

T049646 OTKA ZÁRÓJELENTÉS

Fizikai rendszerek összetett szimmetriái

2005. április 1. - 2008. december 31., meghosszabbítva 2009. december 31-ig

A kutatás célja

A projekt célja az volt, hogy a korábban lezárult általam vezetett OTKA témák (F4303, [1992-95], F20689 [1996-99], T3194 [2000-04]) eredményeit továbbfejlesszem, illetve lehetséges alkalmazási területeket keressek számukra. Az említett témák keretében elsősorban egyszerű kvantummechanikai rendszerek (egydimenziós potenciálfeladatok) viszonylag egyszerű szimmetriáit (szuperszimmetria, Lie-szimmetriák, \mathcal{PT} szimmetria) vizsgáltam a feladatok egzakt megoldásainak levezetése által. A jelen projekt keretében az eddigi feladatoknál módszertanilag összetettebb problémákra koncentráltam (pl. többdimenziós potenciálfeladatok, helyfüggő effektív tömeg, illetve lehetőség szerint e feladatok szimmetriáinak vizsgálata). Emellett figyelemmel követtem a \mathcal{PT} -szimmetrikus kvantummechanika területén születő egyre kifinomultabb eredményeket is, mivel ez a téma a korábbiakhoz hasonló fejlődést produkált az elmúlt években is. Ettől független célként tűztem ki azt, hogy módszertani eredményeimet valamely területen konkrét fizikai rendszerek leírására alkalmazzam. Erre leginkább megfelelőnek az atommagfizika kínálkozott, mivel a kvantummechanika mellett e terület is ismerős számomra.

Az alábbiakban a munkatervben foglaltakhoz hasonlóan a módszertani kérdésekkel, illetve az eredmények atommagfizikai alkalmazásával kapcsolatos területeket (M.n), illetve (A.n) szimbólumokkal jelölöm.

A munkatervben foglaltak megvalósítása

Kutatómunkámat a munkatervben foglaltaknak megfelelően végeztem, bár a munkatervben megfogalmazott altémák relatív súlya valamelyest változott, elsősorban a szakterület belső fejlődése miatt. A munkaterv megírása után egyes területeken jelentősebb aktivitás mutatkozott (M.1, M.4, A.1), míg mások a vártnál kevesebb figyelmet kaptak (M.2, M.3, A.2). Ésszerűnek tűnt ennek figyelembe vétele a kutatómunkám során is, ezért főleg az aktív területekre koncentráltam. A munkatervben szereplő altémák közül az egyedül a részleges dinamikai szimmetriákkal (M.2) kapcsolatban nem végeztem vizsgálatokat. E területen a téma futamideje alatt a szakirodalomban nem történt különösebb előrelépés.

Eredmények

Az alábbiakban az eredményeket témakénti bontásban, nem pedig időrendben csoportosítva ismertetem. Az egyes eredményeknél feltüntettem a publikációs listában foglalt közleményeket az ott szereplő sorszámokat alkalmazva, de emellett szerepeltetem a már beküldött, még bírálati fázisban levő publikációkat is (római számokkal jelölve és az egyes altémák után feltüntetve). Az ilyen, még nem publikált eredményeket leíró alpontokat a többinél nagyobb részletességgel tárgyalom. Ez az oka annak, hogy az összefoglaló terjedelme meghaladja a javasolt limitet.

1. Egzaktul megoldható kvantummechanikai potenciálfeladatok

1.1 A pszeudo-norma egzakt meghatározása egyes \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálokra (M.1)

A \mathcal{PT} -szimmetrikus kvantummechanikai rendszerek (legegyszerűbb esetben egydimenziós nemrelativisztikus potenciálfeladatok) azzal a különleges tulajdonsággal rendelkeznek, hogy bár nem hermitikusak (pl. a Hamilton-operátoruk komplex potenciálfüggvényt tartalmaz), a diszkrét energiaspektrumuk részben vagy egészében valós energiasajátértékekből áll. Ezt eleinte azzal hozták összefüggésbe, hogy az ilyen rendszerek invariánsak az egyszerre történő tér- (\mathcal{P}) és időtükrözésre (\mathcal{T}), de kiderült, hogy a \mathcal{PT} szimmetria sem szükséges, sem pedig elégséges feltételét nem képezi a valós energiaspektrum felléptének. Kiderült az is, hogy a \mathcal{PT} szimmetria nem egyéb, mint a pszeudohermiticitás egy speciális esete és ezzel a valós energia-sajátértékek megjelenését visszavezették a pszeudo-hermiticitásra. Ugyanígy nyert magyarázatot az a tény is, hogy a \mathcal{PT} -szimmetrikus rendszerek bázisállapotai ortogonális rendszert alkotnak, amennyiben a belső szorzatot alkalmas módon átdefiniálják. Viszont az így előálló pszeudo-norma előjele határozatlannak bizonyult, ami felvetette a \mathcal{PT} -szimmetrikus, és általában, a pszeudohermitikus rendszerek valószínűségi értelmezésének kérdését. Több próbálkozás történt a pszeudo-hermitikus rendszerek hermitikus ekvivalens rendszetekbe történő transzformálására és így a valószínűségi értelmezés problémájának tisztázására. Ez szükségessé tette a pszeudo-norma konkrét meghatározását egyes rendszerekre.

Munkámmal e a törekvésekhez járultam hozzá azzal, hogy több konkrét potenciál esetében tetszőleges állapotra vonatkozóan zárt, egzakt alakban megadtam a pszeudo-norma kifejezését. Néhány egyszerű esetből arra következtettek, hogy a pszeudo-norma előjele az n főkvantumszám függvényében $(-1)^n$ szerint változik és ezt a sejtést a komplex differenciálegyenletek elmélete segítségével be is bizonyították az x -től polinom alakban függő potenciálok esetére. Ugyanakkor volt ellenpélda is. Ilyen volt a \mathcal{PT} -szimmetrikus Scarf II potenciál, $V(x) = -A \cosh^{-2}(x) + iB \sinh(x) \cosh^{-2}(x)$, amely esetében a pszeudo-norma a fentitől eltérő viselkedést mutatott. Ezt szerzőtársaimmal én mutattam ki [G. Lévai, F. Cannata, A. Ventura: Phys. Lett. A **300** (2002) 271] az általam vezetett T31945 számú OTKA keretében.

A fenti eredmények után érdemesnek tűnt a pszeudo-norma előjelének megvizsgálása további egzaktul megoldható potenciálokra is. Elsőként a Scarf I potenciált vettem sorra, amely függvényalakja $V(x) = A \cos^{-2}(x) + iB \sin(x) \cos^{-2}(x)$, $x = [-\pi/2, \pi/2]$. és amely az A és B paramétereiktől függően választható valósnak és \mathcal{PT} -szimmetrikusnak is. Az e potenciálra általam levezetett formula azt mutatta, hogy a pszeudo-norma itt is $(-1)^n$ szerint változik, vagyis összhangban van a szintén végtelen számú diszkrét nívóval rendelkező és nem korlátos potenciálokra vonatkozó korábbi eredményekkel és eltér a hasonló függvényalakokkal, ám véges számú diszkrét nívóval rendelkező Scarf II potenciálnál leírt helyzettől [2]. Itt említendő meg, hogy eredményeimet felhasználva más szerzők [R. Roychoudhury, P. Roy, J. Phys. A **40** (2007) F617] egzakt zárt formában megkonstruálták a \mathcal{PT} -szimmetrikus Scarf I potenciálhoz rendelhető \mathcal{C} töltésoperátort, amely szükséges a \mathcal{PT} -szimmetrikus kvantummechanikai problémák hermitikus megfelelőinek előállításához. Mivel a \mathcal{C} operátort más potenciálok esetében többnyire csak nagy nehézségekkel, közeleltető módszereket alkalmazva sikerült levezetni, ez az eredmény nagy visszhangot váltott ki.

A továbbiakban célszerűnek látszott összehasonlító elemzést végezni a valós és \mathcal{PT} -szimmetrikus Scarf I és II potenciálokról. E potenciálok matematikai szerkezete igen hasonló, ugyanakkor fizikai jellemzőik (potenciáلالak, spektrumszerkezet) jelentősen eltérnek. Az fentebb említett Scarf I potenciál a végpontokban szingularitással rendelkezik,

amely a paraméterek függvényében lehet vonzó, illetve taszító is. Kimutattam, hogy míg a \mathcal{PT} -szimmetrikus Scarf II potenciálnak azonos n főkvantumszám mellett lehet két normálható megoldása is, a határfeltételek a Scarf potenciál I esetén csak egy ilyet engednek meg, kivéve egy szűk tartományt, ami „gyengén vonzó” szingularitásnak felel meg. Itt viszont a két megoldás nem ortogonális egymásra a \mathcal{PT} szimmetria keretében értelmezett belső szorzatra nézve, vagyis az egyik elvetendő, hasonlóan a „gyengén szinguláris” valós potenciálok esetén követett eljáráshoz, amikor is a feladat önadjungált kiterjesztése válik szükségessé. Egy másik eltérés az, hogy a \mathcal{PT} -szimmetria spontán sérülése a Scarf I potenciál esetén nem értelmezhető [1].

Következő példaként a $V(x) = A \cos^{-2}(x) + B \tan(x)$, $x \in [-\pi/2, \pi/2]$ Rosen-Morse I potenciált vizsgáltam. Kimutattam, hogy e potenciál esetében a két független megoldás közül mindig csak az egyik lesz normálható. Szintén megmutattam, hogy a \mathcal{PT} -szimmetria spontán sérülése nem értelmezhető erre a potenciálra. Fő eredményként meghatároztam a hullámfüggvények normálási együtthatóját és kimutattam, hogy a pszeudo-norma előjele a főkvantumszám függvényében $(-1)^n$ szerint változik, hasonlóan más felülről nem korlátos spektrummal rendelkező potenciálokhoz (pl. a Scarf I). Mellékeredményként szintén megadtam zárt alakban a valós Rosen-Morse I potenciál hullámfüggvényeinek normálási együtthatóját, amelyeket tudomásom szerint eddig még nem határoztak meg [8].

Logikailag a következő lépés a $V(x) = A \cosh^{-2}(x) + B \tanh(x)$ Rosen-Morse II potenciál vizsgálata volt, ami a Rosen-Morse I potenciál hiperbolikus megfelelője és a teljes valós x koordinátán értelmezve van. Valós esetben (A, B valósak) egy olyan potenciálról van szó, amely aszimptotikusan más-más konstanshoz tart nagy negatív és pozitív x értékek mellett, míg a \mathcal{PT} -szimmetrikus változatának (amikor A valós, B képzetes) valós komponense egy aszimptotikusan eltűnő szimmetrikus Pöschl-Teller potenciál, ám képzetes komponense nem tűnik el aszimptotikusan, hanem ehelyett ellentétes előjelű képzetes konstansokhoz tart a két irányban. Ez utóbbi jellemvonása különleges az egzaktul megoldható \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálok között és ez vizsgálataink szerint több szokatlan eredményben is megnyilvánul. Ilyen például az, hogy minden potenciálparaméter mellett létezik a potenciálnak legalább egy kötött állapota, de az is, hogy a paraméterek bizonyos kombinációja esetén a véges számú valós kötöttállapot energiájai egy része, de akár az egésze pozitív lehet. Ez akkor valósul meg, amikor a képzetes potenciálkomponens dominánssá válik, ami a legtöbb \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciál esetében a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérülését és komplex energia-sajátértékek megjelenését idézi elő. Ezek a változások a jelen esetben nem következnek be. Szintén meghatároztuk a szórási reflexiós és transzmissziós együtthatókat és azt találtuk, hogy szemben az ismert példákkal nem csak a reflexiós, hanem a transzmissziós együtthatók is irányfüggők, vagyis függenek a beérkező hullám irányától [11]. (Erre nézve lásd még az 1.2 pontot is.)

1.2 A \mathcal{PT} -szimmetrikus Coulomb-potenciál diszkrét és szórási állapotai (M.1)

A \mathcal{PT} szimmetriával rendelkező potenciálokot gyakran különleges határfeltételekkel kell definiálni, mivel csak a komplex x koordinátatér bizonyos trajektóriáin értelmezhetőek normálható állapotaik. A legtöbb jólismert potenciál \mathcal{PT} -szimmetrikus változata előálítható a valós x tengelyen (vagy annak egy véges intervallumán), feltéve, hogy ott nincs szingularitása. Amennyiben mégis van, a valós x tengellyel párhuzamos vonalon, $x - ic$ definiálva őket elkerülhetők a szingularitások. Az ilyen potenciálok esetében általános, hogy a valós változatukhoz képest egy további állapotsorozat is megjelenik a spektrumukban, amely a valós esetben nemfizikai megoldások sorozatának felel meg.

A

$$\left[-\frac{d^2}{dt^2} + \frac{L(L+1)}{t^2} + i\frac{Z}{t} \right] \Psi(t) = E \Psi(t).$$

Coulomb-probléma megoldásait azonban a $t = x - ic$ választással sem lehet regularizálni, mivel egyszerre nem tűnhetnek el az $x \rightarrow \infty$ és $x \rightarrow -\infty$ határesetben. Egy korábbi publikációnkban [M. Znojil, G. Lévai, Phys. Lett. A **271** (2000) 327] úgy kerültük meg ezt a problémát, hogy a Coulomb-potenciál állapotait az $x - ic$ trajektórián értelmezett harmonikus oszcillátor kötött állapotainak egy az egyben történő áttranszformálásával kaptuk meg. Ehhez a valós problémák esetén jólismert oszcillátor-Coulomb leképezést alkalmaztuk, ami a $x - ic$ trajektóriát a komplex x sík egy az első és negyedik kvadránsában értelmezett parabolába képezte le. A probléma \mathcal{PT} szimmetriáját egy a komplex x síkon $\pi/2$ -vel történő elforgatással értük el, ami miatt a k hullámszámot is i -vel kellett szorozni. Ezáltal az energiaspektrum „fejfel lefele” adódott.

Munkánk során ennek a jelenségnek a vizsgálatát végeztük annak érdekében, hogy megnyugtatóan rendezzük a Coulomb-potenciál \mathcal{PT} -szimmetrizálásának a kérdését. Rámutattunk, hogy a problémát egy olyan U-alakú trajektórián érdemes értelmezni, amely párhuzamosan fut le a pozitív képzetes x tengellyel, majd alulról megkerülve annak a másik oldalán párhuzamosan haladva halad felfele. Ezen a trajektórián értelmezve a megoldásokat az energiaspektrum sorrendje helyreáll, továbbá kiderül, hogy a fentebb említettekhez hasonlóan a kötött állapotok két sorozata áll elő, amelyeket a megszokott módon a q kváziparitás kvantumszámmal lehet megkülönböztetni [9].

Vizsgáltuk a Coulomb-probléma szórási állapotait is az említett trajektórián és kiszámítottuk a tarnszmissziós és reflexiós együtthatókat. Azt találtuk, hogy e mennyiségek határozott irányfüggést mutatnak, vagyis a valós potenciálok esetével szemben nem mindegy, hogy a beeső részecske melyik irányból érkezik. Ez teljes összhangban van a korábban vizsgált \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálokra adódott eredménnyel. Ezt a jelenséget gyakran emlegetik olyan szignatúraként is, amely segítségével valószerű fizikai rendszerek esetleges \mathcal{PT} szimmetriáját lehetne kimutatni [12].

Az ismert \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálokkal való további hasonlóságot tártunk fel akkor, amikor a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérülését vizsgáltuk a Coulomb-potenciál esetén. Kiderült, hogy L paraméter $L = -1/2$ értékénél az összes valós energia-sajátérték páronként összeolvad úgy, hogy az azonos főkvantumszámú, de ellentétes kváziparitású állapotok ugyanazt az energiát veszik fel, majd L értékét $L = -1/2 + i\lambda$ szerint a komplex síkon folytatva újra szétválnak és komplex konjugált páronként folytatják útjukat. Ez a folyamat nem érinti a potenciál \mathcal{PT} szimmetriáját, viszont a megoldások megszűnnek \mathcal{PT} -szimmetrikusnak lenni, vagyis megvalósul a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérülése. Ez az eredmény azt bizonyítja, hogy a \mathcal{PT} -szimmetrikus Coulomb-potenciál furcsaságai ellenére is több hasonlóságot mutat a hagyományos \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálokkal, mint amennyi különbség van köztük [13].

1.3 \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálok megoldása 2 és 3 dimenzióban (M.4)

A \mathcal{PT} -szimmetrikus kvantummechanika története során szinte kizárólag egydimenziós nemrelativisztikus potenciálokat vizsgáltak. Ebben az esetben a \mathcal{PT} szimmetria követelménye a valós x tengelyen értelmezett potenciálokra a $V^*(-x) = V(x)$ összefüggéssel biztosítható. Mivel a Schrödinger-operátor kinetikus tagja magasabb dimenzióban is \mathcal{PT} -szimmetrikus, a \mathcal{PT} -szimmetria ilyenkor is a potenciálfüggvényre kirótt feltételekkel biztosítható. Munkám során ezeket polárkoordináták használata esetén határoztam $d = 2$ és $d = 3$ dimenzióban és feltételeket fogalmaztam meg az egyes változóiban adódó Schrödinger-egyenletek egzakt megoldására nézve [4].

Kiderült, hogy a szögváltozóban értelmezett Schrödinger-egyenletekben tekinthetők olyan potenciálok, amelyeket a szokványos, véges értelmezési tartományon definiált egydimenziós \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálok esetén már tárgyaltak, de bizonyos vontkozásiakat módosítani kell. Az azimutszögben értelmezett Schrödinger-egyenlet esetén például periodikus határfeltételeket kell előírni, továbbá a \mathcal{P} tértüközési operátort is másképpen kell definiálni. Kiderült, hogy a képzetes potenciálkomponens csak a szögváltozókon keresztül jelenhet meg a teljes potenciálban, mivel a radiális Schrödinger-egyenlet ugyanolyan alakúnak adódott, mint egy valós, centrális potenciál esetén. A potenciál képzetes komponensére csak a formálisan komplex impulzusnyomaték utalt abban az esetben, amikor a szögfüggő egyenletekben a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérülése következett be. Ez magával vonta a teljes Hamilton-operátor \mathcal{PT} szimmetriájának spontán sérülését is [3].

A vizsgálatok első szakaszában csak kétdimenziós potenciálok esetén tűnt megvalósíthatónak a \mathcal{PT} szimmetria sőtán sérülése. Később 3 dimenzióban a polárszög-változóra adódó Schrödinger-egyenletben szereplő potenciált képzetes taggal kibővítve, a \mathcal{PT} -szimmetrikus Scarf I Rosen-Morse I potenciálokat alkalmazva ez a korlát megszűnt. Korábbi munkáimat abban az értelemben is általánosítottam, hogy különféle részben vagy teljesen egzaktul megoldható periodikus potenciálok alkalmazását javasoltam az azimutszög-változóban [7].

A fenti eredmények után lehetővé vált konkrét egzaktul megoldható potenciálok konstruálása 3 dimenzióban. Ezért a legismertebb (alakinvariáns) egzaktul megoldható egydimenziós potenciálok megoldásainak ismeretében szisztematikus módszert javasoltam egzaktul megoldható \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciálok konstruálására 3 dimenzióban, szférikus polárkoordinátákban. A szög-, illetve radiális változóban olyan egydimenziós potenciálokat tekintettem, amelyek véges tartományon (Scarf I, Rosen-Morse I), illetve a valós pozitív féltengelyen (harmonikus oszcillátor, Coulomb) vannak értelmezve. Feltételeket fogalmaztam meg a \mathcal{PT} szimmetria teljesülésére és azon belül a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérülésére. Zárt alakban adtam meg néhány 3-dimenziós \mathcal{PT} -szimmetrikus potenciál kötöttállapot megoldásait, illetve a megfelelő energia-sajátértékeket [6].

1.4 Helyfüggő effektív tömeggel rendelkező potenciálfeladatok egzakt megoldása (M.4)

A fizika számos ágában szerephez jutnak helyfüggő effektív tömeggel rendelkező kvantumrendszerek. A közelmúltban jelentős erőfeszítések történtek a Schrödinger-egyenlet megoldására különféle effektív tömegekkel, de az eredmények sokkal kevésbé számosak és rendszeresek, mint a konstant tömeggel értelmezett kvantummechanikai hullámegyenletek esetében. A kvantummechanikailag konzisztens egydimenziós, problémák áttranszformálhatók a

$$\left(-\frac{d}{dx} \frac{1}{M(x)} \frac{d}{dx} + V_{\text{eff}}(x) \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

alakra. E feladat megoldása során követni lehet a konstans tömeg esetén szokásos utat, vagyis érdemes a fenti egyenletet változótranszformációval valamely F speciális függvény differenciálegyenletének alakjára hozni, vagyis elvégezni a $\psi(x) = f(x)F(g(x))$ behelyettesítést. A $g(x)$ függvény ψ értelmezési tartományát monoton módon leképezi F értelmezési tartományára. Az $M(x)$ tömegfüggvényt az eddigiekben úgy illesztették be a tárgyalásba, hogy a $g(x)$ függvény deriváltjával fejezték ki. Mivel azonban $g'(x)$ általában nem korlátos és felvehet 0 értéket is, az eddigi példákban az $M(x)$ tömegfüggvénynek szintén voltak zérushelyei és szingularitásai. Ezek értelmezése nem mindig kompatibilis az adott fizikai probléma jellegével.

Munkánk során javaslatot tettünk egy olyan eljárásra, amely garantálja, hogy $M(x)$ véges és pozitív marad a teljes értelmezési tartományon. A formalizmust részletesen arra az esetre dolgoztuk ki, amikor a speciális függvény az általánosított Laguerre-polinom, $F(g) = L_n^{(\alpha)}(g)$ és a tömeg $M(g(x)) = (\gamma + g(x))(\delta + g(x))^{-1}$ alakú, ahol a változótranszformációt leíró függvényt a $g'(x) = g(x)[B(\delta + g(x))]^{-1/2}$ összefüggés definiálja. Az így értelmezett feladat speciális esetként tartalmazza a harmonikus oszcillátort ($\delta = 0$) és a Morse-potenciált ($\delta \rightarrow \infty$, $B\delta = \text{const.}$) is. Ugyan a $g(x)$ függvény nem kapható meg zárt alakban, az inverze igen, vagyis egy ún. implicit potenciálfeladattal van dolgunk. A potenciál is $V_{\text{eff}}(g(x))$ alakban adott, csakúgy, mint a kötöttállapotú hullámfüggvények, amelyek normálási együtthatói szintén zárt alakban előállíthatók. A potenciál négy paramétertől függ (amelyek közül γ és δ a tömegfüggvényben is szerepel), míg a szintén zárt alakban megadható (véges számú) kötöttállapotú energia-sajátérték csak három paraméter függvényei és függetlenek a γ paramétertől.

A $V_{\text{eff}}(g(x))$ potenciálfüggvény és az egész feladat magán viseli mind a harmonikus oszcillátor ($x \rightarrow \infty$, kis n), mind pedig a Morse-potenciál jellegzetességeit ($x \rightarrow -\infty$, $n \sim n_{\text{max}}$). A konstans tömeg esete is egyszerűen adódik a $\gamma = \delta$ behelyettesítéssel. A módszer többféle módon is általánosítható (további $F(x)$ függvények és $M(x)$ parametrizációk tekintetbe vételével) és ez reményt ad arra, hogy fizikailag releváns feladatokhoz illeszkedő effektív potenciálok lesznek származtathatók általa [I].

Egy olyan további eredményt is ennél a pontnál látszik célszerűnek megemlíteni, amely közvetve kapcsolódik az [I] munkához azáltal, hogy ugyanazzal a társszerzővel értük el, illetve hogy további alkalmazásai kiterjeszhetőnek tűnnek a helyfüggő potenciálfeladatokra is. Ez az aszimptotikus iterációs módszer (AIM) alkalmazása

$$f''(x) = \lambda_0(x)f'(x) + s_0(x)f(x)$$

alakú differenciálegyenletek közelítő megoldására. Ennek lényege az, hogy az $f(x)$ függvény egyre magasabb rendű deriváltjait az alacsonyabb rendűekkel kifejezve fenti alakú, de magasabb rendű differenciálegyenlet nyerhető olyan $s_k(x)$ és $\lambda_k(x)$ függvényekkel, amelyek iteratív módon állíthatók elő. Bizonyos aszimptotikus feltételek teljesülése esetén az eredeti differenciálegyenlet közelítő megoldásai nagy pontossággal megkaphatók. A módszer az egzaktul megoldható feladatokkal is kapcsolatba hozható, amennyiben bizonyos esetekben (például az ortogonális polinomokra) értelemszerűen egzakt megoldásokat szolgáltat, illetve az ilyen feladatokhoz tetszőlegesen közeli differenciálegyenletek kezelhetők általa.

Munkánk során több egzaktul nem megoldható potenciálra és azok szuperszimmetrikus partnereire alkalmaztuk a módszert és kiváló egyezést értünk el a numerikusan kapott eredményekkel. Azt találtuk, hogy azonos pontossághoz a potenciálok szuperszimmetrikus partnerei esetén (néha jelentősen) kevesebb iterációra volt szükség, amit magyarázhat az eggyel kevesebb kötött állapot, de az általában egyszerűbb potenciálalak is. A differenciálegyenlet kellően általános alakja miatt a módszer alkalmazhatónak tűnik helyfüggő effektív tömegek, illetve \mathcal{PT} -szimmetrikus feladatok esetén is [II].

I G. Lévai, O. Özer, *An exactly solvable Schrödinger equation with finite positive position-dependent effective mass*, beküldve a Phys. Lett. A-hoz.

II O. Özer, G. Lévai, *Asymptotic iteration method to bound-state problems with unbroken and broken supersymmetry*, beküldve a Central European Journal of Physics-hez.

2. Atommagok alakfázisai közötti átmenetek egzakt leírása a Bohr-féle Hamilton-operátor keretében (A.1)

Az atommagok egyensúlyi állapotukban jellegzetes alakokat vesznek fel. A legjellegzetesebb magalakok, a szférikus, a tengelyszimmetrikusan deformált és az ú.n. γ -instabil alakok megfelelnek az $U(5)$, $SU(3)$ és $O(6)$ szimmetriáknak. Az atommagok kvadrupólus típusú kollektív gerjesztései szintén leírhatók a fenomenologikus Bohr-féle Hamilton-operátorral, amely (a szögváltozók szeparálása után) egy kétdimenziós $V(\beta, \gamma)$ potenciálfelülettel ad számot a rendszer dinamikájáról. Az egyensúlyi állapotok megfelelnek a potenciálfelület minimumainak. Bizonyos paramétereket (pl. nukleonszám) változtatva a potenciálfelület is változik és előállhat az a helyzet, hogy egy korábbi lokális minimumnál (és ezzel magalaknál) lesz a globális minimum, vagyis átmenet megy végbe az egyes alakfázisok között. Ezt a jelenséget kritikus ponton át történő fázisátmenetként lehet értelmezni.

A legegyszerűbb esetben a potenciál csak a β alakváltozótól függ és ilyenkor a Bohr-féle Hamilton-operátor egy öt dimenzióban értelmezett radiális Schrödinger-egyenletre egyszerűsödik. Az ilyen γ -független potenciálok alkalmasak a szférikus és a γ -instabil fázisok közötti átmenet leírására. Ezt az átmenetet egy a β változóban értelmezett végtelen mély derékszögű potenciállal közelítették, amelynek a megoldásai egzakt formában megadhatók Bessel-függvényekkel. Az említett folyamatot egy másodrendű fázisátmenetként értelmezték és az $E(5)$ kritikus ponti szimmetriát rendelték hozzá. A modell paramétermentes arányokat jósol egyes spektroszkópiai mennyiségek (energia-sajátértékek, $E2$ átmeneti valószínűségek) között, amelyek összevethetők konkrét atommagok adataival. Az eddig azonosított példák a $Z = 50$ héjzáródás körül találhatóak: ^{102}Pd , $^{106,108}\text{Cd}$, ^{124}Te , ^{128}Xe , ^{134}Ba .

Egy korábbi munkánkban [G. Lévai, J. M. Arias, Phys. Rev. C **69** (2004) 014304] javasoltuk a

$$V(\beta) = (b^2 - 11a)\beta^2 + 2ab\beta^4 + a^2\beta^6$$

hatodfokú oszcillátor alkalmazását a fenti fázisátmenet leírására. Ez a potenciál kvázi-egzakt megoldásokkal rendelkezik, vagyis csak a legalacsonyabb energiaszintű állapotokra adható egzakt megoldás, viszont éppen ezek azok az állapotok, amelyek alapján az $E(5)$ szimmetria és a vele kapcsolatos fázisátmenet azonosítható. Az állapotok energiasajátértékei és hullámfüggvényei mellett az állapotok közötti elektromos kvadrupólus átmeneti valószínűségek is zárt alakban megadhatók. A potenciál a paramétereiktől függően rendelkezhet szférikus minimummal ($\beta = 0$), deformált minimummal ($\beta > 0$), vagy mindkettővel, miáltal ideálisan modellezheti az említett alakfázisok közötti átmenetet.

A téma keretében elsőként a Ru izotópok sorozatára alkalmaztam a modellt úgy, hogy a kísérleti spektrumot a modellspektrummal illesztettem és meghatároztam az a és b paramétereket. Ezután a kapott paramétereket alkalmazva felvettem a potenciál alakját és ebből az derült ki, hogy a 98-astól a 102-es tömegszámú izotópig a harmonikus oszcillátor ($a = 0$) adja a legjobb közelítést, a 104-es izotópnál potenciál továbbra is szférikus magalaknak felel meg, de az alja laposabb, majd a 106-os és 108-as izotópoknál a potenciálminimum már deformált alaknál jelentkezik. Ez a vizsgálat megerősítette azt az eredményt, hogy a ^{104}Ru atommag alkalmas példa az $E(5)$ kritikus ponti szimmetriára [10]. Ugyanebben a munkában megvizsgáltam, hogy a hatodfokú oszcillátor alkalmas lehet-e a szférikus és a tengelyszimmetrikus alakfázisok között végbemenő elfőrendű fázisátmenet leírására, ami az $X(5)$ szimmetriával jellemezhető. Ebben az esetben a teljes kétdimenziós $V(\beta, \gamma)$ potenciált kell figyelembe venni. Úgy tűnik, hogy azok a közelítő módszerek, amelyek segítségével más $V(\beta)$ potenciálokat kibővítettek a γ változóval,

működhetnek ebben az esetben is. Ilyenkor ugyanis olyan potenciálalakra van szükség, amely rendelkezik egy szférikus és egy deformált minimummal is, amit a hatodfokú oszcillátor a $b < 0$, $b^2 > 11a$ esetén biztosítani tud [10].

Következő munkánk során a fenti illesztéses eljárást alkalmaztuk azokra az atommagokra, amelyeket a szakirodalomban az $E(5)$ szimmtriát jól megvalósító példaként említenek (^{104}Ru , ^{102}Pd , $^{106,108}\text{Cd}$, ^{124}Te , ^{128}Xe , ^{134}Ba). Ezt a sorozatot kiegészítettük néhány olyan további szomszédos izotóppal, amelyek energiaspektrumára elegendő kísérleti adat állt rendelkezésre. Összesen 11-11 atommagot vizsgáltunk meg a $Z = 50$ héjzáródás alatt, illetve fölött. Azt tapasztaltuk, hogy az előbbi csoporthoz a szférikus magalaknak megfelelő paraméterek rendelkezhetők, míg a nehezebb izotópok esetén az egyensúlyi magalak deformálnak adódott. A fentebb említett konkrét atommagok viszont az izotópláncokon belül legközelebb helyezkedtek el a $b^2 = 11a$ parabolához, ami az $E(5)$ szimmtriának felel meg. Különösen így volt ez a könnyebb izotópláncok esetén [III].

A fenti eredmény arra inspirált bennünket, hogy külön vizsgálat alá vonjuk a Ru, Pd és Cd atommagokat. Ennek során a korábban említett 6 Ru izotóp mellett 5 Pd és 6 Cd izotópot is megvizsgáltunk és nem csak az energiaspektrumuk illesztését végeztük el, hanem kiszámítottuk az elektromos kvadrupólus és monopólus átmeneti valószínűségeket is a spektrum alacsonyán fekvő részén. Ezen felül kimutattuk, hogy a $b^2 = 11a$ parabola mentén az energia-sajátértékeket és az átmeneti valószínűségeket jellemző relatív arányszámok állandók (mivel csak a b^2/a kifejezéstől függenek). Ezáltal ugyanolyan paraméterfüggetlen kritériumrendszerrel sikerült bevezetni a hatodfokú oszcillátor esetén is, mint amelyet az eredetileg etalonnak tekintett végtelen mély derékszögű potenciálra fogalmaztak meg. Az így definiált kritikus parabola tehát a szférikus és deformált minimummal rendelkező atommagokat választja el egymástól és egyben igen lapos aljú potenciálgörbének felel meg (mivel ekkor a potenciál csak negyed- és hatodfokú tagokat tartalmaz). Ismét az adódott, hogy a legjobb példák az $E(5)$ szimmetriára a ^{104}Ru , ^{102}Pd , $^{106,108}\text{Cd}$ atommagok szolgáltatják, de nem csak az energiaspektrumuk, hanem az elektromos kvadrupólus átmeneteik alapján is. További új eredményként a ^{116}Cd atommagot is javasoltuk az $E(5)$ szimmetria igen jó példájának [IV].

III G. Lévai, *The sextic oscillator and $E(5)$ type nuclei*, beküldve Journal of Physics Conference Series-hez.

IV G. Lévai, *Search for $E(5)$ type nuclei in terms of the sextic oscillator*, beküldve a Phys. Rev. C-hez.

3. Szuperszimetria nukleáris többtest-rendszerekben (A.2, M.3)

Az atommagok szerkezetének leírásában természetes módon megjelennek fermionok, de a kollektív gerjesztések leírásában bozonikus szabadsági fokok is szerephez jutnak. Ez a helyzet a nukleoncsomó-modellekben (klasztermodellek), ahol a csomók relatív mozgása jelenik meg kollektív mozgásként. Bizonyos feltételek mellett megalkothatók olyan szuperszimetrikus sémák, amelyek a fermionikus és bozonikus szabadsági fokokat egyesített formában kezelik. Az általunk kidolgozott modellben ez megvalósítható az $U(4/12)$ szuperalgebra keretében, amely egyesíti az $U(4)$ bozonikus és az $U(12)$ fermionikus algebrát, ahol a bozonok a relatív mozgáshoz rendelt kvantumok, míg a fermionok nukleon-lyukak a p -héjon. Az egyesítés matematikai alapja az, hogy az $SU(3)$ algebra (amely a háromdimenziós harmonikus oszcillátor szimmetriacsoportja) jelen van mind a bozonikus, mind pedig a fermionikus szektorban és így a két szektor az $SU(3)$ csatlás alapján könnyen elvégezhető. Ezáltal egységes szupermultiplett-ként kezelhetők olyan

atommagok nukleoncsomó-állapotai, amelyek egy alfa-részecskéből és egy p-héjú atommagból állnak. Az SU(3) algebra jelenléte szintén lehetővé teszi azoknak a Pauli-elv által tiltott klaszterállapotoknak a modelltérből történő kizárását, amelyek nem szerepelnek az egyesített atommag SU(3) héjmodellterében. Munkánkban ezt a szuperszimmetria-sémát dolgoztuk ki és alkalmaztuk A=18, 19 és 20 tömegszámú atommagok spektroszkópiai adatainak értelmezésére [5].

E munkát egy 2006-ban lezárt OTKA téma (T37502, Tv. Cseh József) futamideje alatt kezdtünk meg, de az eredmények végső alakra hozása és publikálása áthúzódott 2007-re. Mivel a téma több ponton is kapcsolódik a jelen OTKA pályázat tematikájához (bozon-fermion modellek, szuperszimmetrikus rendszerek, belső szabadsági fokok), illetve mivel 2007-ben kutatóidőm egy részét e téma kidolgozására fordítottam, ésszerűnek tűnt a jelen pályázat témaszámát is feltüntetni az eredményeket összefoglaló cikkben.

Együttműködések

Az 1.2 ponthoz kapcsolódó munkák az MTA és a Cseh Tudományos Akadémia közötti kétoldalú együttműködés támogatásával készültek: (*Nem-hermitikus modellek a kvantum fenomenológiában*, Tv. Lévai Géza, Miloslav Znojil, 2007-2009).

Az 1.4 pontban elért eredmények azon közös munka során születtek, amelyet társ-szerzőmmel 2009 szeptember 28-a és december 25-e között végeztünk, amíg az MTA és a török TÜBITAK által közösen finanszírozott ösztöndíjjal az ATOMKI-ben tartózkodott.

Számszerű mutatók

Megjelent publikációk: 13 (10 SCI) Szerzőszámmal normálva: 10.5 (7.5 SCI)

9 egyszerzős, 3 egyéb első szerzős, 1 harmadik szerzős

- Cikk 10 (10 SCI) Szerzőszámmal normálva: 7.5 (7.5 SCI)
- Konferenciaanyag: 3 Szerzőszámmal normálva: 3

Beküldött munkák: 4 (3 SCI) Szerzőszámmal normálva: 2.5 (1.5 SCI)

1 egyszerzős, 2 egyéb első szerzős, 1 második szerzős

- Cikk 3 (3 SCI) Szerzőszámmal normálva: 1.5 (1.5 SCI)
- Konferenciaanyag: 1 Szerzőszámmal normálva: 1

FTE érték: $0.95 * 0.6 * 4.75 = 2.7075$

A témára a kutatásra fordított munkaidőm 60 százalékát vettem igénybe, 4 éven és 9 hónapon át.