

ZÁRÓJELENTÉS

Különleges atommagoktól a molekuláris elektronikáig 2004. április 1–2008. december 31.

E munka keretében a gyengén kötött és a nem kötött magfizikai néhánytest-rendszerek leírási módszereit tökéletesítjük és alkalmazzuk magfizikai, atomfizikai és kondenzált rendszerek fizikájához tartozó feladatok megoldására. A legkönnyebb magok és az ütközéseik során kialakuló rendszerek néhánytest-rendszerek. A nehezebb atommagok ugyancsak néhánytest-rendszerekként foghatók föl, ha néhány nukleoncsomóra könnyen felbonthatók, miközben a legfontosabb nukleoncsomók maguk is néhánytest-rendszerek. A magfizikai néhánytest-rendszerek leírására kifejlesztett módszereinket azonban atom- és molekulafizikai objektumok leírására is használjuk, sőt szilárd testekben létrehozható zárványok is tanulmányozhatók hasonló leírásmódokkal. A kvantummechanikai módszereknek a molekuláris elektronikára kifejlesztett változata is hasonló gyökerű.

Különböző munkáink között összekötő kapocs, hogy gyakran különös figyelmet fordítunk a nem kötött rendszerek rezonanciáira. Módszereink nagy része rezonanciaállapotok leírására lett kifejlesztve, vagy egyéb állapotok olyan leírását teszik lehetővé, amelyben a rezonanciák mint báziselemek játszanak szerepet.

A most áttekintendő munka a T029003. sz. OTKA-program egyenes folytatása, és a cikkek között van kettő, amelyen a T029003. sz. szerepel, mert a beküldés pillanatában az új szám még nem volt ismeretes.

I. Néhánytest-feladatok

1. A stochasztikus variációs módszer alkalmazásai

Néhány nukleon és nukleoncsomó kötött állapotainak leírására fejlesztettük ki a 90-es évek közepén a korrelált Gauss-bázisos stochasztikus variációs módszert. A korrelált Gauss-bázis olyan Gauss-függvényekből épül fel, amelyekben a négyzetes kitevő helyén valamilyen relatív koordináták pozitív definit kvadratikusságú formái állnak. Az antiszimmetrizálás ellenére az ilyen függvényekkel majdnem minden mátrixelem analitikusan végigszámolható. A korrelált Gauss-bázis nem ortogonális, és elemeit célszerű stochasztikus módszerrel megválasztani. Így erősen korrelált rendszerek is viszonylag kis bázissal is majdnem egzaktul leírhatók.

- A) Nagy összefoglaló cikk született a Physics Reports c. folyóirat számára Coulomb-néhánytest-rendszerek stabilitásáról.
- B) Két- és háromdimenziós félvezető kvantumpettyekben található töltött excitonokat modelleztünk Coulomb-háromtest-rendszerként, és rezonanciáikat lokalizáltuk korrelált Gauss-bázisos stochasztikus variációs módszerrel és komplex skálázással. Kiderült, hogy a rezonanciák valószínűleg megfigyelhetők kísérletileg, és hogy a kételektron–egylyuk-rendszerek viselkedése kevésbé, az egyelektron–kétlyuk-rendszereké viszont erősen függ a dimenziószámtól.
- C) A (kötött állapotú) stochasztikus variációs módszert a pozitron-hidrogén (e^+H) rendszer rezonanciaállapotaira alkalmaztuk a koordináták komplex skálázásával, ami a rezonancia hullámfüggvényét négyzetesen integrálható függvényé transzformálja. $L = 0$

kvantumszámú rezonanciákat írtunk le. Az elektron-proton, pozitron-proton és elektron-pozitron korrelációs függvények meghatározásával azt vizsgáltuk, a három részecske hogyan rendeződik el az egyes állapotokban. Megmutattuk, hogy az $n = 2$ -es küszöbhez legközelebb lévő rezonancia, habár döntően $H+e^+$ klaszterizációt mutat, tartalmaz $(1s)$ -pozitronium+proton-szerű komponenst is.

2. A Fagyjev–Merkurjev-módszer alkalmazásai

A három töltött részecske kvantummechanikai tárgyalásának Fagyjev–Merkurjev-módszere a konfigurációs térbeli Fagyjev-egyenleteken alapszik, és a megoldást a hosszú hatótávú kölcsönhatási tagok sajátos kezelése teszi lehetővé.

- A) A Coulomb-háromtest-probléma egzakt tárgyalásának Fagyjev–Merkurjev-egyenleteire az utóbbi években bevezettünk egy hárompotenciálos formalizmust. A Coulomb-háromtest-probléma másik forgalomban levő megoldása Sasakawa és Sawada nevéhez fűződik. A két formalizmust sikerült egymással analóg formára hozni, amelyben a különbség pontosan látható, és a Sasakawa–Sawada-típusú megoldást a korábban általunk kifejlesztett szeparábilis kifejtéssel előállítani. (A szeparábilis kifejtés során potenciálokat kell nemlokális szeparábilis tagok teljes rendszere szerint kifejtetni.) Így a két megoldást egymással össze tudtuk hasonlítani. Kötött és szórási állapotokra vett példák azt mutatják, hogy a két módszer – mint a szeparábilis sorfejtés és mint a parciális hullámok szerinti sorfejtés rendjének függvénye – ugyanahhoz a numerikus értékhez tart, de a Fagyjev–Merkurjev-számítások gyorsabban konvergálnak.
- B) A Coulomb-háromtest-feladat Fagyjev–Merkurjev-integrálegyenetekkel való kéttest-küszöb fölötti megoldásával mód nyílik a probléma természetrajzának felderítésére. A két elektron és egy pozitron együttesében fellelhető S-hullámú rezonanciákat tanulmányoztuk. Megtaláltuk az összes ilyen ismert rezonanciát s emellett a kéttest-küszöbökhez tapadó nagyszámú új rezonanciára leltünk. A rezonanciákat az S-mátrix-pólusuk révén azonosítottuk. A küszöbnél sűrűsödő sok rezonancia arra utal, hogy valójában végtelen sok rezonanciáról van szó. Az a sejtésünk, hogy a vonzó Coulomb-potenciált is tartalmazó Coulomb-háromtest-feladat általános tulajdonságára bukkantunk. Ezt az a tény is alátámasztja, hogy a hidrogénatom+elektron rendszerben korábban úgy találtuk, hogy a szórási hatáskeresztmetszet gyorsan oszcillál.
- C) A két elektron és egy pozitron együttesében a kéttest-küszöbökhez tapadó nagyszámú új rezonancia természetét vizsgáltuk. Úgy találtuk, hogy a komplex energiasíkon szabályos egyenes mentén rezonanciapólusok sorakoznak a magasabb küszöbökhez tapadóan is. Ezzel megerősödött az a hipotézis, hogy a jelenség valóban a Coulomb-háromtest-feladat általános tulajdonsága, és hogy a rezonanciahelyek végtelen sorozatokat alkotnak, amelyek a küszöbhez konvergálnak. Küszöb körüli állapotorlódást kéttest-problémában hosszú távú vonzó erő okozhat, és a háromtest-rendszerben talált jelenséget ilyen effektív kéttest-rendszer segítségével érthetjük meg. Két lehetséges magyarázatot vizsgáltunk: a harmadik részecske okozta nagy hatótávú polarizációt és a Jefimov-hatást. Mivel az elektron-pozitron rendszer 1-es főkvantumszámához tartozó küszöbnél a polarizáció rövid hatótávú, ám mégis vannak rezonanciák, a Jefimov-hatást tartjuk valószínűbbnek.
- D) A proton+deuteron rendszert írtuk le a Doleschall-féle nemlokális kéttest-potenciállal a háromtest-küszöb alatt. Az eredmény jó: nem rosszabb, mint a háromtest-erőt szükségszerűen tartalmazó lokális potenciálos leírás.
- E) A ^{12}C csomómodellje három alfa-részecskét foglal magában. Az alfa-alfa potenciálok azonban többnyire impulzusmomentum-függők, és nem tudják az alfa+alfa+alfa rendszert

jól leírni. A felelősséget rendszerint háromtest-erőkre hárítják. Mi azonban az inverz két- és háromalfa-probléma megoldásával megalkottunk egy olyan impulzummomentum-független lokális alfa-alfa potenciált, amely egyszerre írja le korrektil a két rendszert. Igaz, a potenciált nem a Schrödinger-egyenletbe, hanem az ún. halszálkás modellbe illesztettük be. A nukleon-nukleon kölcsönhatásból ugyanis az alfák közötti kölcsönhatásra levezethető potenciál a Pauli-elv miatt valójában nemlokális, és a halszálkás modell a nemlokalitást különválasztva, optimális módon építi be a két- és a háromtest-modellbe. Az alfa+alfa rendszer alapállapotú rezonanciaenergiáját, a 0, 2 és 4 impulzusmomentumú fázistolást, az alfa+alfa+alfa alapállapotú energiáját és a 0^+ spin-paritású gerjesztett állapotú rezonancia energiáját ugyanaz a potenciál képes leírni. Ez az eljárásnak és a halszálkás csomómodellnek is nagy sikere.

II. Csomóképződés atommagokban

Az atommagok bomlása és reakciói azt mutatják, hogy sok magállapot jó közelítéssel kisebb nukleoncsomók állapotaiból épül fel. Korábban csoportunk néhány tagja kiderítette, hogy a csomókból való felépíthetőség összefügg a magállapotok, a fragmentumállapotok és a fragmentumok közötti relatív mozgás szimmetriájával. 2004–2008 között elmélyítették az ezen összefüggésre vonatkozó ismereteket.

1. Megvizsgáltuk, hogy az atommagok csomósodása (klaszterizációja) hogyan függ a kvadrupólus deformációtól. Kiderítettük, milyen kétklaszter-konfigurációk valószínűek egy mag alapállapotában (mely rendszerint közel gömbszimmetrikus), továbbá szuper- és hiperdeformált állapotában (tengelyarány: 2:1, ill. 3:1). Az ^{36}Ar , a ^{40}Ca és a ^{252}Cf esetét vizsgáltuk meg.

A vizsgált magállapotokhoz az $U(3)$ csoport egy-egy reprezentációját rendeltük, és ezt próbáltuk felépíteni a különféleképpen kettéosztott mag részrendszereit és ezek relatív mozgását jellemző reprezentációkból. A különböző csomókat alkotó nukleonok (is) megkülönböztethetetlenek, tehát a Pauli-elv vonatkozik rájuk. A Pauli-elvnek a csomók közti kicserélődésre vonatkozó előírásait az $U(3)$ kvantumszámok kombinálásakor vettük figyelembe. A könnyű magokra a valódi (a harmonikus oszcillátor-problémában és az Elliott-modellben is fellépő) $U(3)$ szimmetria alkalmazható, a nehéz magok esetére pedig a kvázidinamikai (vagy effektív) $U(3)$ szimmetria. Az egy-egy állapothoz rendelhető $U(3)$ kvantumszámok pontosan megfeleltethetők az állapot kvadrupólus deformáltságának.

Úgy találtuk, hogy a különféleképpen deformált állapotok jól meghatározott csomópárokból rakhatók össze. Az enyhén deformált alapállapot erősen aszimmetrikus párokból, a hiperdeformált állapot közel szimmetrikus pár(ok)ból, a szuperszimmetrikus pedig köztes aszimmetriájú párokból. Az eredményeket energetikai megfontolásokkal vetettük egybe. Ez utóbbit részben a kötési energiákra alapozva végeztük, részben a két csomó közti potenciál segítségével. Ezek a vizsgálatok több csomóból felépülő állapotokra is kiterjeszthetők, és három klaszterre tagozódó számos magállapotra ezt meg is tettük. Preferált konfigurációknak azok mutatkoztak, melyek a valószínű kétsomó-állapotokat is elő tudják állítani.

2. Szomszédos atommagok elektromágneses átmeneteinek és nukleonátadási reakcióinak valószínűségét határoztuk meg egységesen az általunk korábban bevezetett klaszter-szuperszimmetria alapján. A szuperszimmetria bozonokból és fermionokból álló különféle rendszereknek lehet a tulajdonsága. A magfizikai szuperszimmetria figyelemre méltó sajátossága, hogy érvényességét kvantitatív módon tudjuk kísérletileg ellenőrizni. A magfizikai szuperszimmetria érvényességét először magok kvadrupólus kollektivitásával kapcsolatban vetették fel. Az esetben a bozonok a kvadrupólus rezgés fononjai, a fermionok pedig nukleonok. Az általunk bevezetett

szuperszimmetria a dipólus mozgáshoz kapcsolódik. Ilyen mozgást végez egymáshoz képest két nukleoncsomó. Az újfajta szuperszimmetriát közelítőleg szintén érvényesnek találtuk.

3. Dinamikai és kvázidinamikai szimmetriák

- A) A soknukleon-rendszer kölcsönhatását jellemző dinamikai szimmetria közelítőleg érvényes. A szimmetria sérülését vizsgáltuk meg az $^{16}\text{O}+^4\text{He}$ rendszerben.
- B) A kvázidinamikai szimmetriáknak a magfizikai klaszterizációkban játszott szerepét részletesen vizsgáltuk. (Egy szimmetriát kvázidinamikainak nevezünk, ha az energia sajátérték-egyenletében szerepet játszik, holott sem a Hamilton-operátor, sem sajátvektorai nem szimmetrikusak.) Algebrai klasztermoდელებben két egzaktul megoldható határeset van: a merev rotor esetének megfelelő $U(3)$ szimmetria és a puha vibrátornak megfelelő $O(4)$ szimmetria. Az általános eset a két határeset között van. Az $U(3)$ -ról megmutattuk, hogy kvázidinamikai szimmetriaként megmarad általános esetben is, és ezt az sem befolyásolja, hogy a Pauli-elv figyelembe van-e véve. A kvázidinamikai $U(3)$ szimmetria érvényes nehéz magok csomóállapotaira is. Ez lehetővé teszi a Pauli-elv közelítő figyelembevételét nehéz magok algebrai csomómodelljében is.

- 4. Csomómodellekben tárgyaltuk a kvantumrendszerek fázisait és fázisátmeneteit. Az atommagok legközönségesebb makroszkopikus modellje a cseppmodell, és ezért a magok anyagát folyadéknak lehet tekinteni. A folyadékkép mikroszkopikus megfelelője a héjmodell. Könnyű neutrongazdag magokban előfordul, hogy alfa-csomók molekuláris együttese merev képződményként (pl. egyenlőoldalú háromszöggént) viselkedik, mert a neutronok stabilizálják a rendszer alakját. Az ilyen merev szerkezetet pedig szilárd fázishoz hasonlíthatjuk. Alfa-részecskékből felépíthető magok bozonkondenzátumszerű állapotai pedig gáz fázishoz hasonlóan viselkednek. Ez a nyelvezet szemléletesen leírja a csomósodásra hajlamos könnyű magokat.

III. Rezonanciák atommagokban

1. Rezonanciák elmélete

- A) Az Atomki Elméleti Fizikai Osztálya még a 70-es években, Gyarmati Borbála vezetésével kezdett olyan magszerkezeti leírási módszereket tanulmányozni, amelyekben az energiát komplexnek tekintették. Ahogyan Tore Berggren 1968-ban megmutatta, ez nem pusztán technikai fogás, hanem a kvantummechanika egyfajta kiterjesztése. Ha a bázisban szereplő energiakontinuumot a komplex energiasíkba torzítjuk, olyan bázist nyerhetünk, amelyben a rezonanciák mint komplex energiájú diszkrét állapotok szerepelnek. A rezonancia hullámfüggvénye (a Gamow-hullámfüggvény) azonban végtelenben divergál, ami speciális bánásmódot kíván. Bohm-nak és munkatársainak később sikerült a kvantummechanika kiterjesztését matematikailag megalapozni a „rigged Hilbert-terek” elméletében szereplő Gelfand-triplet fogalmának a segítségével. Erről részletes összefoglaló cikkünk jelent meg.
- B) A komplex energiás leírásmodnak bizonyos értelemben alternatívája az atom- és molekulafizikában bevezetett „komplex skálázás”, amelyet a magfizikában mi honosítottunk meg 1980 táján. A komplex skálázás – vagy más néven komplex energiasíkba való beforgatás – olyan transzformáció a rendszer Hamilton-operátorán, amely a kötött állapotokat és a rezonanciákat helyben hagyja, de a rezonancia-hullámfüggvényeket négyzetesen integrálhatóvá teszi, a folytonos kontinuumot pedig egy komplex síkbeli egyenesbe forgatja.

- C) Izgalmas kérdés a Berggren-bázist használó közelítés és a komplex skálázás kapcsolata. Az izobár analóg rezonanciákat fenomenologikusan leíró csatolt Lane-egyenletek megoldására mindkét módszert alkalmaztuk, és ezen az egyszerű példán megmutattuk, hogy mindkét módszer pontosan adja a rezonancia komplex energiáját. Emellett ez a komplex energia egybeesik a valós tengelyen számolt S-mátrix egypólus-közelítéssel illesztett pólushelyével. A Berggren-bázis használata azért előnyösebb, mert az „igazi” rezonancia-hullámfüggvényből a mag szerkezetére vonatkozó információ közvetlenebb módon olvasható ki.
- D) Nemzetközi műhelykonferencián emlékeztünk meg az alapvető Berggren-cikk megjelenésének 40. évfordulójáról. Itt négy előadásban foglaltuk össze a témához való jelentős hozzájárulásunkat.

A rezonanciafogalmat a csoport praxisában két összefüggésben szoktuk alkalmazni: mint leírandó fizikai állapotokat és mint a leírás eszközeit.

2. Bomló állapotok leírása

- A) A protonelhullatási vonalon túli magoknak már az alapállapotuk is bomlik. A ^{141}Ho mag protonkibocsátással járó bomlását egy olyan törzs+proton modellben írtuk le, amelyben a törzs alapállapotú rotációs sávja mellett a dinamikus triaxiális deformációt jelentő ún. gamma-vibráció is jelen van. Számításaink azt mutatják, hogy ennek az új szabadsági foknak a figyelembevétele nem javítja a kísérleti eredményekkel való egyezést. Azért, hogy a triaxiális esetre is el tudjuk végezni a törzs nagyszámú állapotához tartozó nagyszámú „csatornát” tartalmazó csatolt csatornás számolásainkat, új módszert kellett kifejlesztünk, amely a harmonikus oszcillátoros bázison való sorfejtés és az R-mátrix elmélet ötvözéséből jött létre.
- B) A harmonikus oszcillátoros R-mátrix-módszert egyébként egy egyszerűbb esetre összehasonlítottuk a csatolt egyenletek direkt megoldásával (mint „egzakt” megoldással) és egy Berggren-féle Gamow-függvényes sorfejtéses megoldással. A Berggren-bázis eleve tartalmazza a bomlékonyságot, így széles rezonanciákra természetesen az „egzakt” eredményhez közelebb áll, de keskeny rezonanciákra az oszcillátoros R-mátrix-módszer is kielégítően pontosnak bizonyult.
- C) A ^{141}Ho alkalmas adott annak a vizsgálatára is, hogy a héjszerkezet mennyiben módosul a protonelhullatási vonal környékén. A magok héjszerkezete erősen módosul a neutronelhullatási vonal mentén. Hasonló változásokat a protonhéjak szerkezetében erősen protontöbbletes magokban még nem észleltek. Azonban az effektív nukleon-nukleon kölcsönhatás erősen megváltozik, különösen a tenzortag, s ennek következtében a nukleonra ható átlagos tér spin-pálya potenciál is. A ^{141}Ho alap- ($7/2^-$) és izomer ($1/2^+$) állapotainak protonkibocsátással járó bomlását vizsgáltuk elméletileg, társszerzőink kísérletéhez kapcsolódva. Megvizsgáltuk azt is, milyen valószínűséggel vezet a bomlás a ^{140}Dy -nak az alap- és egy gerjesztett állapotára. A modellbeli ^{141}Ho tulajdonságai jelentősen függenek a mag alakjától. Hartree-Fock-Bogoljubov- (HFB) számolásaink nagyobb β_2 deformációt jósolnak, mint a korábban általunk használt véges hatótávú erőn alapuló cseppekemodell. Az új deformációs paraméterekkel és deformált spin-pálya kölcsönhatással eredményeink sokkal jobban egyeznek a kísérlettel, mint korábbi eredményeink.

3. Rezonanciaállapotok mint a magszerkezeti leírás eszközei

- A) Egy gömbszimmetrikus potenciálprobléma antikötött állapotának nevezzük a Schrödinger-egyenlet olyan diszkret megoldását, amely az origóban reguláris, ám aszimptotikusan az exponenciálisan csökkenő parciális megoldás együtthatója nulla (tehát exponenciálisan növekszik). Az ilyen „állapot” természetesen nem fizikai állapot, de holléte befolyásolja a szórási képet, és a Berggren-bázisba bevehető. Az antikötött állapotot is tartalmazó Berggren-féle egyrészecekske-bázist sikerrel alkalmaztuk a ^{11}Li , a ^{70}Ca és a ^{80}Ni atommagokra. A neutronglóriás ^{11}Li atommag első gerjesztett állapotáról úgy találtuk, hogy a p^2 konfigurációnak van benne nagy súlya.
- B) Rezonanciaállapotok párkölcsönhatásban játszott szerepét igyekeztünk felderíteni. Nemkötött állapotok betöltését is megengedő nukleáris szupravezetőállapotokat állítottunk elő Bardeen–Cooper–Schrieffer- (BCS-) közelítésben Berggren-féle egyrészecekske-bázist használva. Ebben a szokásos kötött állapotok mellett rezonancia- és kontinuumállapotok is szerepelnek. Az $^{20-22}\text{O}$ -re és a ^{84}Ni -re végzett számítások a rezonáns járulékot nagynak adják. Az energiahézag a párerő rezonanciákat is tartalmazó bázisban vett mátrixelemeiből számolható, ezért a kvázirészecekske-energiák természetesen komplexek. Vizsgáltuk, hogy a kvázirészecekske-energiák képzetes része megadja-e a rezonanciák szélességét. Azt kaptuk, hogy az eredmény csak addig értelmezhető fizikailag, amíg a kvázirészecekské lyuktartalma elég kicsi. A nem rezonáns kontinuum járulékat általában kicsinek találtuk.
- C) Óriás atommagra alkalmazott Skyrme–Hartree–Fock-féle önkonzisztens modellből véges magra levezetett cseppmodell-paraméterek meghatározásához járultunk hozzá a cseppmodell Sztrutyinszj-féle héjkorrekciójának a spektrum folytonos részétis figyelembe vevő kiszámításával.
- D) A rezonanciák leírására elterjedt komplex skálázásos módszert ütközési jelenség leírására használtuk. E régi leírási módszert 1997-ben fedezték fel újra ütközésekre. Hosszú hatótávolságú potenciálok esetére is alkalmazták, de csak „külső komplex skálázás” nevű változatát. A külső komplex skálázás során a koordináták komplex kiforgatását csak egy külső tartományban végzik el, de többrészecekske-rendszerekre a konfigurációs tér ilyen szétválasztása rendkívül kényelmetlen. Mi megmutattuk, hogy a szokásos (uniform) komplex skálázással is megoldható a szórási probléma, még akkor is, ha hosszú hatótávolságú Coulomb-kölcsönhatás van jelen, s így a „külső skálázást” kiküszöböltük. A módszer lényege az, hogy a szórást leíró radiális Schrödinger-egyenlet aszimptotikus megoldását ismerve a parciális hullámnak a síkhullámtól származó tagját leválasztjuk, és a tisztán kifutó aszimptotikájú maradék tagra inhomogén differenciálegyenletet vezetünk le. Ennek a forrástagja a síkhullámtag lesz. Az inhomogén egyenletet komplex skálázással tetszőleges négyzetesen integrálható bázison megoldhatjuk. A megoldás komplex inhomogén lineáris egyenletrendszerre vezet. A módszert előbb potenciálproblémára próbáltuk ki sikerrel, majd a $^3\text{H}(p,n)^3\text{He}$ Lane-modellben megmutattuk, hogy csatolt csatornákra is működik. Szeretnénk ezt az új eljárást a Coulomb-háromtest-szórási folyamat leírásában is felhasználni.
- E) Az állapotsűrűségnek nevezett mennyiséget a kontinuumra általánosítottuk. A kontinuum állapotsűrűsége a (folytonos energiatartományban) ütköző rendszernek az ütközés következtében beálló késleltetésével arányos, tehát a kontinuum rezonanciaszerkezetét tükrözi. Korábban L^2 -függvényeket és egy simítási eljárást használtunk, most komplex skálázást.
- F) A nukleáris potenciál általánosan használt Woods–Saxon-féle alakja a magfelületen túl lassan csökken, s emiatt a széles rezonanciák energiája numerikusan bizonytalan. Javasoltunk egy véges hatótávú alakot, és ennek paramétereit illesztettük a Woods–Saxon-

potenciál tipikus paramétereire. Az új potenciál az origót kivéve akárhányszor folytonosan differenciálható (ott is, ahol nullává válik), erősen hasonlít a Woods–Saxon-potencialra, kivéve az eltűnő nyúlvány tartományában, és a kötött állapot spektruma is nagyon hasonló.

IV. Molekuláris elektronika

A molekuláris elektronika mindenekelőtt egy olyan kvantummechanikai bázist kíván, amely a sok atomból álló rendszer leírására optimális. Módszerünk széles körben használható, úgyhogy jelentősége a pályázatunkban megfogalmazott feladaton messze túlmegegy.

1. A módszer lelke egy Lagrange-bázis, amelyben a név a Lagrange-interpolációra utal. A bázisfüggvény egy rácshoz van rögzítve, és minden rácspontban Lagrange-interpolációra van optimalizálva. Az interpoláció abszcisszái (diszkretizációs pontjai) egy súlyfüggvény által meghatározott Gauss-kvadratúra pontjai, ami az integrálást optimalizálja. A Lagrange-bázis teljes elemei pedig analitikus formában vannak adva, térben lokalizáltak és ortonormáltak. Így a numerikus integrálás pontos. E bázisfüggvények kardinális függvények: az i -edik függvény eltűnik minden diszkretizációs pontban, kivéve az i -edik pontot mindazonáltal a függvények folytonosak. A kardinalitás következtében a hullámfüggvény valamely rácspont köré centrált báziselemhez tartozó sorfejtési együtthatója, amit variációsan szoktunk meghatározni, nem más, mint magának a hullámfüggvénynek az értéke a rácspontban. Ugyancsak a kardinalitás következménye, hogy a potenciálisenergia-mátrix diagonális. A kinetikus energia mátrixelemei analitikus vagy numerikus integrálással könnyen kiszámolhatók. A számítási munka az atomok számával arányos. A rács egy leképezéssel a probléma természetéhez idomítható.

A numerikus eredmények azt mutatják, hogy a megoldásfüggvény rendkívül gyorsan konvergál; lényegesen hatékonyabb, mint a végesdifferencia-módszerek vagy a hagyományos síkhullám bázisos módszerek. A számítási idő az atomok számával arányos. E jó tulajdonságokban fontos szerepet játszik az, hogy a Hamilton-mátrixnak nagyon kevés nem nulla eleme van.

2. A sokelektron-rendszerek sűrűségfüggvényes leírás módjára való alkalmazott „Lagrange-függvényes” közelítés részletes kritikái áttekintését adtuk, számos példával. A néhány legalsó sajátállapotot a Fermi-féle operátorkifejtési módszerrel határoztuk meg, és összehasonlítottuk az iteratív konjugált gradienses módszerrel és az alternatívaként kifejlesztett „szuperdobozos” módszerrel.
3. Olyan módszert dolgoztunk ki, amely a nanoelektronikai eszközön átfutó áramot mint „zárt” rendszert tekinti, abban az értelemben, hogy a szórási határfeltétel helyett egy-egy imaginárius potenciállal jellemzett forrás és nyelő szerepel benne. A vezetési feladat így egy kvantummechanikai sokelektronos feladat megoldására redukálódik, amelyre a sűrűségfüggvényes módszert használtuk Lagrange-bázissal. A módszert aranyatomok közé zárt ditiolbenzol molekulára és alumíniumelektródák közé fogott szén-nanocsőből készült térvezérléses tranzisztorra alkalmaztuk. Először sikerült a bázisdimenzió függvényében konvergens eredményeket kapni nanoelektronikai rendszerekre. Az eredmények kvalitatív egyezést mutatnak a kísérletekkel, de a kísérletileg és az elméletileg vizsgált nanoeszközök azonossága nincs bizonyítva.

További munkáiban munkatársunk, Varga Kálmán messze jutott a pályázatban kijelölt úton, de az utóbbi két évben már nem vette igénybe az OTKA-támogatást. Ez annak a ténynek a következménye, hogy professzori kinevezést kapott a Vanderbilt Egyetemen, és kutatásait teljes mértékben oda helyezte át.