

# Válaszok Dr. Barna Imre bíráló szakmai kérdéseire

Szilvási Réka

- 1. Pár szóban kifejtené, hogy miért a velocity gauge, sebesség mérték a kedvezőbb a számolások során és miért nem a length gauge, hosszúság mérték! (Atomfizikában fotoionizációban jó 20 éve ez volt a kedvezőbb ezt használtuk, mert nem kellett a numerikus hullám függvényeket deriválni.) Ez számomra nem volt teljesen egyértelmű.*

A kutatásaim során azt mutattam ki, hogy a kvázi stacionárius állapotok komplex energiájának időfüggő külső intenzív lézerterek hatására történő módosulásának leírása a nem-hermitikus kvantummechanika formalizmusának sajátosságai következtében a vektor potenciálban kvadratikus Hamiltoni tag megtartásával lehetséges (mivel ebben az esetben a várható értéket számoljuk, nem pedig az átmeneti mátrixelemet). E tag elhagyása vagy kitranszformálása ebben a modellkörnyezetben nem lehetséges; a pA és az rE (length gauge) mértékek alkalmazása nem konzisztens (melyek azonossága abban az esetben áll fenn, amennyiben az  $A^2$  tag elhagyható).

- 2. Az alkalmazott formalizmus lehetővé teszi-e, hogy a dipól közelítésen túli hatásokat, pl. első vagy második sorbeli járulékokat is figyelembe vegyen?*

A formalizmus eszenciája két dologban rejlik:

1. A komplex skálázás alkalmazása a hely koordinátákon és az ezáltal áttérés a nem-hermitikus kvantummechanika formalizmusára.
2. A  $(t, t')$ -módszeren alapuló elsőrendű perturbatív energiakorrekció származtatása és kiszámítása. Ennek feltétele a kvázi-stacionárius állapotú rendszer hullámfüggvényének időben lecsengő természete, melyet a sajátenergia komplex mivolta biztosít. Az így számított norma faktor komplex, de nem skálázási paraméter függő!

A külső lézertér hatását a vektorpotenciál kódolja, mely minimális csatolással van beépítve a lézerhez csatolt rendszert jellemző Hamilton-operátorba. A dipól közelítés elhagyásával a vektor potenciál helyfüggését figyelembe kell venni.

Mivel a teljes rendszert leíró Schrödinger-egyenletet szükséges komplex skálázni, így a vektor potenciál helyfüggő tagjait is alá kell vetni a komplex skálázásnak. A  $(t, t')$ -perturbatív komplex energia korrekció formulába ennek megfelelően egy új helyfüggő és a véges bázis alkalmazása miatt skálázási paraméter függő tag kerülne be, mely  $\theta$ -függése külön analízist igényel.

Ehhez hasonló számolási probléma a nem-hermitikus szórás elmélet, mellyel Moiseyev is foglalkozott (N. Moiseyev: Non-hermitian quantum mechanics, Chapter 8, Cambridge press, 2011). Abban a problémakörben a szórási amplitúdó (T) komplex és a véges bázis miatt jelenik meg a  $\theta$ -függés. Az optimális  $\theta$  meghatározása a  $\frac{dT}{d\theta} = 0$  feltétellel történik. Ez a skálázási paraméter optimalizálás elvben átültethető a komplex energia korrekció esetére is. Ezek alapján elvi akadály a kiterjesztésnek nincs.

*Megjegyzés:* A dipólus közelítésben érvényes vektorpotenciál esetében is előáll a komplex energia korrekció formulában egy helyfüggő tag (pA tagból, mely egy extra  $e^{-i\theta}$  tagot hoz be), azonban ez a mátrixelem nem ad nullától különböző járulékot.

- 3. Mit gondol a jelölt a következő messzire vezető ötletéről? A fontos és figyelembe vett magfizikai kölcsönhatás a fenomenologikus Woods-Saxon potenciál, erre is van ismert analitikus hullámfüggvény ami kifejezhető a hipergeometrikus függvénnyel. (Szakirodalom: Flügge Siegfried (1999). *Practical Quantum Mechanics*. Springer Berlin Heidelberg). Esetleg ebben a bázisban is lehetne számolni a Laguerre polinomok helyett?**

A számítások során többek között azért találtam alkalmasnak a Laguerre-polinomokkal kifejezett harmonikus oszcillátor bázist, mert a Matlab környezetben jól kezelhetőek a Laguerre-polinomok, illetve az ezzel a bázissal történő kifejtés jól ismert és több helyen alkalmazott, elemzett módszer. A bázisnak egy „b” paramétere van. A spektrum oszcillátor paramétertől való függése könnyedén értelmezhető, mely megkönnyíti a spektrum releváns részeinek kiválasztását a „b” paraméter hangolásával. A Woods-Saxon potenciál használata előtt végeztem számításokat harmonikus oszcillátor potenciállal is, melyhez egy evidens választás az oszcillátor bázis.

Azonban elvi akadály a más bázisfüggvények alkalmazásának nincs. A bázis függvény „jósa” a szükséges bázisfüggvény szám csökkenésével van reciprok viszonyban. (Gauss típusú bázisfüggvényeket is alkalmaztam, melyek kevésbé bizonyultak effektívnek a Matlabos és Pythonos számításokban.) A hipergeometrikus függvények általánosak, több fizikában megjelenő függvény előállítható ezekkel, valójában a Laguerre-polinomok egy általánosított felírása is épp hipergeometrikus függvényeket tartalmaz. (Ez a differenciálegyenletek hasonlóságából is következik). Egy lehetséges, hipergeometrikus függvénnyel történő kifejezése a Laguerre-polinomoknak megtalálható a Communications of the Korean Mathematical Society lapban publikált cikkben is (<https://doi.org/10.4134/CKMS.c200208>):

$$\frac{n!}{(1+\alpha)_n} L_n^{(\alpha)}(x) = {}_1F_1[-n; 1+\alpha; x].$$

A hipergeometrikus függvények pl. Matlabba is beépített függvények, ami következtében nincs numerikus/szimbolikus számítási akadály az alkalmazásuknak; megfelelő bázisfüggvény komponensek lehetnek.

A teljes Woods-Saxon megoldás bázisként való alkalmazása már összetettebb probléma. Két különböző módon is elindulhatunk:

- Tanulmányozva a *Siegfried-Flugge* könyvet, a teljes megoldás kifejezése tartalmazza az  $a$ ,  $V_0$ ,  $R$  paramétereket és a Woods-Saxon (WS) rendszer sajátenergiáját is, ami ebben a potenciálban egy kötött állapothoz tartozhat: az általános WS bázisfüggvény alakot használva  $E$  hangolásával azt térképezhetnénk fel, hogy milyen energiatartományt közelítünk a legjobban a bázisfüggvények szerinti kifejtéssel (hasonlóan az oszcillátor „ $b$ ” paraméteréhez).
- A határfeltétel illesztésekből adódó (64.15) formula egy sajátérték feltételt ad meg, mellyel egy  $E$  energia illetve  $V_0$  mélység és  $a$  diffuzitás paraméter közötti összefüggést kapunk, lényegében. A kvázi-stacionárius alfa-klaszter rendszer komplex energiasajátértékének ( $E_{qs}$ ) előállításához a WS szabad paraméterek hangolása szükséges, amelyek ebben az esetben  $E$ -t is meghatározzák.

A Woods-Saxon bázisfüggvények alkalmazása ezek alapján nagyon hasznos javaslat, mely további analízis és további kutatások tárgya is lehet.