

Egyetemi doktori (PhD) értekezés tézisei / Abstract of PhD Thesis

**Analitikus és numerikus számítási módszerek néhánytest-
rendszerek kvantummechanikai modelljében**

**Analytical and numerical methods for computing
of quantum mechanical few-body systems**

Hornyák István

Témavezető / Supervisor: Dr. Kruppa András Tibor



DEBRECENI EGYETEM / UNIVERSITY OF DEBRECEN
Informatikai Tudományok Doktori Iskola / PhD School in Informatics
Debrecen, 2015

Bevezetés

Doktori munkám során a kvantummechanikai kéttest-Coulomb-szórást vizsgáltam a felületi integrálos formalizmus és a komplex skálázás aspektusából. Bevezetőként röviden ismertetem ezen két módszer lényegét és doktori munkámmal való kapcsolatát.

A szóráselmélet **felületi integrálos formalizmusa** azért nagy jelentőségű, mert egyformán alkalmazható rövid hatótávolságú és Coulomb-potenciál esetén. Ez a formalizmus lehetővé tette töltött háromtest-rendszerek esetén a szórási amplitúdó poszt formájának megadását a teljes felbomlási küszöb felett. A felületi integrálos formalizmus alapvető fontosságú függvénye az $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma}$ Coulomb-módosított síkhullám (Coulomb-distorted plane wave, CDPW), ahol \mathbf{k} az impulzusvektor, \mathbf{r} a két részecske relatív távolsága és k , r az előbbi vektorok hossza, valamint γ a Sommerfeld-paraméter. A felső előjelek a poszt, az alsó előjelek a prior alakra vonatkoznak. A módszer a redukált kéttest-rendszer szórási függvényére a következő felbontását használja:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) + \psi_{\mathbf{k}}^{sc\pm}(\mathbf{r}) .$$

Ebben a formalizmusban $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r})$ -t az $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma}$ CDPW függvénnyel szokás helyettesíteni. A $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r})$ egy általunk előre megadott (ismert) függvény, a $\psi_{\mathbf{k}}^{sc\pm}(\mathbf{r})$ szórt rész pedig ismeretlen. Ezen felbontással a T -operátor mátrix-elemének poszt és prior alakját kifejezhetjük felületi integrálként, azaz

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = -\frac{1}{2m} \lim_{r_0 \rightarrow \infty} r_0^2 \int \left(\psi_{\mathbf{k}'}^+ \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}'}^*}{\partial r} - \phi_{\mathbf{k}'}^* \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}}^+}{\partial r} \right) d\hat{\mathbf{r}}$$

és

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = -\frac{1}{2m} \lim_{r_0 \rightarrow \infty} r_0^2 \int \left(\psi_{\mathbf{k}'}^{-*} \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}}}{\partial r} - \phi_{\mathbf{k}} \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}'}^{-*}}{\partial r} \right) d\hat{\mathbf{r}} .$$

A T -operátor mátrixelemének a teljes térre vett integrális poszt és prior alakjai a következők:

$$t^{\text{poszt}}(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle (H - E)\phi_{\mathbf{k}'}^- | \psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle$$

és

$$t^{\text{prior}}(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E)\phi_{\mathbf{k}}^+ \rangle .$$

Ezen két formula valamelyikének segítségével szokás a kísérletileg is mérhető szórási hatáskeresztmetszetet kiszámolni. Ez a tény adja a CDPW jelentőségét.

Munkám egyik célkitűzése volt a CDPW függvény tulajdonságainak tanulmányozása, valamint erre alapozva nagy pontosságú számítógépes program készítése a CDPW numerikus számításához.

Először meghatároztam a CDPW parciális hullámok szerinti sorfejtését, majd három ekvivalens alakot adtam meg a parciálishullám-komponensekre, felhasználva, hogy sikerült felírnom a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ hipergeometrikus függvény három ekvivalens alakját. Az ekvivalens alakok a hipergeometrikus függvény programozását jelentősen megkönnyítik. Ezek után megadtam a parciálishullám-komponensek aszimptotikus viselkedését, melyet a fenti hipergeometrikus függvényre vonatkozó aszimptotika meghatározása révén tudtam levezetni. Az aszimptotika háromtagú rekurzió alapuló formuláját sikerült egyszerűsíteni: zárt alakban megadtam a rekurzió megoldását. A parciális hullámokra vonatkozó aszimptotikából pedig leszarmaztattam a háromdimenziós CDPW vezető rendű aszimptotikus alakját. Ennek az aszimptotikus formulának igen jelentős szerepe van a felületi integrálos formalizmusban. Eredményem – melyet az [1] hivatkozású cikkben publikáltunk – pontosította az eddigi munkákban megadott aszimptotikát.

A numerikus számításokhoz szükséges a CDPW parciálishullám-komponenseinek megbízható kiszámítása. Ennek érdekében hibabecslést adtam a CDPW Taylor-sorfejtésének maradék tagjára. A Taylor-sorfejtés, valamint a három ekvivalens alak közül kettő segítségével gyors és nagy pontosságú FORTRAN-90 nyelvű programot készítettem a CDPW numerikus meghatározására. Ezen eredmények publikálása a dolgozat bekötésének időpontjában még nem történt meg.

A szórási számítások nehézségét az okozza, hogy a Schrödinger-egyenlet keresett megoldásának aszimptotikus alakja nem egyszerű. A Schrödinger-egyenlet transzformációja révén olyan inhomogén egyenletet kaphatunk, amelyben a keresett megoldás aszimptotikusan eltűnik. Ilyen típusú egyenlet numerikus megoldása sokkal egyszerűbb, mint az eredeti szórási aszimptotika biztosítása. A **komplex skálázás** alkalmazása ilyen egyszerűsítésre vezet rövid hatótávolságú potenciálok esetén.

Munkám második célkitűzése a Coulomb-szórás komplex skálázással való vizsgálata volt.

Rövid hatótávolságú potenciál esetén rezonanciaállapot a radiális Schrödinger-egyenlet olyan megoldása, amely aszimptotikusan a

$$\psi_k(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikr}$$

alakban írható. Ha a k impulzus $\kappa - i\gamma$ ($\kappa, \gamma > 0$) alakú, akkor a radiális Schrödinger-egyenlet megoldása nem négyzetesen integrálható, a hullámfüggvény nem eleme a Hilbert-térnek. Tételizzük fel, hogy a $\psi_k(r)$ rezonanciaállapotot leíró megoldás r függvényében analitikusan kiterjeszthető a komplex síkra. Vezessünk be egy új függvényt a

$$\psi_{k,\theta}(r) = e^{i\theta/2} \psi_k(re^{i\theta})$$

definícióval, ahol $r \in \mathbb{R}$ és $0 < \theta < \pi$. Ezt a transzformációt szokás komplex skálázásnak nevezni. Könnyű belátni, hogy a most bevezetett függvény megoldása a komplexskálázott radiális Schrödinger-egyenletnek, és ennek a sajátérték-egyenletnek lesznek olyan E komplex energiájú megoldásai, amelyek már négyzetesen integrálhatók, mivel a hullámfüggvény nagy r értékekre lecseng, ha $\gamma/\kappa > \text{tg}(\theta)$. A komplex skálázott rezonancia-hullámfüggvény tehát aszimptotikusan nullához tart.

A komplex skálázás természetesen bevezethető soktest-rendszerekre is. A komplex skálázás előnye, hogy segítségével minden olyan módszer, amely alkalmas kötött állapotok meghatározására, alkalmazható rezonanciaállapotokra is, ha ezeket a komplexskálázott Schrödinger-egyenlettel írjuk le. Például a komplexskálázott radiális Schrödinger-egyenlet rezonancia-sajátfüggvényeit

kifejthetjük négyzetesen integrálható bázison. Többtest-feladat esetén ez a leggyakrabban alkalmazott módszer rezonanciaenergiák meghatározására.

Az ötletet, hogy hogyan lehet a komplex skálázást a szóráselméletben alkalmazni, a szórási hullámfüggvény

$$\psi_k^+(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \hat{j}_l(kr) + k f_l(k) e^{i(kr - l\pi/2)}$$

aszimptotikus alakja adja, ahol $\hat{j}_l(kr)$ a Riccati–Bessel-függvény és $f_l(k)$ a parciálishullám-amplitúdó. Nagy r értékre a függvény két tagból áll: $\hat{j}_l(kr) + A \exp(ikr)$, a második tag $A \exp(ikr)$ komplex skálázás után $A \exp(-kr \sin(\theta) + ikr \cos(\theta))$ formában írható, tehát négyzetesen integrálhatóvá válik, ha $0 < \theta < \pi$ és $k > 0$ valós szám. Keressük tehát a szórási hullámfüggvényt

$$\psi_k^+(r) = \hat{j}_l(kr) + \psi_k^{sc+}(r)$$

alakban, ahol a szóródást leíró $\psi_k^{sc+}(r)$ rész ismeretlen függvény, de tudjuk róla, hogy komplex skálázás után négyzetesen integrálhatóvá válik. Ezt a felbontást alkalmazva inhomogén differenciálegyenletre jutunk, melyet komplex skálázás után meg tudunk oldani, ugyanis $\psi_{k,\theta}^{sc+}(r)$ négyzetesen integrálható, ezért közelíthető négyzetesen integrálható, aszimptotikusan nullához tartó függvények szerinti sorfejtéssel. A komplex skálázás igen nagy előnye az, hogy a fent – a szórási hullámfüggvény aszimptotikus alakjával – megadott határfeltételt nem kell explicit módon előírunk.

Észrevehetjük, hogy nagy különbség van a komplex skálázás alkalmazási módjában attól függően, hogy rezonanciaállapotot vagy szórási állapotot akarunk meghatározni. Az első esetben a teljes hullámfüggvényre, míg a második esetben csak a szórt hullámra kell a komplex skálázást alkalmazni.

Megmutattam, hogy a CDPW használatával nyert komplexskálázott szórt hullámtag aszimptotikusan nem tűnik el, mivel bejövő és kimenő gömbhullámot is tartalmaz. Ennek következtében pedig a CDPW mint a felbontás ismert része nem alkalmazható komplex skálázásra, mivel használata nem egyszerűsíti a szórási határfeltételt. Eredményem a [2] cikkben lett publikálva.

Amikor rövid hatótávolságú és Coulomb-potenciál egyszerre van jelen, akkor ismert, hogyan kell az előbbieken ismertetett komplex skálázási mód-

szert általánosítani a kétpotenciál-formalizmus segítségével. Tiszta Coulomb-kölcsönhatás esetére mi mutattuk meg [2] először, hogy a komplex skálázás hogyan alkalmazható a Coulomb-szórási problémára. Pontosabban, megmutattuk annak a módját, hogy hogyan lehet a standard komplex skálázással megoldani, egyszerűsíteni a Coulomb-kéttestszórási problémát. A módszer általános esetben is működik, azaz amikor Coulomb-kölcsönhatás mellett a potenciál rövid hatótávolságú tagot is tartalmaz.

Hivatkozások:

- [1] I. Hornyák, A.T. Kruppa, *Journal of Mathematical Physics* **54**, 053502 (2013).
- [2] I. Hornyák, A.T. Kruppa, *Physical Review A* **85**, 022702 (2012).

Eredmények

- T-1 (a) Meghatároztam a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ hipergeometrikus függvény három ekvivalens alakját l nemnegatív egész, $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ és $Re[a] > 0$ esetén, valamint aszimptotikáját. Sikertelenül zárt alakban megadnom azt a rekurziót, melyen az aszimptotika formulája alapul.
- (b) A T-1 (a) tézispont matematikai eredményeit felhasználva meghatároztam a CDPW parciálishullám-komponenseinek három ekvivalens alakját, valamint leírtam a parciálishullám-komponensek aszimptotikus viselkedését, melyből meghatároztam a háromdimenziós CDPW vezető rendű aszimptotikus alakját.
- T-2 Hibabecslést adtam a ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ hipergeometrikus függvény Taylor-sorfejtésének maradék tagjára a $|z| < 1$ komplex körlap felett. Ezen matematikai eredmény és a T-1 (a) tézispont matematikai eredményeinek felhasználásával hatékony FORTRAN-90 nyelvű algoritmust készítettem a fenti függvény és ezáltal a CDPW numerikus számításához.
- T-3 Bebizonyítottam, hogy a CDPW, mint a felbontás ismert része Coulomb-kéttetszórési probléma esetén nem alkalmazható standard komplex skálázásra, mivel használata nem egyszerűsíti a szórési határfeltételt.
- T-4 Megmutattuk, hogyan lehet a standard komplex skálázással megoldani, egyszerűsíteni a Coulomb-kéttetszórési problémát. A módszer lényege, hogy parciális hullámok szintjén dolgozunk, és a Coulomb-

szórási hullámfüggvény bejövő részének parciális komponensét alkalmazzuk a szórási hullámfüggvény ismert részeként. A módszer előnye, hogy tiszta Coulomb-kölcsönhatás esetén is és általános esetben is működik, azaz amikor Coulomb-kölcsönhatás mellett a potenciál rövid hatótávolságú tagot is tartalmaz.

Introduction

In my PhD thesis I investigated the quantum mechanical two-body problem using the surface integral formalism and the complex scaling method. First I review these two methods and their connections to my doctoral works.

The main virtue of the **surface integral formalism** of scattering theory is that it provides formulae for the scattering amplitude valid for both short-range potential and long-range Coulomb potential. This formalism has also made it possible to develop the post form of the break-up amplitude for three-body scattering of charged particles. The basic notion of the surface integral formalism is the so called Coulomb-distorted plane wave (CDPW)

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma}$$

where \mathbf{k} is the momentum vector, \mathbf{r} is the relative distance of the two particles, k and r are the length of the previous vectors and γ is the Sommerfeld parameter. The upper and lower signs in the previous function are related to the post and prior form of the CDPW, respectively. When the surface integral formalism is applied to the reduced two-body problem the total scattering wave function is taken in the form

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) + \psi_{\mathbf{k}}^{sc\pm}(\mathbf{r}) .$$

In this splitting the known part is the wave function $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r})$ and the unknown scattered part is denoted by $\psi_{\mathbf{k}}^{sc\pm}(\mathbf{r})$. If Coulomb interaction is present the $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r})$ known part is replaced by $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(kr \mp \mathbf{k}\mathbf{r})^{\pm i\gamma}$.

Using this splitting the post and prior form of the matrix element of the T -operator can be expressed using the surface integrals

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = -\frac{1}{2m} \lim_{r_0 \rightarrow \infty} r_0^2 \int \left(\psi_{\mathbf{k}}^+ \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}'}^*}{\partial r} - \phi_{\mathbf{k}'}^* \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}}^+}{\partial r} \right) d\hat{\mathbf{r}}$$

and

$$t(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = -\frac{1}{2m} \lim_{r_0 \rightarrow \infty} r_0^2 \int \left(\psi_{\mathbf{k}'}^{-*} \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}}}{\partial r} - \phi_{\mathbf{k}} \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}'}^{-*}}{\partial r} \right) d\hat{\mathbf{r}} .$$

The post and prior forms can be written down also as integrals over the full space

$$t^{\text{poszt}}(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle (H - E) \phi_{\mathbf{k}'}^- | \psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle$$

and

$$t^{\text{prior}}(\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}) = \langle \psi_{\mathbf{k}'}^- | (H - E) \phi_{\mathbf{k}}^+ \rangle .$$

The four expression given above can be used to determine the experimentally measurable scattering cross section.

One of the aims of my work was to investigate the mathematical properties of the CDPW and, based upon these results, to develop an efficient FORTRAN-90 computer code. First I formulated the partial wave components of the CDPW and gave three equivalent forms for these functions. These formulae rely on the three equivalent forms of the hypergeometric function ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$, which have been found by me. These are valid for non-negative integer l and $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ and $\text{Re}[a] > 0$. I determined the asymptotic form of the function ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ and I gave a closed analytic form of a three-term recursion relation for the asymptotic expansion. From these results I deduced the asymptotic form of the CDPW. From the asymptotic form of the partial wave components of the CDPW I derived the leading-order asymptotic expression of the three-dimensional problem. This form plays an important role in the derivation of the surface integral formalism. This result was published [1].

To facilitate the numerical calculation of the CDPW it is necessary to develop a reliable computer code. For this purpose, I gave an upper bound for the remainder of the Taylor expansion of the function ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$. Based on this result and using two of the three equivalent forms of ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ chosen so as to suit the arguments of the function, I have written a FORTRAN-90 and a Mathematica code for the numerical calculation. These results have not been published before the submission of my thesis.

The difficulty of the scattering calculation is due to the complicated form of the asymptotics of the scattering wave function. A special transformation of the Schrödinger equation, however, may lead to an asymptotic form that is extremely simple: the function goes to zero at large distances. The solution of the differential equation with such a boundary condition is much simpler than the solution of the original problem. For short-range potentials, the application of the **complex scaling method** leads to such a simplification.

The second purpose of my work was to investigate the two-body Coulomb problem with the help of the complex scaling.

For short-range potentials resonance states are defined as the solutions of the of the radial Schrödinger equation with the boundary condition

$$\psi_k(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} e^{ikr} .$$

If the momentum k is of the form $\kappa - i\gamma$ ($\kappa, \gamma > 0$) then the states with the previous boundary condition are not square integrable. These functions are not element of a Hilbert space. Let's assume that the resonant state $\psi_k(r)$ as a function of r can be extended analytically to complex r plane. If we introduce a new function with the definition

$$\psi_{k,\theta}(r) = e^{i\theta/2} \psi_k(re^{i\theta})$$

where $r \in \mathbb{R}$ and $0 < \theta < \pi$, then it is easy to see that this new function satisfies the complex scaled radial Schrödinger equation. The transformation given above is called standard complex scaling. The solution of the complex scaled Schrödinger equation at resonance energies becomes square integrable since the wave function is going to zero at infinity if $\gamma/\kappa > \tan(\theta)$.

The complex scaling can be generalized for arbitrary number of particles. The advantage of the complex scaling is that all methods developed for bound state calculation can be applied to resonance state if the complex scaled Schrödinger equation is used for the calculation. For example, we may expand the complex scaled resonance wave function on an arbitrary square integrable basis. For many-body problems this is the most widely used procedure to calculate resonance states.

The idea how to use the complex scaling for scattering calculations comes from the

$$\psi_k^+(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \hat{j}_l(kr) + k f_l(k) e^{i(kr - l\pi/2)}$$

asymptotic form of the physical scattering wave function, where $\hat{j}_l(kr)$ is the Riccati–Bessel function and $f_l(k)$ is the partial wave scattering amplitude. For large r the solution has two terms: $\hat{j}_l(kr) + A \exp(ikr)$. The second one after complex scaling turns into the form $A \exp(-kr \sin(\theta) + ikr \cos(\theta))$. This shape shows that the second term the so called scattered part becomes square integrable if $0 < \theta < \pi$ and $k > 0$. Let's search the scattering wave function in the form

$$\psi_k^+(r) = \hat{j}_l(kr) + \psi_k^{sc+}(r)$$

where the scattered part $\psi_k^{sc+}(r)$ is an unknown function, but it is known that after complex scaling it becomes square integrable. Using this splitting of the total wave function an inhomogeneous differential equation can be gained for the scattered part. The numerical solution of this inhomogeneous equation is much simpler than the original equation since the boundary condition at infinity is much simpler. The great virtue of the complex scaling is that the explicit imposition of the complicated scattering boundary condition can be avoided. The described method works for short-range potentials.

It can be realized that there is a significant difference between how the complex scaling is applied for resonance states and for scattering states. In the first case the full wave function is complex scaled whereas in the second case only the scattered part. If a short-range potential is added to the Coulomb interaction then the complex scaling can applied if the two-potential formalism is applied.

For pure two-body Coulomb problem we showed [2] that the standard complex scaling can successfully be applied if the wave function splitting is carried out on partial wave level and the known part of the splitting is carefully chosen. In this way the boundary condition for the scattered part is greatly simplified. The method works for general case too i.e. when a short-range potential is present in addition to the Coulomb interaction. The new method does not apply the two-potential formalism.

In my work [2] I have shown that the splitting based on the CDPW does not lead to simplification of the boundary condition if the standard complex scaling is used. In this case the scattered part of the wave function contains both incoming and outgoing waves.

References

- [1] I. Hornyák, A.T. Kruppa, *Journal of Mathematical Physics* **54**, 053502 (2013).
- [2] I. Hornyák, A.T. Kruppa, *Physical Review A* **85**, 022702 (2012).

Results

- T-1 (a) I determined three equivalent forms of the hypergeometric function ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$. These are valid for non-negative integer l and $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, $a \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{Z}$ and $\text{Re}[a] > 0$. I specified the full asymptotic expansion of the function ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ and I gave a closed analytic form of a three-term recursion relation for the asymptotic expansion.
- (b) Using the mathematical results of T-1 (a) I lay down three equivalent forms for the partial wave components of the CDPW. Furthermore I derived the asymptotic expansion of the partial wave components and give the leading order asymptotic form of the three-dimensional CDPW.
- T-2 I gave an upper bound for the remainder of the Taylor expansion of the function ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ valid for the unit circle of the complex z plane. Based on this result and using two of the three equivalent forms of ${}_2F_2(a, a; a + l + 1, a - l; z)$ chosen so as to suit the arguments of the function, I have written a FORTRAN-90 and a Mathematica code for the numerical calculation.
- T-3 I have shown that the splitting of the wave function based on the CDPW does not simplify the boundary condition if the standard complex scaling is applied. This is so since in this case the scattered part of the wave function contains both incoming and outgoing waves.
- T-4 We showed how to use the standard complex scaling for the pure two-body Coulomb problem in order to simplify the boundary condition.

The standard complex scaling can successfully be applied if the wave function splitting is carried out on partial wave level and the known part of the splitting is carefully chosen. The new method is also valid for the general case in which a short-range potential is added to the Coulomb interaction. The new procedure does not rely on the so-called two-potential formalism.



Iktatószám: DEENK/3/2015. PL
Tételszám:
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Hornyák István
Neptun kód: LKXT7L
Doktori Iskola: Informatikai Tudományok Doktori Iskola
Mtmt azonosító: 10032752

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemény(ek) külföldi folyóiratban (2)

1. **Hornyák, I.**, Kruppa, A.T.: Coulomb-distorted plane wave: Partial wave expansion and asymptotic.
J. Math. Phys. 54 (5), 053502-1 053502-7, 2013. ISSN: 0022-2488.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4803027>
IF:1.176
2. **Hornyák, I.**, Kruppa, A.T.: Two-body Coulomb scattering and complex scaling.
Phys. Rev. A. 85 (2012), 022702-(1-8), 1-8. ISSN: 1050-2947.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.85.022702>
IF:3.042

Idegen nyelvű konferencia közlemény(ek) (1)

3. **Hornyák, I.**: Two-body Coulomb scattering and complex scaling.
J. Phys.: Conf. Ser. 436, 012032-3, 2013. ISSN: 1742-6588.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/436/1/012032>





További Közlemények

Idegen nyelvű közlemény(ek) külföldi folyóiratban (2)

4. **Hornyák, I.**, Nagy, Á.: Inequalities for Phase-Space Renyi entropies.
Int. J Quant. Chem. 112 (5), 1285-1290, 2012. ISSN: 0020-7608.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/qua.23126>
IF:1.306

5. **Hornyák, I.**, Nagy, Á.: Phase-space Fisher information.
Chem. Phys. Lett. 437, 132-137, 2007. ISSN: 0009-2614.
IF:2.207

Idegen nyelvű konferencia közlemény(ek) (2)

6. Halász, V., Hegedüs, L., **Hornyák, I.**, Nagy, B.: Solving application oriented graph theoretical problems with DNA computing.
In: Proceedings of Seventh International Conference on Bio-Inspired Computing: Theories and Applications (BIC-TA 2012) vol 1. Ed.: Jagdish Chand Bansal, Pramod Kumar Singh, Kusum Deep, Millie Pant, Atulya K. Nagar, Springer, India, 75-85, 2013. ISBN: 9788132210375(Print)

7. Halász, V., Hegedüs, L., **Hornyák, I.**, Nagy, B.: Solving application oriented graph theoretical problems with DNA computing.
In: How the world computes : Turing Centenary Conference And 8th Conference On Computability In Europe, CIE 2012, Cambridge, UK, June 18-23, 2012 : abstracts of informal presentations. Computer Laboratory, University of Cambridge, Cambridge, 105, 2012.

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 7,731

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapjául szolgáló közleményekre): 4,218

A DEENK a Jelölt által az iDEa Tudóstérbe feltöltött adatok bibliográfiai és tudományometriai ellenőrzését a tudományos adatbázisok és a Journal Citation Reports Impact Factor lista alapján elvégezte.

Debrecen, 2015.01.12.





Register number: DEENK/3/2015. PL
Item number:
Subject: Ph.D. List of Publications

Candidate: István Hornyák
Neptun ID: LKXT7L
Doctoral School: Doctoral School of Informatics
Mtmt ID: 10032752

List of publications related to the dissertation

Foreign language scientific article(s) in international journal(s) (2)

1. **Hornyák, I.**, Kruppa, A.T.: Coulomb-distorted plane wave: Partial wave expansion and asymptotic.
J. Math. Phys. 54 (5), 053502-1 053502-7, 2013. ISSN: 0022-2488.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4803027>
IF:1.176
2. **Hornyák, I.**, Kruppa, A.T.: Two-body Coulomb scattering and complex scaling.
Phys. Rev. A. 85 (2012), 022702-(1-8), 1-8. ISSN: 1050-2947.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.85.022702>
IF:3.042

Foreign language conference proceeding(s) (1)

3. **Hornyák, I.**: Two-body Coulomb scattering and complex scaling.
J. Phys.: Conf. Ser. 436, 012032-3, 2013. ISSN: 1742-6588.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/436/1/012032>





List of other publications

Foreign language scientific article(s) in international journal(s) (2)

4. **Hornyák, I.**, Nagy, Á.: Inequalities for Phase-Space Renyi entropies.
Int. J Quant. Chem. 112 (5), 1285-1290, 2012. ISSN: 0020-7608.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/qua.23126>
IF:1.306
5. **Hornyák, I.**, Nagy, Á.: Phase-space Fisher information.
Chem. Phys. Lett. 437, 132-137, 2007. ISSN: 0009-2614.
IF:2.207

Foreign language conference proceeding(s) (2)

6. Halász, V., Hegedüs, L., **Hornyák, I.**, Nagy, B.: Solving application oriented graph theoretical problems with DNA computing.
In: Proceedings of Seventh International Conference on Bio-Inspired Computing: Theories and Applications (BIC-TA 2012) vol 1. Ed.: Jagdish Chand Bansal, Pramod Kumar Singh, Kusum Deep, Millie Pant, Atulya K. Nagar, Springer, India, 75-85, 2013. ISBN: 9788132210375(Print)
7. Halász, V., Hegedüs, L., **Hornyák, I.**, Nagy, B.: Solving application oriented graph theoretical problems with DNA computing.
In: How the world computes : Turing Centenary Conference And 8th Conference On Computability In Europe, CIE 2012, Cambridge, UK, June 18-23, 2012 : abstracts of informal presentations. Computer Laboratory, University of Cambridge, Cambridge, 105, 2012.

Total IF of journals (all publications): 7,731

Total IF of journals (publications related to the dissertation): 4,218

The Candidate's publication data submitted to the iDEa Tudóster have been validated by DEENK on the basis of Web of Science, Scopus and Journal Citation Report (Impact Factor) databases.

12 January, 2015

