I have found that not only the $p\text{Ps}_2$ system but the Li^+Ps_2 and Na^+Ps_2 systems also have bound states. Studying the average distances I have found that the $p\text{Ps}_2$ system undergoes a serious distortion and becomes something like an $e^+\text{HPs}$, while in the case of the heavier cores the structure of the Ps_2 molecule remains more or less intact. I have shown that these many-body systems can be

- described in the framework of a more simple $(e^+, e^+, e^-, e^-, m_{x^+})$ -type five-body model [A1].
2. I performed a detailed study of the method of analytic continuation in the coupling constant for resonances of a model problem.
 - (a) I have studied different versions of Padé approximation to the basic equation of the method to single out the one which provides the highest accuracy for the wave number of the resonance state. The continued fraction variant turned out to be the appropriate procedure [A2].
 - (b) In addition to the positions and widths, I determined the mean square radii of the resonance states of the model two-body system. I have found that the mean square radius as a function of the coupling constant has a singularity near the branch point. Excluding this singularity region, I have found that the mean square radius for the resonance states follows the pattern of the corresponding bound-state values [A2].
 - (c) I have developed a new method of determining the wave function of resonance states [A2].
 - (d) I have applied the method to determining the s-, d- and g-wave ($l = 0, 2, 4$) resonances of the unstable nucleus ${}^8\text{Be}$. I have found very good agreement of our naive, two α -cluster model calculations with the direct numerical integration, with a more sophisticated *ab initio* calculation and with the experimental data. Making some reasonable changes in the two-body interaction, we have even improved the agreement with the experimental energy and width for the g-wave resonance [A2].
 3. I studied the resonance states of the $\text{Ps}^- = (e^-, e^+, e^-)$ Coulombic three-body system by solving the homogeneous Faddeev-Merkuriev equations. I have reproduced all the published resonances and found even more below the $(e^-e^+) + e^-$ thresholds. In addition to these resonances, I have found many unknown resonances lying over the thresholds along lines pointing to the two-body thresholds. These sets of resonances have accumulation points near the thresholds [A3]. I have discussed the possible mechanisms responsible for these resonances, and identified the Efimov effect as the most probable mechanism [A4].

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom az Atomki Elméleti Fizikai Osztálya munkatársainak, akik tanulmányaim során és a dolgozatom elkészítésében segítségemre voltak.

Külön köszönöm témavezetőimnek Dr. Lovas Rezső akadémikusnak és Dr. Papp Zoltán professzornak (California State University, Long Beach) a tanácsokat, amelyekkel megfelelő irányt mutattak a problémák megoldásához, és akik segítségével a jelen dolgozat nem készülhetett volna el.

Szeretném kiemelni Dr. Kruppa András tudományos tanácsadó és Dr. Vertse Tamás professzor urakat, akikkel a sok érdekes diszkusszió során nem csak a fizikáról alkotott látóköröm gazdagodott. Itt kell megemlítenem Dr. Varga Kálmánnak is, aki nagymértékben hozzájárult az eredmények egy részének létrejöttéhez. Köszönetet szeretnék mondani Dr. Yasuyuki Suzuki professzor úrnak is, aki a Japánban tett látogatásom során hasznos tanácsokkal látott el.

Köszönettel tartozom Dr. Orbán Andreának dolgozatom figyelmes elolvasásáért és a kitartó érvelésekért a dolgozat elkészítése során. Végezetül köszönöm Édesanyámnak.

Publikációk és előadások

- [A1] J. Zs. Mezei, J. Mitroy, R. G. Lovas and K. Varga: *Properties of some exotic five-particle systems. Physical Review A* **64**, 2501 (2001).
- [A2] R. G. Lovas, J. Zs. Mezei and T. Vertse: *Resonating clusters. A New Era of Nuclear Structure Physics. Proceedings of the International Symposium. Kurokawa Village, Niigata, Japan, 19-22 Nov., 2003. Eds.: Suzuki, Y., Ohya, S., Matsuo, M. et al. New Jersey etc, World Scientific (2004)141.*
- [A3] Z. Papp, J. Darai, J. Zs. Mezei, Z. Hlousek and C. -Y. Hu: *Accumulation of three-body resonances above two-body thresholds. Physical Review Letters* **94**, 3201 (2005).
- [A4] J. Zs. Mezei and Z. Papp: *Efimov resonancies in atomic three-body systems. Physical Review A* **73**, 701(R) (2006).
- [A5] J. Zs. Mezei, J. Darai and Z. Papp: *Faddeev-Noble versus Faddeev-Sasakawa-Sawada equations for the nuclear three-body Coulombic problem. Submitted for Few Body Systems.*
- [A6] Darai J., Mezei J. Zs. and Papp Z.: *Modified Faddeev-Noble equations for the three-body Coulombic problem. Nuclear theory.*

Proceedings of the 23rd International Workshop on Nuclear Theory. Rila Mountains, Bulgaria, 14-19 June, 2004. Ed.: Dimitrova, S. Sofia, Heron Press (Heron Press Science Series), 159 (2004).

- [A7] Papp Z., Darai J., Mezei J. Zs., Hlousek Z. and Hu C. -Y.:
Accumulation of resonances in three-body Coulombic systems.
Few-body problems in physics: The 19th European Conference on Few-Body Problems in Physics. Groningen, The Netherlands, 23-27 Aug., 2004. Proceedings. Eds: Kalantar-Nayestanaki, N. et al. Melville, AIP (AIP Conference Proceedings 768), 436 (2005).
- [A8] Lovas R. G., Mezei J. Zs. and Vertse T.: *Resonating clusters.*
International Symposium "A New Era of Nuclear Structure Physics". Kurokawa Village, Niigata, Japan, 19-22 Nov., 2003.
- [A9] Darai J., Mezei J. Zs. and Papp Z.: *Modified Faddeev-Noble equations for the three-body Coulombic problem.*
23rd International Workshop on Nuclear Theory. Rila Mountains, Bulgaria. 14-19 June, 2004.
- [A10] Papp Z., Darai J., Mezei J. Zs., Hlousek Z. and Hu C. -Y.:
Accumulation of resonances in three-body Coulombic systems.
19th European Conference on Few-Body Problems in Physics. Groningen, The Netherlands, 23-27 Aug., 2004.
- [A11] Papp Z., Hu C. -Y., Darai J. and Mezei J. Zs. : *Calculating three-body resonant states by solving Faddeev-Merkuriev equations for complex energies.*
35th Meeting of the Division of Atomic, Molecular and Optical Physics. Tucson, Arizona, 25-29 May, 2004.
- [A12] Mezei J. Zs., Varga K. and Lovas R. G.: *Stability of small exotic molecules.* Atomki Annual Report 1999, 4 (2000).

- [A13] Mezei J. Zs., Varga K. and Lovas R. G.: *Charged excitons and biexcitons in magnetic field*. Atomki Annual Report 2000, 4 (2001).
- [A14] Mezei J. Zs. and Lovas R. G.: *Unbound states in Coulomb few-body systems*. Atomki Annual Report 2000, 5 (2001).
- [A15] Mezei J. Zs., Lovas R. G. and Suzuki Y.: *Description of resonant states by analytic continuation*. Atomki Annual Report 2001, 12 (2002).
- [A16] Mezei J. Zs. and Lovas R. G.: *Construction of virtual states*. Atomki Annual Report 2003, 18 (2004).
- [A17] Mezei J. Zs. and Papp Z.: *Efimov resonances in atomic three-body systems*. Atomki Annual Report 2005, 39 (2006).
- [A18] Mezei J. Zs. and Nagy L.: *Theoretical study of the simultaneous ionization and excitation of helium by fast charged projectiles*. *NIMB* **154**, 295 (1999).
- [A19] Nagy L. and Mezei J. Zs.: *Ionization-excitation of helium into the np ($n=2-5$) states*. *Phys. Lett. A* **252**, 321 (1999).
- [A20] Mezei J. Zs. and Nagy L.: *Theoretical study of the simultaneous ionization and excitation of helium by fast charged projectiles*. 7th Workshop of Fast Ion-Atom Collisions. Debrecen, Hungary, 9-11 Sept., 1998.

Irodalomjegyzék

- [1] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1961).
- [2] L. D. Landau–E. M. Lifsic, *Elméleti Fizika III., Kvantum–Mechanika* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1978).
- [3] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (Springer-Verlag, New York, 1982).
- [4] J. R. Taylor, *Scattering Theory* (John Wiley & Sons, Inc., New York-London-Sydney-Toronto, 1972).
- [5] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific Publishing Co Pte Ltd., Singapore-New Jersey-Hong Kong, 1988).
- [6] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton Univ. Press, Princeton, 1957).
- [7] *Handbook of Atomic, Molecular and Optical Physics*, Edited by G. W. F. Drake (Springer-Verlag, 2006), Ch. 11, Page 199.
- [8] *Handbook of Atomic, Molecular and Optical Physics*, Edited by G. W. F. Drake (Springer-Verlag, 2006), Ch. 11, Page 205.
- [9] E. A. G. Armour, J.-M. Richard and K. Varga, *Phys. Rep.* **413**, 1 (2005).
- [10] Y. Suzuki and K. Varga, *Stochastic variational approach to quantum mechanical few-body problems* (Springer-Verlag, 1998).
- [11] K. Varga and Y. Suzuki, *Comput. Phys. Commun.* **106**, 157 (1997).
- [12] K. Varga, J. Usukura and Y. Suzuki, *Few-Body Systems* **24**, 81 (1998).
- [13] E. A. G. Armour and W. Byers Brown, *Accounts Chem. Res.* **26** 168 (1993).
- [14] A. Martin, J.-M. Richard and T. T. Wu, *Phys. Rev. A* **46** 3697 (1992).
- [15] J.-M. Richard, *Phys. Rev. A* **49** 3573 (1994).
- [16] J. A. Wheeler, *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **48**, 219 (1946).
- [17] A. P. Mills, *Phys. Rev. Lett* **46**, 717 (1981).
- [18] E. A. Hylleraas and A. Ore, *Phys. Rev.* **71**, 493 (1947).

- [19] D. M. Schrader, F. M. Jacobsen, N. P. Fradsen and U. Mikkelsen, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 57 (1992).
- [20] D. B. Kinghorn and R. D. Poshusta, *Phys. Rev. A* **47**, 3671 (1993);
Y. K. Ho, *Phys. Rev. A* **48**, 4789 (1993).
- [21] K. Varga, *Phys. Rev. Lett.* **83** 5471 (1999).
- [22] G. Ryzhikh and J. Mitroy, *Phys. Rev. Lett.* **79** 4124 (1998);
G. Ryzhikh and J. Mitroy *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32** 1375 (1998);
J. Mitroy and G. Ryzhikh, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32** L111 (1999).
- [23] J. Mitroy and G. Ryzhikh, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32** L621 (1999).
- [24] G. Ryzhikh, J. Mitroy and K. Varga, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** L265 (1998);
G. Ryzhikh, J. Mitroy and K. Varga, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** 3965 (1998).
- [25] D. Bressanini, M. Mella and G. Morosi, *J. Chem. Phys.* **108**, 4756 (1998).
- [26] N. Jiang and D. M. Schrader, *Phys. Rev. Lett.* **81** 5113 (1998).
- [27] K. Strasburger and H. Chojnacki, *J. Chem. Phys.* **108** 3218 (1998).
- [28] J. Mitroy and G. G. Ryzhikh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32** L411 (1998).
- [29] R. C. Miller, D. A. Kleinmann, A. C. Gossard and O. Muntenau, *Phys. Rev. B* **25**, 6545 (1982);
J. R. Haynes, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 860 (1966);
M. A. Lee, P. Vashishta and R. K. Kalia, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2422 (1983);
B. Stebe and A. Ainane, *Superlatt. Microstruct.* **5**, 545 (1989);
A. Thilagam, *Phys. Rev. B* **55**, 7804 (1997).
- [30] G. Finkelstein, H. Shtrikman and I. Bar-Joseph, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 976 (1995).
- [31] D. Birkedal, J. Singh, V. G. Lyssenko, J. Erland, and J. M. Hvam, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 672 (1996).
- [32] A. G. Steele, W. G. McMullen, and M. L. W Thewalt, *Phys. Rev. Lett.* **59** 2899, (1987).
- [33] M. Bayer et. al. *Phys. Rev. B* **58** 4740 (1998).
- [34] J. Usukura, Y. Suzuki and K. Varga, *Phys. Rev. B* **59**, 5652 (1999).
- [35] Zong-Chao Yan and Y. K. Ho, *Phys. Rev. A* **59** 2697 (1999).
- [36] D. B. Kinghorn and L. Adamowicz, *Phys. Rev. Lett.* **83** 2541 (1999).
- [37] D. Bressanini, M. Mella, and G. Morosi, *Phys. Rev. A* **55**, 200 (1997).
- [38] Neamtan S M, Darewych G, and Lebeda C F, 1962 *Phys.Rev.* **126**, 193
- [39] Drachman R J, 1995 in *The Physics of Electronic and Atomic Collisions*, edited by Dube L J, Mitchell J B A, McConkey J W, and Brion C E (American Institute of Physics, New York), Vol. XIX, p. 369

- [40] Ryzhikh G G and Mitroy J, *J. Phys. B* **32**, 4051 (1999)
- [41] Mitroy J, *J. Phys. B* **33**, 5307 (2000)
- [42] K. Varga, J. Usukura and Y. Suzuki, *Phys. Rev. Lett.* **80** 1876 (1998).
- [43] H. Bethe, *Z. Phys.* **57**, 815 (1929).
- [44] E. A. Hylleraas, *Z. Phys.* **60**, 624 (1930).
- [45] R. N. Hill, *J. Math. Phys.* **18**, 2316 (1977).
- [46] E. A. Hylleraas and A. Ore, *Phys. Rev.* **71**, 493 (1947).
- [47] D. Bressanini, M. Mella and G. Morosi, *Phys. Rev. A* **55**, 200 (1997);
Y. Suzuki, K. Varga and J. Usukura, *Nucl. Phys. A* **631**, 91c (1998).
- [48] A. M. Frolov and V. H. Smith, *Phys. Rev. A* **49**, 3580 (1994).
- [49] Y. K. Ho, *Phys. Rev. A* **48**, 4780 (1993).
- [50] T. Berggren, *Nucl. Phys. A* **109**, 265 (1968).
- [51] B. Gyarmati and T. Vertse, *Nucl. Phys. A* **160**, 523 (1971).
- [52] Y. B. Zel'dovich, *JETP (Sov. Phys.)* **39**, 776 (1960).
- [53] J. Aguilar and J. M. Combes, *Commun. Math. Phys* **22**, 269 (1971);
E. Balsev and J. M. Combes, *Commun. Math. Phys* **22**, 280 (1971).
- [54] B. Gyarmati and A. T. Kruppa, *Phys. Rev. C* **34**, 95 (1986);
Y. K. Ho, *Phys. Rep.* **99**, 1 (1983).
- [55] A. U. Hazi and H. S. Taylor, *Phys. Rev. A* **1**, 1109 (1970);
R. G. Lovas and M. A. Nagarajan, *J. Phys. A* **15**, 2383 (1982).
- [56] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky and J. Horáček, *Theory of Resonances. Principles and Applications* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London, 1989).
- [57] N. Tanaka, Y. Suzuki and K. Varga, *Phys. Rev. C* **56**, 562 (1997);
N. Tanaka, Y. Suzuki, K. Varga and R. G. Lovas, *Phys. Rev. C* **59**, 1391 (1999).
- [58] Y. Suzuki, R. G. Lovas, K. Yabana and K. Varga, *Structure and Reactions of Light Exotic Nuclei* (Taylor & Francis, London and New York, 2003).
- [59] L. Lorentzen and H. Waadeland, *Continued Fractions with Applications* (North-Holland, Amsterdam, 1992).
- [60] http://en.wikipedia.org/wiki/Triple-alpha_process
- [61] F. Hoyle, D. N. F. Dunbar, W. A. Wenzel and W. Whaling, *Phys. Rev.* **92**, 1095 (1953);
F. Hoyle, *Ap. J. Suppl.* **1**, 121 (1954).
- [62] Z. Papp, I. N. Filikhin and S. A. Yakovlev, *Few-Body Systems* **30**, 31 (2001).
- [63] R. Pichler, H. Oberhammer, A. Csótó and S. A. Moszkowski, *Nucl. Phys. A* **618**, 55 (1997).
- [64] C. Kurokawa and K. Katō, *Phys. Rev. C* **71**, 021301 (2005).

- [65] S. Ali and A. R. Bodmer, *Nucl. Phys.* **80**, 99 (1966).
- [66] T. Vertse, K. F. Pál and Z. Balogh, *Comput. Phys. Commun.* **27**, 309 (1982).
- [67] A. Csótó, *Néhánytest-dinamika atommagokban és magreakciókban* (Akadémiai doktori értekezés, ELTE, Budapest, 1999).
- [68] F. Ajzenberg–Selove, *Nucl. Phys. A* **490**, 1 (1988).
- [69] Xinhua Bai and Jimin Hu, *Phys. Rev. C* **56**, 1410 (1997).
- [70] P. Navrátil and B. R. Barrett, *Phys. Rev. C* **57**, 3119 (1998).
- [71] J. Noble, *Phys. Rev.* **161**, 945 (1967).
- [72] L. D. Faddeev and S. P. Merkuriev, *Quantum Scattering Theory for Several Particle Systems* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht The Netherlands, 1993).
- [73] Z. Papp, J. Darai, C.-Y. Hu, Z. T. Hlousek, B. Kónya and S. L. Yakovlev, *Phys. Rev. A* **65**, 032725 (2002);
Z. Papp, C.-Y. Hu, Z. T. Hlousek, B. Kónya and S. L. Yakovlev, *Phys. Rev. A* **63**, 062721 (2001);
Z. Papp, J. Darai, A. Nishimura, Z. T. Hlousek, C.-Y. Hu, and S. L. Yakovlev, *Phys. Lett. A* **304**, 36 (2002).
- [74] Z. Papp, *Phys. Rev. C* **55**, 1080 (1997).
- [75] L. Ya. Glozman, Z. Papp and W. Plessas, *Phys. Lett. B* **381**, 311 (1996);
Z. Papp, *Few-Body Systems* **26**, 99 (1999).
- [76] F. Demir, Z.T. Hlousek and Z. Papp, *Phys. Rev. A* **74**, 014701 (2006).
- [77] B. Kónya, *Continued fraction representation of quantum mechanical Green's operators* (Ph.D thesis, Univ. of Debrecen, Fac. of Sciences, Debrecen, 2000).
- [78] W. Sandhas, *Few-Body Nuclear Physics*, (IAEA Vienna), 3 (1978).
- [79] S. P. Merkuriev, *Ann. Phys. NY*, **130**, 395 (1980).
- [80] Y. K. Ho, *Hyperfine Interactions* **89**, 401 (1994);
H. Cox et al., *Mol. Phys.* **97**, 399 (1996);
S. H. Patil, *Phys. Rev. A* **58**, 728 (1998);
G. W. F. Drake et al., *Phys. Rev. A* **65**, 054501 (2002).
- [81] Y. K. Ho, *Phys. Lett. A* **102**, 348 (1984).
- [82] I. Ivanov and Y. K. Ho, *Phys. Rev. A* **60**, 1015 (1999)
- [83] J. Usukura and Y. Suzuki, Proc. Int. Workshop on Resonances in Few-Body Systems, Sárospatak, *Few-Body Systems Suppl.*, **13**, 56 (2001);
J. Usukura and Y. Suzuki, *Phys. Rev. A* **66**, 010502(R) (2002).
- [84] T. Li and R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **71**, 052505 (2005).
- [85] L. T. Choo, M. C. Crocker and J. Nuttal, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **11**, 1313 (1978).
- [86] V. Efimov, *Phys. Lett. B.* **33**, 563 (1970).

- [87] S. K. Adhikari and K. L. Kowalski, *Dynamical Collision Theory and Its Applications* (Academic Press, INC., San Diego, 1991).
- [88] T. Kraemer et al., *Nature* **440**, 315 (2006).
- [89] E. Nielsen, H. Suno and B. D. Esry, *Phys. Rev. A* **66**, 012705 (2002).
- [90] F. M. Pen'kov, *Phys. Rev. A* **60**, 3756 (1999).
- [91] *NAG Fortran Library*, Mark **19** (The NAG Ltd., 1999).
- [92] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1986).

Néhánytest-rendszerek kötött és nem kötött állapotai
Értekezés a doktori (Ph.D.) fokozat megszerzése érdekében
a Fizika tudományágban
Írta: Mezei János Zsolt okleveles fizikus.

Készült a Debreceni Egyetem TTK Fizika doktori iskolája
(Magfizika programja) keretében

Témavezetők: Dr. Lovas L. Rezső Dr.
 Dr. Papp Zoltán Dr.

A doktori szigorlati bizottság:

elnök:	Dr. Nagy Ágnes	Dr.
tagok:	Dr. Apagyi Barnabás	Dr.
	Dr. Angeli István	Dr.

A doktori szigorlat időpontja: 2006. január 26.

Az értekezés bírálói:

Dr.	Dr.
Dr.	Dr.
Dr.	Dr.

A bírálóbizottság:

elnök:	Dr.	Dr.
tagok:	Dr.	Dr.
	Dr.	Dr.
	Dr.	Dr.
	Dr.	Dr.

Az értekezés védésének időpontja: 200... ..

