

Témavezető: Dr. Nagy István

A Kutatási Támogatási Szerződés 2. sz. mellékletében megadott kutatási program megvalósítása során – az abban kitűzött célokat elérve – összesen 21 publikáció született. Ezeket a jelen zárójelentés ún. közleményjegyzéke tartalmazza. Az alábbi pontokban (1–10) a részletes összefoglalást adom meg, az említett publikációkban közölt eredmények célszerű csoportosításával. A vonatkozó publikációkat az adott pontok végén felsorolom.

1. Összehasonlító számításokat végeztünk, kvantum és klasszikus (impakt paraméteres) szóráselméletek felhasználásával, nehéz ionok elektrongázban való fékeződésére. Az energiaveszteségi folyamat statisztikus jellegének megfelelően az ún. transport és straggling hatáskeresztmetszeteket elemeztük. Ezek a hatáskeresztmetszetek a differenciális keresztmetszetből a $(1 - \cos \theta)$ és $(1 - \cos \theta)^2$ súlyozásokkal adódnak. A részletes számítások alapján meghatároztuk azt a paraméter tartományt [töltés nagysága (Z), árnyékolási hossz (R) és szórási energia (E)], amelyben a klasszikus közelítés *kvantitatív* módon használható. Az ún. Mensing típusú árnyékolt potenciál esetén, $V(r) = -(Z/r)[1 - (r/R)]\Theta(R - r)$, a $[(Z/R)/E] < 1$ feltételt kaptuk. A keresztmetszetekre vonatkozó *analitikus* eredmények, a megszorítás mellett, fontosak lehetnek további szimulációs módszerek alkalmazásában. A származtatott straggling keresztmetszet véges az $R \rightarrow \infty$ esetben is, amikor visszakapjuk a korábban még Niels Bohr által meghatározott alakot.

Publikációk: Phys. Rev. A **71**, 062902 (2005), Phys. Rev. A **78**, 012902 (2008).

2. Jól ismert tény, hogy az ionok egységnyi útra eső energiavesztesége a sebességük *lineáris* függvénye kellően kis ($v \rightarrow 0$) sebességeknél. Továbbá, az említett limeszben, ez a fékező erő az ion rendszámában (Z_1) egy oszcilláló függvény. Megvizsgáltuk a relatív kinematika szerepét a kapcsolódó transzport keresztmetszetben *adott* elektron–árnyékolt-ion kölcsönhatási potenciálok esetében, amelyeket a DFT ún. Kohn-Sham eljárásával határoztunk meg. Ilyen módon azt találtuk, hogy a Z_1 -oszcillációban jelentős változások adódnak az ion-sebesség növelésével, már az elektrongáz Fermi sebessége alatt is.

Publikációk: Phys. Rev. B **74**, 073302 (2006), NIM B **256**, 182 (2007).

3. A DFT Kohn-Sham módszerét használva megvizsgáltuk, kis ion-sebességeknél, az elektrongázra számított Z_1 -oszcillációk spin-polarizációtól való függését is. Azt találtuk, hogy adott elektrongáz sűrűség esetén az oszcillációk *amplitúdója* változik elsősorban a polarizációtól függően. Ezt a fázistolások energia szerinti deriváltjának (a Fermi energiánál) érzékenysége okozza. Paramágneses elektrongáz esetében nincs ilyen jellegű járulék.

Publikáció: Nucl. Instrum. Methods (NIM) B **258**, 79 (2007)

4. Az irodalom *első* elméleti számítását végeztük el *időfüggő* DFT módszert használva nemrelativisztikus proton és antiproton energiaveszteségére fém-klaszter target esetén. A teljes, dinamikus árnyékolás nagyon rövid idő alatt felépül. Lényegében az ún. attosecond skálán. A töltés előjeltől ($Z = \pm 1$) való függés jelentős marad $v = 3 - 4$ ion-sebességeig, atomi egységekben. Ez az elméleti eredmény nagyon jó egyezésben van CERN-i mérésekkel fém targetekre. A kísérleti proton energiaveszteség nagyobb mint antiproton esetében és az adatok csak az aszimptotikus ($v \gg 1$) tartományban simulnak egybe. Vagyis a perturbatív limeszben, ahol már az elsőrendű Born közelítés is megfelelő lesz. További fejlesztést igényel, vonzó bombázó ionok esetén, az elektron befogás-leadás (capture-loss) folyamata és annak a mérhető energiaveszteségben megmutatkozó kvantitatív hatása.

Publikáció: Phys. Rev. A **75**, 042902 (2007).

5. Az elektronsűrűség-eloszlás analitikus tulajdonságai a kölcsönható sokrészesecske rendszerek jellemzésében nagyon fontosak. Egy elektrongázba helyezett vonzó töltés esetére megmutattuk, egy matematikai tétel felállításával, hogy a teljes elektronsűrűség második deriváltja (curvature) analitikus függvény akkor is, ha egy új kötött állapot jelenik meg a folytonos (szórt) állapotok mellett. Ezt az eredményt felhasználva megadtuk az ún. egyrészesecske sűrűség-mátrix diagonálisára vonatkozó harmadrendű differenciál egyenlet (March és Murray) explicit megoldását is egy egyszerű effektív kölcsönhatás esetében.

Publikációk: Phys. Rev. B **72**, 125113 (2005), New Journal of Physics **8**, 299 (2006), Phys. Letters A *in press* [DOI: 10.1016/j.physleta.2009.06.051].

6. Módszertani vizsgálatokat végeztünk számos, fizikailag motivált problémakörben. Részletesen elemeztük a két-dimenziós (2D) potenciálszórást. Fontos alkalmazásként a két-centrum szórást jelölöm meg ebben a vonatkozásban. Két-centrum problémák megoldása a modern felületvizsgálati (STM) módszerek adatainak helyes értelmezésénél nagyon aktuális. Kvantifikáltuk a mátrix-elemben az amplitúdók összegzése miatt létrejövő interferencia jelenséget. Rámutattunk a *molekula-orientációtól* való függésre integrált keresztmetszetek (2D-ben ez hossz dimenziójú) praktikus előforduló eseteiben. A taszító (árnyékolt) kölcsönhatás modellezésével elemeztük a homogén (2D) elektrongáz gerjesztett elektronjának ún. élettartamát. Analitikus eredményeket származtattunk erre a megfigyelhető mennyiségre, amelyek lézeres kísérleti adatok megértésében fontosak lehetnek.

Publikációk: J. Math. Phys. **46**, 072104 (2005), Phys. Chem. Liquids **44**, 571 (2006), Phys. Chem. Liquids **46**, 481 (2008).

7. Egy lassan mozgó (migrating) töltés körül, vagy egy sztatikus töltés körül transzport folyamatban, az elektronsűrűség- és áram-eloszlás *kvantum mechanikai* meghatározása nehéz elméleti feladat még egyensúlyi esetekben is. Az ion-fékezés témakörében szerzett tapasztalataink felhasználásával – a kontinuitási egyenlet adta megszorítás mellett – elemeztük ezt a jelenségkört. Azt találtuk, hogy a migrációs folyamatban az ún. direct-charge a szórócentrum töltésállapotától jelentősen függ. Hasonló fizikai eredmény adódott a lassú ion körül kialakuló ún. dipolar backflow amplitúdójára is.

Publikációk: Phys. Rev. B **76**, 073301 (2007), Journal of Physics: Condensed Matter **20**, 285218 (2008).

8. Az OTKA támogatásával elért egyik kiemelkedő eredménynek tartom egy fizikailag motivált ún. two-level system (egy fémbe helyezett elmozduló hidrogén atom) és a vezetési elektronok csatolásának kvantitatív meghatározását. Azt találtuk, ellentétben a szokásosan feltételezett perturbatív becsléssel, hogy a csatolás a szórási fázistolások korlátos függvénye lesz. Ez a tény azt eredményezi, hogy *nem kapható* ily módon egy ún. two-channel Kondo effektus, melynek a Fermi folyadékánál megszokottól eltérő skálázása van.

Publikáció: Journal of Physics: Condensed Matter **21**, 175701 (2009).

9. Az elektronok korrelált mozgása a fermionos soktest-probléma fundamentális összetevője. A kölcsönhatás miatti – a relatív mozgásban jelentkező – hatás kvantitatív leírása a kvantummechanika centrális kérdése, amely a szokásos (pl. Hartree-Fock) átlagter elméletektől eltérő módszereket igényel. Az ún. nemszeparálható korreláció analízise egy nagyon aktív kutatási terület, amely interdiszciplináris jelentőséggel bír. Ezen a fontos területen meghatároztuk – egy két-elektronos model atom esetére – az elektronok térszerű összefonódottságának (spatial entanglement) jellemzéséhez szükséges ún. q -rendű egyrészecskés sűrűség mátrixot. A sűrűség mátrix segítségével különböző entrópiákat származtattunk. Az entrópia maximum elvének felhasználásával korlátot adtunk meg a q -ra, amely $q \in [0.5, 1]$ -nek adódott. Ráműtattunk az információvesztés matematikai gyökerére a trace-képzésnél. Egzaktul meghatároztuk a modell atom singlet állapotához tartozó teljes energia összetevő tagjait. Ez az eredmény nagyon fontos lehet további munkákhoz, amelyek a sűrűség-mátrix-funkcionál elmélet *praktikus* használatához kapcsolódnak.

Publikáció: Phys. Rev. A **79**, 052501 (2009).

10. A pályázat másik kiemelkedő eredményének az elektron-párkorreláció területén végzett *szisztematikus* kutatások révén nyert következtetéseket tartom. A fő motivációt az új szupravezető anyagok (cuprates, pnictides) kísérleti vizsgálatainál talált ún. pseudo-gap fázis és az azzal asszociált ún. precursor-pairing adta. Egyetértés van a kapcsolódó (nagyon kiterjedt) irodalomban, hogy az előbbieket megértése egy *kulcs összetevő* a szupravezetési mechanizmus teljes elméleti megértéséhez. Vizsgálataink során meghatároztuk (két dimenziós elektrongáz esetében) egy fizikailag megszorított és szimmetrikus eljárással származtatott *effektív* elektron-elektron kölcsönhatás (input interaction) felhasználásával, a kötött állapot energiákat az elektrongáz sűrűségének függvényében. *Dome-like* viselkedést kaptunk, ami a részletes kísérleti (μSR) adatoknak megfelel. Az ún. Cooper-csatorna kétrészecskés Bethe-Salpeter egyenletének gömbharmonikusokkal kifejezett megoldásából a kb. $T = 200 K$ maximális hőmérsékletet kaptuk, amelynél az ún. precursor-pairing jelensége fellép. Ez jól egyezik a kísérleti (STM és STS) tényekkel. Ezen a területen további, nemzetközi kooperációban végzett kutatást tervezek.

Publikációk: Phys. Rev. B **72**, 075117 (2005), Phys. Rev. B **74**, 115411 (2006), Phys. Rev. B **75**, 233105 (2007), New Journal of Physics **11**, 063012 (2009).