



Néhánytest-rendszerek kötött és nem kötött állapotai

Bound and unbound states of few body systems

Doktori (PhD) értekezés tézisei

Mezei János Zsolt

Debreceni Egyetem
Természettudományi Kar
Debrecen, 2006

Készült:

A Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézetének
Elméleti Fizikai Osztályán

Témavezetők:

Dr. Lovas Rezső

Dr. Papp Zoltán

Bevezetés

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 szabadsági fokok nagyobbik része 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, és a soktest-módszerek jóságát olykor néhánytest-rendszereken ellenőrizhetjük.

A kvantummechanika egyik alapfeladatának tekinthető a legtriviálisabb többtest-problémák, azaz a néhánytest-problémák 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.

Az anyagszerkezet leírásának alapvető eleme a néhánytest-probléma diszkrét, kötött állapotainak az ismerete. Ezen rendszerek megismerésének 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 szórásmátrix (S -mátrix) 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 nem-relativisztikus 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 Fagyejev–Mercurjev-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 meghatározása a csatolási állandóbeli analitikus folytatáson alapuló eljárást is használtam, amely bizonyos fokig módszertani újdonság. Ez az eljárás a rezonancia helyét és egyéb tulajdonságait (hullámfüggvényét, mérhető adatait) kötött állapot feladatok 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.

Célom volt mindezen módszerek finomítása, az analitikus folytatáson alapuló módszer továbbfejlesztése és valós fizikai rendszerekre való alkalmazása.

Eredmények

1. A korrelált Gauss-függvényekből felépített, stochasztikus eljárással optimalizált variációs módszer segítségével meghatároztam több néhánytest-rendszer legalacsonyabb energiájú állapotát, és amennyiben ez az energiaérték a legalacsonyabb küszöb alattinak adódik, igazolom kötött, stabil létüket. A témában elért eredményeim az alábbiak szerint foglalhatók össze:

- (a) Megvizsgáltam a (ne^\pm, me^\mp) , $n, m = 2, 3$ öt- és hattest-rendszerek stabilitását. Azt találtam, hogy ha a részecskéket fermionokként kezeljük, akkor ezek a rendszerek nem kötöttek. Ha

azonban az ötödik (és hatodik) fermiont a többtől megkülönböztetjük, vagy bozonokként kezeljük őket, a rendszerek kötötté válnak [A1].

- (b) Kiindulva valamely kötött atomi öttest-rendszerből, egy vagy több részecske tömegét változtatva meghatároztam a rendszer család stabilitási tartományát. Így megkaptuk a rendszer családba tartozó egyéb valóságos rendszerek kötési tulajdonságait. Meghatároztam a részecskék közötti átlagtávolság-értékeket, melyekből a rendszerek geometriájára, struktúrájára vonatkozóan vontam le következtetéseket. Így például amíg az $(M^+, M'^+, M'^+, m^-, m^-)$ rendszerek esetén a nehéz (M) részecskék egy egyenlő szárú háromszög csúcspontjaiban helyezkednek el osztozva a két könnyű (m) részecskén, addig az $(M^+, M'^+, M'^-, m^-, m^-)$ típusú rendszerek esetén a három nehéz részecske gyakorlatilag egységnyi töltésű egyetlen nehéz részecskeként viselkedik, és ehhez kötődik a két könnyű részecske. Ilyen esetekben a háromtest-modell eredményei alkalmazható ezekre a rendszerekre [A1].
- (c) Vizsgálataim arra is kiterjedtek, hogy egységnyi töltésű nehéz ionok képesek-e kötött rendszert alkotni a Ps_2 dipozitróniummal. Azt találtam, hogy nemcsak a $p\text{Ps}_2$ rendszer, hanem a Li^+Ps_2 és Na^+Ps_2 rendszerek is kötöttek. Megvizsgálva az alkotó elemek közötti átlagtávolság-értékeket azt találtam, hogy a $p\text{Ps}_2$ rendszer $e^+\text{HPs}$ -sé torzul, a protonnál nehezebb törzsek esetén viszont a Ps_2 szerkezete alig módosul. Egy sokkal egyszerűbb $(e^+, e^+, e^-, e^-, m_{x^+})$ öttest-moddellel sikeresen tudtam ezeket a többrészecskés-rendszereket modellezni.

2. Rezonanciaállapotoknak a csatolási állandóbeli analitikus folytatáson alapuló leírási módszerét részletes vizsgálatnak vettem alá egy modellproblémán keresztül.

- (a) Meghatároztam azt az eljárást, amelynek segítségével a módszer alapegyenletét jelentő Padé-közelítés változatai közül a legjobb

eredményt kapjuk a rezonanciák hullámszámára [A2]. A lehetséges jelöltek közül a lánc törtes Padé-közelítés bizonyult a legjobbnak.

- (b) A rezonanciaállapotokban – az állapotok lokalizálása után – meghatároztam a rendszer méretére utaló átlagtávolságokat. Azt találtam, hogy a sugárnégyzet átlagértékének mint a csatolási állandó függvényének éles szingularitása van az elágazási pont környezetében, és a rezonanciaállapotokra kapott átlagértékek a szingularitás egy környezetén kívül a kötött állapotok átlagértékeit folytatják [A2].
 - (c) Új módszert dolgoztam ki a rezonanciaállapotok hullámfüggvényének a kiszámítására [A2].
 - (d) A módszert az instabil ${}^8\text{Be}$ mag $l = 0, 2, 4$ impulzusmomentumú rezonanciaállapotainak a meghatározására alkalmaztam. A ${}^8\text{Be}$ magra a már-már naivnak tekinthető α -csomós modellben, a módszer elemekre (rezonanciaállapot energiája és szélessége, mátrixelemek és hullámfüggvény) kapott eredmények jó egyezést mutatnak a numerikusan egzakt módszerrel kapott eredményekkel, egyéb realiztikusabb számításokkal és a kísérleti eredményekkel. A modell kéttest-kölcsönhatását megváltoztattam, és ezáltal a széles g-hullámú rezonanciaállapot energiaértékére is jó egyezést kaptam a kísérleti- és más számítási értékekkel [A2].
3. A homogén Fagyejev–Merkurjev-egyenletek segítségével tanulmányoztam a $\text{Ps}^- = (e^-, e^+, e^-)$ coulomb-i háromtest-rendszer rezonanciaállapotait. A kéttest-küszöb alatti rezonanciák mellett, sok eddig ismeretlen, rezonanciát kaptam, amelyek a küszöbök irányába mutató egyenes mentén helyezkednek el, és a küszöböknél torlódnak [A3]. Elemeztem a kialakulásukért felelős mechanizmusokat és érveket találtam amellet, hogy az effektust a Jefimov-mechanizmus okozza [A4].

Summary

The microscopic world, just 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.

Few-body systems which are the most trivial multiparticle systems, belong 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 this thesis bound, resonance and virtual states of several few-body systems were studied with different well-established methods. The bound systems were studied with the stochastic variational method. The discrete unbound states (resonance and virtual states) can be considered generalizations of the bound states because they also belong 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. The main results are the following:

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.

- (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 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 simpler $(e^+, e^+, e^-, e^-, m_{x^+})$ -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 the 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 some 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].

E témakörben megjelent 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 Physics.*
- [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 Mountins, 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).