



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Természettudományi Kar

Radioaktív bomlás és egy „furcsa” kvantummechanika

OTDK dolgozat

2025. 04. 22-25.

Témavezető

Dr. Kis Dániel Péter

egyetemi docens

Atomenergetika Tanszék

Témavezető

Szilvási Réka

PhD hallgató

Nukleáris Technikai Intézet

Hallgató

Andorfi István

Fizikus MSc 2. évfolyam

Kutatófizikus specializáció



Tartalomjegyzék

Jelölések jegyzéke	I
Ábrák jegyzéke	II
Táblázatok jegyzéke	III
Fizikai állandók jegyzéke	III
Kivonat	IV
1. Bevezetés	1
1.1. Elméleti alapok	1
1.2. A nem-hermitikus kvantummechanika	5
1.2.1. Komplex skálázás	7
1.2.2. A c-szorzat	13
2. Alternatív módszerek az alfa-fürt állapotának leírására	16
2.1. Átlagtér-modell	16
2.1.1. Hibabecslés	19
2.2. Számítások a Po-212-re	21
2.2.1. Numerikus módszerek	25
3. Izotón atommagok vizsgálata	29
3.1. A vizsgált atommagok tulajdonságai, a dolgozat célkitűzése	29
3.1.1. Számolások U-220 esetén	34
3.2. Spektrumok újraszámolása	34
4. Összefoglalás, kitekintés	37
Köszönetnyilvánítás	40

Jelölések jegyzéke

Jelölés	Feloldás
Z	Rendszám
A	Tömegszám
R	Magsugár
Q	Össztöltés
λ	Bomlásállandó
$T_{1/2}$	Felezési idő
Q_α	Bomlási energia
G	Gamow-faktor
E_{res}	Komplex energia-sajátérték
Γ	Bomlási szélesség
θ	Komplex skálázás szöge
$\hat{H}$	Teljes Hamilton-operátor
$\hat{H}_0$	Perturbálatlan Hamilton-operátor
$\hat{V}$	Potenciál-operátor
$ \Psi^\theta\rangle$	Komplex-skálázott állapot
$\hat{A}_\theta$	Komplex-skálázott operátor
$\langle \dots \dots \rangle$	Hermitikus skalárszorzat
$(\dots \dots)$	c-szorzat
N	Bázisfüggvények száma
E_b	Kötött állapot energiája
E_{qs}	Kvázi-stacionárius állapot energiája
E_s	Szórási állapot energiája
θ_{qs}	Elfordulás szöge a komplex energia-síkon
$\kappa_\theta^{\text{qs}}$	Elfordulási paraméter
a	Diffuzitás
b	Oscillátor-paraméter
V_0	Potenciálgödör mélységének fele
$f(r)$	Fermi-féle függvény
N_p	Integrálási felosztás számossága
s_0	Atommag-szerkezeti faktor
$\Gamma(x)$	Gamma-függvény (ld. A.1.)
$L_n^\alpha(x)$	Általánosított Laguerre-polinom (ld. A.2.)

A dolgozatban az operátorokat ábrázoló jeleket kalappal láttam el (pl. $\hat{H}$), a komplex értékek valós részét $\Re(a)$, képzetes részét pedig $\Im(a)$ jelöli, ahol $a \in \mathbb{C}$. Valamilyen absztrakt vektortér elemét, különösen az $\mathbb{R}^3$ vektorait kis, félkövé latin betűkkel jelölöm (pl. $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$), a mátrixokat pedig nagy, félkövé latin betűkkel (pl. $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{3 \times 3}$).

Valamilyen paraméter statisztikai vizsgálata során az átlagot felülvonással (pl. $\bar{x}$), a szórást pedig $\sigma(x)$ -ként jelölöm.

A felezési idők esetén a mértékegységek angol nevének rövidítését használtam, így pl. a d mértékegység napot, a by pedig milliárd évet jelent.

Ábrák jegyzéke

Sorszám	Tartalom
1.1. ábra	Kötési energiavölgy.
1.2. ábra	Az alfa-bomlás Gamow-féle modellje.
2.1. ábra	Gauss-potenciál komplex skálázott spektruma.
2.2. ábra	Bázisfüggvények számának hatása a Gauss-potenciál spektrumára.
2.3. ábra	Skálázási szög hatása a Gauss-potenciál spektrumára.
2.4. ábra	WOC- és WC-potenciálok.
2.5. ábra	Paraméterbecslés és spektrum $^{212}_{84}\text{Po}$ esetén.
2.6. ábra	Numerikus integrálás érzékenysége az integrálási paraméterekre.
3.1. ábra	A vizsgált izotónok tulajdonságai.
3.2. ábra	Illesztés a kapott képzetes részekre a 3 izotón csoportban.
3.3. ábra	Újraszámolt spektrumokra történő illesztés.
B.1. ábra	5 MeV-es szórási állapot energiája Gauss-potenciálban.
B.2. ábra	50 MeV-es szórási állapot energiája Gauss-potenciálban.
C.1. ábra	V_0 skálázása $^{212}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.2. ábra	a skálázása $^{212}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.3. ábra	b skálázása $^{212}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.4. ábra	V_0 skálázása $^{214}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.5. ábra	V_0 skálázása $^{216}_{88}\text{Ra}$ esetén.
C.6. ábra	V_0 skálázása $^{218}_{90}\text{Th}$ esetén.
C.7. ábra	V_0 skálázása $^{214}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.8. ábra	a skálázása $^{214}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.9. ábra	b skálázása $^{214}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.10. ábra	V_0 skálázása $^{216}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.11. ábra	V_0 skálázása $^{218}_{88}\text{Ra}$ esetén.
C.12. ábra	V_0 skálázása $^{220}_{90}\text{Th}$ esetén.
C.13. ábra	V_0 skálázása $^{222}_{92}\text{U}$ esetén.
C.14. ábra	V_0 skálázása $^{218}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.15. ábra	a skálázása $^{218}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.16. ábra	b skálázása $^{218}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.17. ábra	V_0 skálázása $^{220}_{88}\text{Ra}$ esetén.
C.18. ábra	V_0 skálázása $^{222}_{90}\text{Th}$ esetén.
C.19. ábra	V_0 skálázása $^{224}_{92}\text{U}$ esetén.
C.20. ábra	V_0 skálázása $^{220}_{92}\text{U}$ esetén.
D.1. ábra	Újraszámolt spektrumok az 1. izotón csoportban.
D.2. ábra	Újraszámolt spektrumok a 2. izotón csoportban.
D.3. ábra	Újraszámolt spektrumok a 3. izotón csoportban.

Táblázatok jegyzéke

Sorszám	Tartalom
1.1. táblázat	Néhány alfa-bomló izotóp.
2.1. táblázat	Paraméterek Gauss-potenciálra.
2.2. táblázat	Futási paraméterek $^{212}_{84}\text{Po}$ -re.
2.3. táblázat	Illesztési paraméterek $^{212}_{84}\text{Po}$ spektrumában.
3.1. táblázat	Skálázásból meghatározott V_0 paraméterek és képzetes energiák.
3.2. táblázat	Újraszámolás tulajdonságai.
C.1. táblázat	Izotónok tulajdonságai.
C.2. táblázat	Illesztési paraméterek $^{212}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.3. táblázat	Illesztési paraméterek $^{214}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.4. táblázat	Illesztési paraméterek $^{216}_{88}\text{Ra}$ esetén.
C.5. táblázat	Illesztési paraméterek $^{218}_{90}\text{Th}$ esetén.
C.6. táblázat	Illesztési paraméterek $^{214}_{84}\text{Po}$ esetén.
C.7. táblázat	Illesztési paraméterek $^{216}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.8. táblázat	Illesztési paraméterek $^{218}_{88}\text{Ra}$ esetén.
C.9. táblázat	Illesztési paraméterek $^{220}_{90}\text{Th}$ esetén.
C.10. táblázat	Illesztési paraméterek $^{222}_{92}\text{U}$ esetén.
C.11. táblázat	Illesztési paraméterek $^{218}_{86}\text{Rn}$ esetén.
C.12. táblázat	Illesztési paraméterek $^{220}_{88}\text{Ra}$ esetén.
C.13. táblázat	Illesztési paraméterek $^{222}_{90}\text{Th}$ esetén.
C.14. táblázat	Illesztési paraméterek $^{224}_{92}\text{U}$ esetén.
C.15. táblázat	Illesztési paraméterek $^{220}_{92}\text{U}$ esetén.

Fizikai állandók jegyzéke

Jelölés	Feloldás
$c = 2.998 \cdot 10^{23} \frac{\text{fm}}{\text{s}}$	Fénysebesség
$\hbar = 6.582 \cdot 10^{-22} \text{MeV} \cdot \text{s}$	Redukált Planck-állandó
$e = 1.607 \cdot 10^{-19} \text{C}$	Elemi töltés
$\alpha = 1/137$	Finomszerkezeti állandó
$r_0 = 1.3118 \text{ fm}$	Magsugár-állandó

Kivonat

A radioaktív bomlás az atommag-átalakulások spontán folyamata. Az anyamagból tipikusan valamilyen részecske távozik, és a mag egy másik atommaggá alakul a megmaradási tételeknek megfelelően. A bomlásokat a kibocsátott részecske karakterizálja. Alfa-bomlásról beszélünk, ha az anyamagból egy hélium atommag távozik. [1]

Már a kvantummechanika hajnalán kiderült, hogy az alfa-bomlás nem kezelhető a standard hermitikus kvantummechanika keretei között, hanem ennek nem-hermitikus kiterjesztését igényli. [2] Nem-hermitikus kvantummechanikáról beszélünk, ha a rendszerben bizonyos dinamikai mennyiségeket ábrázoló operátorok (pl. a Hamilton operátor) ilyen tulajdonságúak, következésképpen sajátértékeik komplex (azaz nem feltétlenül valós) számok. A bomlásnál a véges élettartamokat a komplex energia képzetes részéből származtatjuk. [3]

Ebben a dolgozatban egy speciális transzformációs eljárást, a komplex skálázást ismertetem, melynek segítségével kivitelezhető nem-hermitikus rendszereket (ahol a nem-hermitikuság adódhat a Schrödinger egyenlet megoldásának tisztán kimenő határfeltételre való illesztéséből) leíró operátorok (Hamilton-operátor) egy olyan „saját” koordináta rendszerükbe való transzformálása, ahol a nem-hermitikus tulajdonságok explicite láthatóvá válnak.

Vizsgálom e transzformáció matematikai tulajdonságait, valamint közelítő numerikus eljárások segítségével kiszámítom a komplex skálázott, nem-hermitikus operátor mátrix-elemeit, és sajátértékeit.

Egy egyszerűsített modellen szemléltetem a komplex skálázás legfontosabb matematikai tulajdonságait, majd egy, a magfizika szempontjából releváns potenciált vizsgálva a mérési eredményekhez történő paraméterillesztéssel ismertetek egy eljárást izotón atommagok felezési idejének becslésére.

A dolgozatban bemutatott módszer bizonyos kiegészítésekkel alkalmazható az atommag lézertérrel való kölcsönhatásának vizsgálatára, és az intenzív koherens elektromágneses tér felezési időt befolyásoló hatásának kimutatására. [4], [5]

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Az alfa-bomlásról általában

„All science is either physics or stamp collecting.”

Rutherford

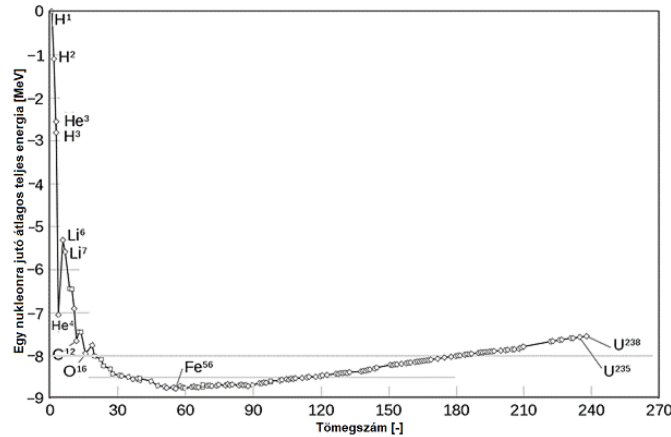
A radioaktív bomlás az atommagok átalakulásának spontán folyamata. A bomlásról általánosságban azt mondhatjuk el, hogy a kezdeti állapot (anyamag) kibocsát egy vagy több részecskét, mely után egy tipikusan gerjesztett köztes állapot jön létre, amely elektromágneses kisugárzással bomlik az alacsonyabb gerjesztettségű végállapotba (leánymag). A bomlás típusát a kibocsátott részecske karakterizálja.

Az atommagot az ún. *magerő* tartja össze, mely ellensúlyozni hivatott a pozitívan töltött protonok közti elektromos taszítást. A két kölcsönhatás eredőjéhez csatolódó energiát *kötési energiának* nevezzük. A kötési energia a proton-neutron kötésekben tárolt energia, a forrása pedig a tömeghiány. Ezek alapján a kötési energia a következő képlet szerint számolható:

$$B(Z,A) = (Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - M(Z,A)) c^2, \quad (1.1)$$

ahol Z a protonok száma (*rendszám*), A a protonok és neutronok együttes száma (*tömegszám*), $m_p = 938.27$ MeV a proton tömege, $m_n = 939.56$ MeV a neutron tömege, $M(Z,A)$ az atommag tömege, c pedig a fénysebesség. A kötési energia pozitív előjelű, ellentétje konvenció szerint az ún. *teljes energia*. A nullától kisebb teljes energia arról árulkodik, hogy az atommag kötött rendszer. Ha a kötési, illetve teljes energiát a tömegszámmal normáljuk, akkor kapjuk az ún. *egy nukleonra jutó kötési és teljes energiát*. Ha különböző rendszámok és tömegszámok esetén mért értékekből kiszámítjuk az egy nukleonra jutó teljes energiát, az ún. „energiavölgyet” kapjuk eredményül [6]. Az energiavölgy látható az 1.1. ábrán.

E. Rutherford 1899. és 1907. között véghezvitt kísérletei során elektromos és mágneses térben való viselkedésük alapján sikeresen azonosította a radioaktív sugárzás 3 fő fajtáját, illetve rájött, hogy a pozitívan töltött sugárzás kétszeresen pozitív hélium-ionokból áll ([8], [9]). Az általa bevezetett nevezéktanban a He^{2+} ionokat *alfa-részecskéknek*, a belőlük álló sugárzást *alfa-sugárzásnak*, a kapcsolódó magátalakulást pedig *alfa-bomlásnak* nevezzük. Tegyük fel, hogy egy Z rendszámú X elem A tömegszámú, alfa-bomló izotópját



1.1. ábra. Egy nukleonra jutó teljes energiák a tömegszám függvényében [7].

tekintjük! Ekkor a magátalakulás a következő egyenlet szerint megy végbe:



Az alfa-bomlás többnyire a nehezebb atommagokra jellemző, tipikus alfa-bomló izotópok láthatók az 1.1. táblázatban.

Izotóp	Felezési idő	α -energia
${}^{210}_{84}\text{Po}$	138 d	5.304 MeV
${}^{212}_{84}\text{Po}$	0.3 μs	8.784 MeV
${}^{222}_{86}\text{Pn}$	3.8 d	5.49 MeV
${}^{224}_{88}\text{Ra}$	3.66 d	5.673 MeV
${}^{226}_{88}\text{Ra}$	1600 y	4.773 MeV
${}^{232}_{90}\text{Th}$	14 by	4.000 MeV
${}^{235}_{92}\text{U}$	704 my	4.448 MeV
${}^{238}_{92}\text{U}$	4.468 by	4.187 MeV
${}^{239}_{94}\text{Pu}$	24110 y	5.151 MeV

1.1. táblázat. Néhány alfa-bomló izotóp felezési ideje és az alfa-részecske energiája [10].

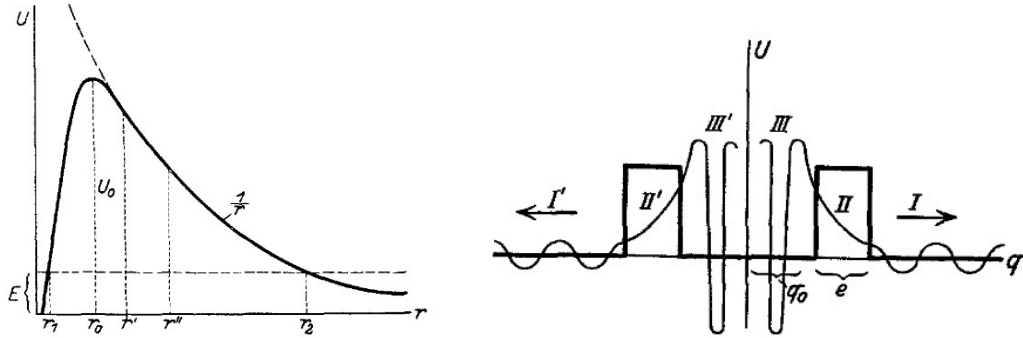
A táblázatban látható egyrészt, hogy az izotópok felezési ideje igen széles skálán mozog a néhány száz nanoszekundumtól egészen a több milliárd évig. Másrészt a tipikus alfa-energiák nagyjából 4 és 9 MeV között vannak. Vegyük pl. az ${}^{238}_{92}\text{U}$ -as izotópot! Tegyük fel, hogy az urán-atommag modellezhető egy homogén töltött gömbbel, melynek össztöltése Ze . A magsugár a mérések alapján az $R = r_0 \cdot A^{1/3}$ képlet alapján számolható, ahol r_0 izotóponként és bomlási csatornánként eltérő érték, nagyságrendileg az 1.3 – 1.5 fm-es intervallumba esik. Vegyük ebben az egyszerű modellben $r_0 = 1.5$ fm-t! A jól ismert képlet alapján a homogén töltött gömb elektrosztatikus potenciáltere a gömbön belül négyzetes, kívül pedig $1/r$ alakú. A gömb belsejében a magerő elnyomja a Coulomb-kölcsönhatást, de a töltött gömb határán már ez fog dominálni. Próbáljuk megbecsülni, hogy mekkora potenciális energiával csapdázódik az alfa-részecske, azaz, hogy mekkora a

Coulomb-potenciálját! A potenciális energia jól ismert képletébe helyettesítve:

$$E_C = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R} = 28.05 \text{ MeV}, \quad (1.3)$$

ahol ϵ_0 a vákuum permittivitása, a számlálóban lévő 2-es faktor pedig az alfa-részecske kétszeres pozitív töltésére utal. Nagyon fontos, hogy itt Z a **leánymag** rendszáma, azaz $Z = 90$, a sugarat pedig a leánymag tömegszámából számoljuk, azaz $A = 234$! Megvizsgálva a kapott eredményt látható, hogy ez lényegesen nagyobb, mint az alfa-energia ($\sim 4.2 \text{ MeV}$). Ez azt jelenti, hogy ebben az egyszerű klasszikus modellben az alfa-részecske nem tud akkora energiára szert tenni, hogy kilépjen a magból. **Az alfa-bomlás klasszikusan tiltott folyamat.**

Ezzel a problémával szembesült G. Gamow is, aki 1928-as forradalmi cikkében [2] megmutatta, hogy az épp akkoriban születő kvantummechanika szabályai mégis lehetővé teszik az alfa-részecske távozását a magból. Tekintsük át Gamow elméletét! Az általa feltételezett potenciálalak az 1.2. ábra bal oldalán látható.



1.2. ábra. A Gamow által feltételezett nukleáris potenciál (bal oldali ábra) és az alfa-részecske által érzett potenciál egyszerűsített modellje (jobb oldali ábra) [2].

Gamow is felismerte a fent ismertetett problémát, miszerint az ábrán U_0 -al jelölt potenciál sokkal nagyobb, mint az alfa-rész energiája. 1927-ben F. Hund német [11], majd 1928-ban L. Mandelstam és M. Leontovics [12] szovjet fizikusok felfedezték, hogy a Schrödinger-egyenlet megoldásai lehetővé teszik egy hullámcsomag számára, hogy klasszikusan nem megengedett átmeneteket is megvalósítson, ezt a jelenséget nevezzük kvantummechanikai *alagúteffektusnak*.

Vegyünk egy egyszerű modellt, mely az 1.2. ábra jobb oldalán látható! Az alfa-részecskét reprezentáló hullámcsomagot két téglalap alakú potenciállépcső közé zártuk be, melyek magassága legyen U_0 , szélességük l , az origótól vett távolságuk pedig q_0 ! A Schrödinger egyenlet megoldása pozitív q esetén

$$\Psi(q, t)^+ = Ae^{i(\frac{E}{\hbar}t - kq + \alpha)}, \quad (1.4)$$

míg negatív q -ra

$$\Psi(q, t)^- = Ae^{i(\frac{E}{\hbar}t + \chi'q - \alpha)}, \quad (1.5)$$

Könnyen belátható, hogy a két megoldás $q = 0$ -ban nem illeszthető. A probléma megoldására Gamow a komplex energia-sajátérték bevezetését javasolta:

$$E = E_0 + i\frac{\hbar\lambda}{2}, \quad (1.6)$$

ahol λ meghatározandó. Feltételezve, hogy $\hbar\lambda \ll E_0$ felhasználva a megmaradási tételket λ kiszámolható.

A probléma időfüggése az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásából a következőképpen alakul:

$$\Psi(t) \sim e^{\frac{i}{\hbar}Et} = e^{\frac{i}{\hbar}E_0t} e^{-\frac{\lambda}{2}t}. \quad (1.7)$$

Mivel a valószínűségi sűrűség a hullámfüggvény abszolút érték négyzete, így itt az állapot λ időállandóval exponenciálisan lecseng, azaz felismerhetjük a bomlástörvényben szereplő faktort, azaz λ maga a bomlásállandó, amely igen jól mérhető. λ mért és elméletileg számolt értékeinek összevetése jó viszonyítási alap az elmélet helyességének ellenőrzésére. A (1.7) időfüggéssel rendelkező állapotokat *kvázi-stacionárius* állapotoknak nevezzük. **A magba csapdázott alfa-részecske (alfa-fürt) kvázi-stacionárius kvantumállapotban van.** A potenciállépcsőnél bonyolultabb szerkezetű struktúra, pl. az 1.2. ábra bal oldalán látható feltételezett magpotenciál esetén a probléma megoldása némileg bonyolultabb: centrális erőteret feltételezve a Schrödinger-egyenlet megoldásaiban a radiális és szögfüggő tényezők szétcsatolódnak, és a megoldás gömbharmonikus-bázisban kifejtethető. Ekkor a λ -t leíró integrált közelítve a következő reláció adódik:

$$\ln \lambda = C + BE, \quad (1.8)$$

ahol C konstans, B egy minden radioaktív bomlási sorra közös együttható, melynek értéke a 10^7 -es nagyságrendbe esik, E pedig a bomlási energia. (1.8) az ún. Geiger-Nuttall szabály, melyet H. Geiger és J. M. Nuttall mondott ki 1911-ben tisztán kísérleti adatokra alapozva [13].

Bár ez az eredmény kielégítőnek hat, mégis adódik egy katasztrofális probléma. Tekintsük a (1.4) megoldást az aszimptotikus régióban (1.6) sajátenergiával! Itt az állapot szabad síkhullámként terjed, és a hullámszám a jól ismert diszperziós relációból számolható:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE_0}}{\hbar} \sqrt{1 + i\frac{\hbar\lambda}{2E_0}} \approx \frac{\sqrt{2mE_0}}{\hbar} + i\frac{\lambda}{4} \sqrt{\frac{2m}{E_0}}, \quad (1.9)$$

ahol az utolsó kifejezésben Taylor-sorba fejtettünk. Ezt visszaírva a megoldásba, a következő eredmény adódik:

$$\Psi(q) \sim e^{\frac{\lambda}{4} \sqrt{\frac{2m}{E_0}} q} \xrightarrow{q \rightarrow +\infty} +\infty, \quad (1.10)$$

azaz az állapot térben divergens. Ebből következően ez a függvény nem része a négyzetesen integrálható függvények terének, nem ír le fizikai állapotot.

A célunk tehát az, hogy megkísérljük egy nem-hermitikus Hamilton-operátor fizikailag releváns sajátfüggvény-rendszerét előállítani a megfelelő energia-sajátértékek meghatározása mellett. A nem-hermitikusság ebben az esetben a Schrödinger-egyenlet megoldásainak tisztán kimenő határfeltételre történő illesztéséből adódik.

Itt meg kell jegyezzük, hogy az állapot exponenciális lecsengése más úton is megsejthető. Ha tekintünk egy egyszerű U_0 magasságú potenciállépcsőt $q = -a$ és $q = 0$ között, és a hullámcsomagot síkhullámok bázisában kifejtjük, akkor a transzmissziós együttható a következő képlettel írható le:

$$T = \left(1 + \frac{U_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (E - U_0) a \right)}{4E(E - U_0)} \right)^{-1} \approx \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp \left(-2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (U_0 - E) a \right) \right) \sim e^{-2G}, \quad (1.11)$$

ahol a közelítés feltétele, hogy $G = \alpha a = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (U_0 - E) a \ll 1$, azaz a potenciálgát nagyon széles vagy nagyon magas, illetve az energia kicsi. A G -vel jelölt mennyiséget Gamow-faktornak nevezzük. Bonyolultabb struktúrájú potenciál esetén a Gamow-faktor a következő módon számolható:

$$G = \int_{q_1}^{q_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U(q) - E)} dq, \quad (1.12)$$

ahol az q_1 és q_2 ún. *turning pontok* azokat a koordinátákat jelölik, amelyek között a potenciál értéke nagyobb, mint a részecske energiája, azaz itt klasszikusan tiltott az átmenet.

A manapság alkalmazott jelölésrendszerben a komplex energiát a következő módon vezetjük be:

$$E = E_r - i\frac{\Gamma}{2}. \quad (1.13)$$

Az energia képzetes része és a Gamow-faktor közti kapcsolat szemi-klasszikus közelítésben a következő módon számolható [14]:

$$\Gamma = PF \frac{\hbar^2}{4m} e^{-2G}, \quad (1.14)$$

ahol P az alfa-részecske keletkezési valószínűsége, F pedig egy normálási faktor. Az ily módon bevezetett komplex energiával a bomlási állandóra $\lambda = \Gamma/\hbar$.

1.2. A nem-hermitikus kvantummechanika

„No great discovery was ever made without a bold guess.”

Newton

Az előző szakaszban láthattuk, hogy az alfa-bomlás vizsgálata milyen módon vezet el bennünket a nem-hermitikus kvantummechanika világába, így központi fontosságúnak tűnik, hogy áttekintsük ezt a területet. A nem-hermitikus kvantummechanika egyik fontos összegző monográfiája N. Moiseyev 2011-es műve [3].

Kvantummechanika kurzusokon általában a hermitikus kvantummechanikával ismerkedhetünk meg [15]. Mivel ebben a dolgozatban rendszeresen fogok rájuk hivatkozni, itt ismertetem a (hermitikus, nem-relativisztikus) kvantummechanika axiómáit:

A kvantummechanika axiómái:

1. Egy rendszer (tiszt) állapotát egy megfelelően választott Hilbert-tér vektorával ábrázoljuk.
2. A mérhető fizikai mennyiségeket az ezen Hilbert-téren ható **hermitikus** operátorokkal ábrázoljuk.
3. Egy $\hat{O}$ mennyiség mérési átlaga egy $|\psi\rangle$ állapotban a $\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$ skalárszorzattal definiálódik.
4. A dinamikát az időfüggő Schrödinger-egyenlet karakterizálja: $i\hbar\partial_t|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$, ahol $\hat{H}$ a Hamilton-operátor.
5. Ha $\hat{O}$ mérése annak k_n sajátértékét eredményezi, akkor a rendszer a megfelelő $|\psi_n\rangle$ sajátállapotba projektálódik.

1.2.1. Definíció (Hermitikus operátor). Legyen $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ korlátos lineáris operátor. Azt mondjuk, hogy $\hat{A}$ hermitikus, ha $\hat{A} = \hat{A}^+$, ahol $\hat{A}^+$ definíció szerint:

$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}^+\phi|\psi\rangle. \quad (1.15)$$

1.2.1. Állítás. Hermitikus operátor sajátértékei valósak.

A fenti állításból igen világos, hogy miért választunk hermitikus operátorokat. A fizikai mérések várható értékét egy állapotban a skalárszorzat definiálja, azaz a fizikai mennyiségek értéke csak akkor lehet valós (mérhető eredmény), amennyiben az őket reprezentáló operátorok sajátértékei valósak. A fontosabb kvantummechanikai írások alapvetésnek feltételezik a Hamilton-operátor hermitikusságát [16].

Vannak ugyanakkor bizonyos fizikai jelenségek, melyek a fent ismertetett formalizmus kiterjesztését igénylik. Ilyenek például az optikában a komplex törésmutatójú közegbeli hullámterjedés leírása, a kvantumtérelméletben a Hamilton-operátor $\mathcal{PT}$ tulajdonságainak vizsgálata, vagy az aszimptotikusan komplex potenciálmódellek esete.

A rezonáns jelenségek tárgyalása a szóráselméletben szintén egy olyan terület, ahol a nem-hermitikus formalizmus az adekvát matematikai struktúra, ugyanis a rezonancia-szórás is kvázi-kötött rendszerként működik [3]. Az alfa-bomlás fent ismertetett esete is ide tartozik. Láttuk, hogy a hullámfüggvények aszimptotikusan divergensnek lesznek a kifutó határfeltétel hatására. Ez a divergencia egy speciális transzformáció, a *komplex skálázás* (complex scaling - CS) segítségével kezelhető (ld. az 1.2.1. szakasz).

A szóráselméletben a rezonáns állapotokat az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásaival azonosítjuk tisztán kifutó határfeltételekkel. E módon kétféle ered-

mény adódhat: az első a *kötött állapotok* csoportja, a második pedig a *rezonáns állapotoké*, melyeket a fizikai Hamilton-operátor nem-hermitikus doménjével, azaz komplex sajátértékekkel és sajátfüggvényekkel azonosítunk. [3]

1.2.1. Komplex skálázás

Az ismertetett matematikai apparátus bővebben olvasható [3] 5. fejezetében.

A szóráselméletben a rezonáns sajátállapotokat az S-mátrix komplex pólusaival azonosítjuk. Ezek az állapotok az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet diszkrét sajátértékeinek felelnek meg. A kötött és bomló(!) rezonáns pólusokat a tisztán kimenő határfeltétel idézi elő, amikor is a hullámfüggvény térben aszimptotikusan divergens, azaz nem négyzetesen integrálható (ld. a korábbi példa az alfa-bomlásra). Ez igen komoly problémát jelent a belső szorzat definiálásában, ennél fogva a pl. a várható értékek számolásában. Nem beszélve arról, hogy a komplex sajátfüggvényeket koordináta-reprezentációban felírva már nem lesz igaz az, hogy az ugyanazon sajátértékhez tartozó állapotokban a bra- és ket-függvények egymás hermitikus konjugáltjai, ugyanis ezek nem ugyanahhoz a sajátértékhez tartoznak, hanem a sajátértékek is egymás komplex konjugáltjai.

Ahhoz, hogy az említett rezonáns sajátállapotok között normát és várható értéket tudjunk definiálni egy fizikai operátorhoz szükségesnek látszik a Hilbert-terünk általánosítása és a norma újradefiniálása. Általánosságban azt mondhatjuk, hogy keresünk egy olyan $\hat{S}$ transzformációt, amelyre teljesül, hogy amennyiben $\Psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow +\infty} +\infty$, akkor $\Psi_S(q) = \hat{S}\Psi(q) \xrightarrow{q \rightarrow +\infty} 0$. A Hamilton-operátor $\hat{H}_S$ transzformáltja a $\hat{H}_S\Psi_S = E\Psi_S$ Schrödinger-egyenletből meghatározott:

$$\hat{H}_S = \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}. \quad (1.16)$$

$\hat{S}$ megválasztására többféle lehetőség adódik, ezek egyike pl. a Zeldovics-transzformáció [17], illetve az általam alkalmazott komplex-skálázás [18], [19].

A komplex skálázás lényege, hogy a koordinátáinkat kiforgatjuk a komplex síkba egy megfelelően megválasztott komplex fázissal. Ekkor a koordináták transzformációja:

$$\mathbf{r} \rightarrow (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) e^{i\theta} + \mathbf{r}_0, \quad (1.17)$$

ahol $\mathbf{r}_0$ a skálázás centruma, $\theta \in \mathbb{C}$. A dolgozat további részében, ahol külön nem definiálok, θ minden esetben a komplex skálázás (CS) szögét jelenti. $\theta \in \mathbb{R}$ esetén a transzformáció ténylegesen egy komplex forgatás, $\theta \in \mathbb{C}$ esetén pedig a hosszskála is változik. A rezonáns sajátfüggvények divergenciája akkor szűnik meg, ha a forgatás szögére teljesül, hogy $\theta \geq \phi_{\text{res}}$, ahol ϕ_{res} a komplex rezonáns hullámszám fázisa, azaz

$$\theta \geq \phi_{\text{res}} = \arctan\left(\frac{\Gamma}{2(\varepsilon - E_t)}\right), \quad (1.18)$$

ahol a komplex energia definíció szerint $E = \varepsilon - i\Gamma/2$, E_t pedig az az energia, ahol az állapot már a skálázatlan Hamilton-operátor folytonos spektrumába esik.

Formális definíció

A komplex skálázás formális matematikai elméletét Aguilar, Balslev és Combes dolgozták ki 1971-ben [18], [19]. Ez a szakasz az ő cikkeiknek elnagyolt összefoglalását tartalmazza.

Vegyük az $\mathbb{R}^n$ -en négyzetesen integrálható függvények terét, és ebből egy elemet: $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, valamint legyen $\theta \in \mathbb{R}$! Ekkor az ún. *dilatáció-csoport* egy $\hat{U}(\theta)$ eleme a következőképpen hat Φ -n rendre a koordináta- és impulzustérben:

$$\left(\hat{U}(\theta)\Phi\right)(x) = e^{\frac{n\theta}{2}} \Phi(e^\theta x), \quad (1.19a)$$

$$\left(\hat{U}(\theta)\Phi\right)(p) = e^{-\frac{n\theta}{2}} \Phi(e^{-\theta}p). \quad (1.19b)$$

1.2.2. Állítás. Vegyük a $\hat{H}_0 = -\Delta$ lineáris operátort! Ennek $\hat{R}_0(z) = (\hat{H}_0 - z)^{-1}$, $\Im(z) \neq 0$ rezolvense a dilatáció-csoport alatt a következőképpen transzformálódik:

$$\hat{U}(\theta)\hat{R}_0(z)\hat{U}(\theta)^{-1} = e^{2\theta}\hat{R}_0(e^{2\theta}z). \quad (1.20)$$

1.2.2.1. Bizonyítás. Vizsgáljuk meg a következő kifejezést:

$$\begin{aligned} \hat{U}(\theta)\hat{R}_0^{-1}\hat{U}(\theta)^{-1}\Phi(x) &= \hat{U}(\theta)(-\Delta - z)e^{-\frac{n\theta}{2}}\Phi(e^{-\theta}x) = \\ &= \hat{U}(\theta)e^{-\frac{n\theta}{2}}(-e^{-2\theta}\Delta\Phi(e^{-\theta}x) - z\Phi(e^{-\theta}x)) = e^{-2\theta}(-\Delta\Phi(x) - ze^{2\theta}\Phi(x)) = \\ &= e^{-2\theta}\hat{R}_0^{-1}(e^{2\theta})\Phi(x)! \end{aligned} \quad (1.21)$$

Az első és utolsó tag egyenlőségének minden $\Phi(x)$ esetén igaznak kell lenni, szóval a $\Phi(x)$ -en ható operátoroknak is, tehát az inverzüknek is:

$$\begin{aligned} \left[\hat{U}(\theta)\hat{R}_0^{-1}\hat{U}(\theta)^{-1}\right] &= \left[e^{-2\theta}\hat{R}_0^{-1}(e^{2\theta})\right] \\ \left[\hat{U}(\theta)\hat{R}_0^{-1}\hat{U}(\theta)^{-1}\right]^{-1} &= \left[e^{-2\theta}\hat{R}_0^{-1}(e^{2\theta})\right]^{-1} \\ \hat{U}(\theta)\hat{R}_0(z)\hat{U}(\theta)^{-1} &= e^{2\theta}\hat{R}_0(e^{2\theta}z). \end{aligned} \quad (1.22)$$

Megjegyzés:

1. Itt felhasználtuk, hogy a rezolvens inverze létezik (triviálisan), és $\hat{U}(\theta)$ csoport-tulajdonságát.
2. Innen $\hat{H}_0$ transzformációja meghatározott:

$$\hat{H}_0(\theta) = \hat{U}(\theta)\hat{H}_0\hat{U}^{-1}(\theta) = e^{-2\theta}\hat{H}_0. \quad (1.23)$$

□

1.2.2. Definíció ($\hat{H}_0$ -kompakt operátor). Azt mondjuk, hogy egy operátor $\hat{H}_0$ -kompakt, amennyiben egy kompakt operátor $\mathfrak{D}(\hat{H}_0)$ -ból $L^2(\mathbb{R}^n)$ -be.

Legyen $\hat{V}$ egy $\hat{H}_0$ -kompakt operátor, ekkor

$$\hat{V}(\theta) = \hat{U}(\theta)\hat{V}\hat{U}(\theta)^{-1} \quad (\theta \in \mathbb{R}) \quad (1.24)$$

is egy $\hat{H}_0$ -kompakt operátor.

1.2.3. Definíció (Dilatáció-analitikus perturbáció). Legyen $\hat{V}$ egy $\hat{H}_0$ -kompakt operátor! Azt mondjuk, hogy $\hat{V}$ egy *dilatáció-analitikus perturbáció*, ha

- $\hat{V}(\theta), \theta \in \mathbb{R}$ -hez létezik egy $\hat{H}_0$ -kompakt analitikus kiterjesztés a komplex sík egy $\mathcal{O}$ összefüggő nyílt tartományára.
- Ha $\hat{V}(\theta)$ szimmetrikus, akkor $\mathcal{O}$ is megválasztható $\mathbb{R}$ -re szimmetrikusan, ugyanis

$$\hat{V}^*(\bar{\theta}) = \hat{V}(\theta) \quad \theta \in \mathcal{O}. \quad (1.25)$$

Ha $\hat{V}$ egy szimmetrikus, dilatáció-analitikus perturbáció, akkor $\hat{V}(\theta)$ $\mathcal{O}$ analitikussági tartománya kiterjeszthető egy komplex sávra:

$$S_a = \{z \in \mathbb{C} \mid -a < \Im(z) < +a\}, \quad a > 0. \quad (1.26)$$

Legyen $\mathfrak{D}$ analitikus vektorok egy sűrű halmaza, valamint $\mathcal{O}$ egy nyílt összefüggő tartomány, melynek metszete $\mathbb{R}$ -rel nem üres, ekkor $\mathfrak{D}(\mathcal{O}) = \{\phi(\theta) = \hat{U}(\theta)\phi; \theta \in \mathbb{R}\}$. Ekkor a következő lemma teljesül:

1.2.1. Lemma. Legyen $\hat{V}$ szimmetrikus és dilatáció-analitikus egy S_a komplex sávon! Legyen $\hat{R}(z) = (\hat{H}_0 + \hat{V} - z)^{-1}$, ahol $\Im(z) \neq 0$, ekkor $\forall \Phi \in \mathfrak{D}$ a $(\Phi; \hat{R}(z)\Phi)$ komplex függvénynek létezik egy meromorf kiterjesztése a pozitív valós tengelyen keresztül egészen az $\arg(z) = -2a$ félegyenesekig.

Innen definiálható a következő:

$$\Sigma^+ = \left\{ \left[\hat{\mathbb{I}} + e^{2\theta}\hat{V}(\theta)\hat{R}_0(e^{2\theta}z) \right]^{-1} \text{ valós pólusai}; \theta \in \mathcal{O}^+; z \in \mathbb{C}_{\theta}^{++} \right\}, \quad (1.27)$$

ahol $\mathcal{O}^+$ jelöli $\hat{V}(\theta)$ $\mathcal{O}$ analitikussági tartományának azon részhalmazát, melyben a pozitív képzetes részű elemek vannak, és $\mathbb{C}_{\theta}^{++} = \{z \in \mathbb{C} \mid e^{2\theta}z \in \mathbb{C}^{++}\}$, ahol $\mathbb{C}^{++} = \{z \in \mathbb{C} \mid \Re(z) > 0; \Im(z) > 0\}$. Ekkor:

1.2.2. Lemma. Σ^+ nem más, mint $\hat{H}$ pozitív pontspektruma, és $\hat{H}$ pontspektruma korlátos.

Igazolható, hogy $L^2(\mathbb{R}^n)$ a következő direkt összeg alakjába írható:

$$L^2(\mathbb{R}^n) = \mathcal{M}_a(\hat{H}) \oplus \mathcal{M}_{cs}(\hat{H}) \oplus \mathcal{M}_d(\hat{H}), \quad (1.28)$$

ahol $\mathcal{M}_a(\hat{H})$ (rendre $\mathcal{M}_{cs}(\hat{H})$ és $\mathcal{M}_d(\hat{H})$) jelöli azon Φ vektorok zárt altereit, ahol $(\Phi; P(E)\Phi)$ mértékek abszolút folytonosak (rendre szingulárisan folytonosak, diszkrét) a Lebesgue-mértékhez képest. Ekkor:

1.2.1. Tétel. Legyen $\hat{V}$ szimmetrikus, dilatáció-analitikus operátor. Ekkor

$$L^2(\mathbb{R}^n) = \mathcal{M}_a(\hat{H}) \oplus \mathcal{M}_d(\hat{H}). \quad (1.29)$$

$\hat{H}$ pontspektruma $\mathbb{R} - \{0\}$ -ban korlátos, és csak izolált sajátértékeket tartalmaz, úgy, hogy a 0 az egyetlen lehetséges torlódási pont. A $\hat{H}$ -hoz tartozó megkötés egyedül annyi, hogy $\mathcal{M}_a(\hat{H})$ spektruma $[0; \infty)$.

1.2.2. Tétel. $\hat{H}$ nem-nulla sajátértékhez tartozó sajátalterei véges dimenziósak, és a kötött állapoti hullámfüggvények $\mathfrak{D}(\mathcal{O})$ -ban vannak.

Vizsgáljuk n db részecske egy M rendszerét, ahol a dinamikát a $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ Hamilton-operátor vezérli, ahol

$$\hat{V} = \sum_{\substack{\alpha=(i;j) \\ i \neq j}} \hat{V}_\alpha$$

2-test kölcsönhatások kombinációja! Szokás szerint célszerű M tömegközéppontját le választani, így a Hilbert-terünk $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^{3n-1})$ lesz. Vegyük a $D = \{C_1, C_2, \dots, C_n\}$ csoportfelosztást (klaszterizálást), ahol $C_i \cap C_j = \Phi$, ha $i \neq j$, és $\bigcup_i C_i = M$! Belátható, hogy ekkor megadható a következő tenzor-felbontás:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{C_1} \otimes \mathcal{H}^{C_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{C_k} \otimes \mathcal{H}^{C_1, C_2, \dots, C_k}, \quad (1.30)$$

ahol $\mathcal{H}^{C_i}$ a C_i -ben lévő részecskék állapottere, az utolsó tag pedig a tömegközépponti klaszterek állapottere. Ekkor a mozgási (kinetikus) energia operátora:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^k \hat{H}_0^{C_i} + \hat{H}_0^{(C_1, C_2, \dots, C_k)}. \quad (1.31)$$

Feltételezzük, hogy a párkölcsönhatások szimmetrikus, kompakt operátorok, azaz

$$\hat{V}_\alpha : \mathfrak{D}(\Delta) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3) \quad (1.32)$$

kompakt, azaz $\hat{H}_0 - \epsilon$ -korlátos.

Legyen $\hat{U}(\theta)$, $\theta \in \mathbb{R}$ a dilatáció-csoport egy folytonos, unitér ábrázolása $\mathcal{H}$ -n, ekkor

$$(\hat{U}(\theta)f)(\mathbf{r}) = e^{\frac{3(n-1)\theta}{2}} f(e^\theta \mathbf{r}). \quad (1.33)$$

Ekkor, ahogyan korábban is láttuk

$$\mathbb{R} \rightarrow \hat{V}_\alpha(\theta) = \hat{U}(\theta) \hat{V}_\alpha \hat{U}(\theta)^{-1}, \quad \theta \in \mathbb{R} \quad (1.34)$$

egy kompakt operátor-értékű függvény $\mathbb{R}$ -en. Tegyük fel, hogy ennek létezik egy analitikus kiterjesztése az $\mathcal{O}$ komplex tartományon, és ekkor $\hat{V}_\alpha(\theta)$ kompakt $\forall \theta \in \mathcal{O}$ esetén, emellett $\beta = \Im(\theta) = \text{konst.}$ esetén az operátorok unitér-ekvivalensek. Így $\hat{V}_\alpha(\theta)$ definiálható mint egy komplex operátor-értékű függvény az $\mathcal{O} = \mathcal{O}_a = \{z \mid \Im(z) < a\}$ komplex sávon, ahol $a \leq \pi/4$. Ekkor a Hamilton-operátor transzformáltja:

$$\hat{H}(\theta) = \hat{U}(\theta) \hat{H} \hat{U}(\theta)^{-1} = e^{-2\theta} \hat{H}_0 + \hat{V}(\theta), \quad \theta \in \mathcal{O}_a. \quad (1.35)$$

1.2.4. Definíció. Vizsgáljuk a $\hat{H}(\theta)$, $\theta \in \mathcal{O}_a \setminus \mathbb{R} = \{z | 0 < |\Im(z)| < a\}$ operátorok spektrumát! A $\hat{H}(\theta = \alpha + i\beta)$ operátor $\sigma(\hat{H}(\theta))$ spektruma csupán $-a < \beta < a$ -tól függ, és definiálhatók a következő mennyiségek:

$$\begin{aligned}\sigma_\beta &= \sigma(\hat{H}(\theta)) \\ \varrho_\beta &= \varrho(\hat{H}(\theta)) \\ \sigma_{i\beta} &= \text{izolált pontok } \sigma_\beta\text{-ban} \\ \sigma_{e\beta} &= \sigma \setminus \sigma_{i\beta} \\ \sigma_p &= \hat{H}(\theta) \text{ sajátértékei} \\ \sigma_{d\beta} &= \hat{H}(\theta) \text{ izolált sajátértékei véges multiplicitással,}\end{aligned}$$

ahol $\beta = 0$ -ra elhagyjuk az indexelést, azaz $\sigma_0 = \sigma$. Legyen $\hat{R}(\theta, z) = (\hat{H}(\theta) - z)^{-1}$, ahol $z \in \varrho_\beta$!

Legyen $S \subset \mathbb{C}$, és $S^r = S \cap \mathbb{R}$, továbbá S torlódási pontjait jelölje S' ! Legyen $\sigma^C(\theta) = \sigma(\hat{H}^C(\theta))$ a C alrendszer komplex-skálázott Hamilton-operátorának spektruma! Legyen

$$\Sigma_\beta = \{0\} \cup \bigcup_{C_1 \cup \dots \cup C_p \subseteq M} (\sigma_{d\beta}^{C_1} + \dots + \sigma_{d\beta}^{C_p}), \quad (1.36)$$

illetve

$$\lambda_{0\beta} = \inf_{\lambda \in \sigma_{i\beta}^r} \lambda; \quad \lambda_{e\beta} = \inf_{\lambda \in \Sigma_\beta^r} \lambda! \quad (1.37)$$

Válasszuk $\lambda \in \mathbb{R}$ -t, és az $S_\beta(\lambda)$ legyen $\mathbb{C}$ azon tartománya, melyet a $\{\lambda + \mathbb{R}^+\}$ és $\{\lambda + e^{-2i\beta}\mathbb{R}^+\}$ félegyenese határolnak! Ekkor a következő lemma teljesül:

1.2.3. Lemma. σ_β teljesíti a következő tulajdonságokat:

1. $\sigma_{e\beta}\Sigma_\beta + e^{-2i\beta}\mathbb{R}^+$.
2. $\sigma_\beta \setminus \sigma_\beta^r \subset S_\beta(\lambda_{e\beta})$.
3. $\sigma_{d\beta} = \sigma_{i\beta}$.
 $\sigma_{e\beta}^r = \Sigma_\beta^r$, és $\sigma_{d\beta}^r$ konstansok $0 < |\beta| < a$ esetén, σ_β^r korlátos, és $\sigma_{d\beta}^{r'} \subset \Sigma_\beta^r$.
4. $|\varphi| > 2|\beta|$ -hez létezik $C(\varphi) > 0$, hogy $0 \geq \varrho < \infty$ -re

$$\left\| (\hat{H}(\theta) - \lambda_{0\beta} + 1 - \varrho e^{i\varphi})^{-1} \right\| \leq C(\varphi) \varrho^{-1}. \quad (1.38)$$

A fenti lemma azt fejezi ki, hogy $\hat{H}(\theta)$ spektruma párhuzamos félegyenesekből áll az $e^{-2i\beta}$ irányba Σ_β pontjaiból indulva, és izolált véges dimenziós sajátértékek egy halmazából, mely két részre osztható: valós sajátértékek egy korlátos halmazára, melyek Σ_β^r pontjai körül torlódnak, és nem-valós, véges dimenziós sajátértékekre S_β -ban.

1.2.4. Lemma. $\hat{H}$ sajátértékei, melyek nincsenek $\Sigma \cap \sigma_p$ -ben pontosan $\hat{H}(\theta)$ valós izolált sajátértékei Σ -n kívül, azaz $0 < |\beta| < a$, innen

$$\sigma_p \setminus \Sigma = \sigma_{d\beta}^r \setminus \Sigma, \quad 0 < |\beta| < a. \quad (1.39)$$

1.2.3. Tétel. $\hat{H}$ operátor σ_p pontspektruma korlátos, és torlódási pontjainak σ'_p halmaza a rendszert jellemző küszöbértékek Σ halmazának része.

A $\lambda \notin \Sigma$ sajátértékhez tartozó sajátaltér véges dimenziós, és a kötött állapoti hullám-függvények $\mathfrak{D}(\mathcal{O})$ -beliek.

1.2.4. Tétel. $\mathcal{H} = \mathcal{M}_a(\hat{H}) \oplus \mathcal{M}_d(\hat{H})$. Ekkor $\hat{H}_a = \hat{H}|_{\mathcal{M}_a}$ spektruma $[\lambda_e, \infty)$, ahol $\lambda_e = \min_{\lambda \in \Sigma} \lambda$.

Megjegyezzük, hogy a fenti tételek rendre 1.2.2 és 1.2.1 sokrészecske-megfelelői.

Az ABC tétel

Most, hogy egészen formálisan ismertettem a komplex skálázott Hamilton-operátor spektrumának tulajdonságait rátérhetünk ennek fizikai relevanciáira. A fenti állítások összessége összefoglalható egy tétel formájában, melynek interpretációja a soron következő alkalmazások szempontjából lényegesen egyszerűbb. Ez a szakirodalomban legtöbb esetben Aguilar-Balslev-Combes-, vagy rövidítve ABC-tétel megnevezéssel szerepel (az ismertetett alakban kimondva pl. [20]-ban):

1.2.5. Tétel (ABC-tétel). A komplex skálázás úgy hat $L^2(\mathbb{R}^3)$ -en mint egy dilatáció-csoport elem $i\theta$ paraméterrel $\theta \in \mathbb{R}$ -esetén:

$$f_\theta(r, \vartheta, \varphi) = \hat{U}(\theta) f(r, \vartheta, \varphi) = e^{\frac{3}{2}i\theta} f(re^{i\theta}, \vartheta, \varphi), \quad (1.40)$$

és a Hamilton-operátor

$$\hat{H}_\theta(r) = \hat{U}(\theta) \hat{H}(r) \hat{U}^{-1}(\theta) = e^{-2i\theta} \hat{T}(r) + \hat{V}(re^{i\theta}) \quad (1.41)$$

alakban transzformálódik, ahol $\hat{T}$ a kinetikus, $\hat{V}$ pedig a potenciális energia operátora. Ekkor a következő állítások teljesülnek:

1. $\hat{H}$ kötött sajátállapotai $\hat{H}_\theta$ -nak is sajátállapotai lesznek θ tényleges értékétől függetlenül $0 < \theta < \pi/2$ esetén.
2. $\hat{H}$ folytonos spektrumát 2θ szöggel forgatjuk a komplex energia-síkon.
3. A Hamilton-operátor egy komplex E_{res} általánosított sajátértéke $\hat{H}_\theta$ tényleges spektrumához tartozik, amennyiben $2\theta > |\arg E_{\text{res}}|$.

A fenti tétel szemléletesen azt mondja el a számunkra, hogy ha veszünk egy Hamilton-operátort, ami esetünkben a magmodellből származó Hamilton-operátor lesz, és komplex skálázzuk valamilyen alkalmasan választott θ szöggel, akkor a spektrum a következőképpen fog kinézni, a komplex energia-síkon:

- A kötött állapotok energiái (azaz ahol $\Re(E) < 0$) nem skálázódnak, azaz a valós tengelyen fognak elhelyezkedni.
- A folytonos spektrumba tartozó ún. szórási állapotokra teljesülni fog, hogy $\Im(E)/\Re(E) = \tan(-2\theta)$, azaz egy -2θ irányszögű egyenesen fognak elhelyezkedni (erre a következőkben gyakran fogok úgy utalni, hogy „ -2θ meredekségű egyenes”).

- Bizonyos energiáknál, ahol az energia-sajátérték képzetes és valós részének hányadosa abszolút értékben kisebb, mint 2θ , viszont az energia valós része pozitív, megtaláljuk a skálázatlan operátor egy komplex sajátértékét. Ezek lesznek a kvázistacionárius állapothoz tartozó energiák.

Ugyanakkor továbbra is él a probléma, hogy nincs olyan jól definiált skalárszorzatunk, melynek segítségével egyáltalán az állapotok normálásáról beszélhetnénk. A következőkben ezt a problémát kell feloldanunk. Erre lesz megoldás a bi-ortogonális szorzat, vagy c-szorzat.

1.2.2. A c-szorzat

Erről a matematikai konstrukcióról bővebben olvashatunk [3] 6. fejezetében, és [21]-ben.

A nem-hermitikus kvantummechanikában (a továbbiakban csak NHKM rövidítéssel) előfordulhat, hogy a Hamilton-operátor sajátfüggvény-rendszere nem alkot teljes rendszert, ugyanis léteznek ún. önortogonális állapotok.

Amennyiben szeretnénk levezetni a NHKM számára egy megfelelő skalárszorzatot, két kritérium teljesülését minimálisan elvárhatjuk:

1. Az operátor nem-degenerált sajátfüggvényei legyenek ortogonálisak.
2. Zártsági reláció, azaz az $|n\rangle$ sajátfüggvény-rendszerre

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{\mathbb{I}}. \quad (1.42)$$

Az ezeket a tulajdonságokat teljesítő megfelelő művelet az ún. c-szorzat, melyet a hermitikus skalárszorzat $\langle \dots | \dots \rangle$ jelölésével analóg módon $(\dots | \dots)$ -ként jelölünk.

Legyen $\hat{O}_\theta$ (komplex-skálázott) nem-hermitikus operátor. Ennek sajátérték-egyenlete:

$$\hat{O}_\theta |\Psi_n^\theta\rangle = \lambda_n^\theta |\Psi_n^\theta\rangle, \quad (1.43)$$

ahol elvárjuk, hogy a sajátfüggvények a c-szorzatban ortonormáltak legyenek. A c-szorzat alap gondolata, hogy az 1.43 absztrakt sajátérték-egyenlet megfeleltethető a mátrixokon értelmezett sajátérték-egyenletnek. Jelölje $\hat{O}_\theta$ absztrakt lineáris operátor mátrixelemét egy $\{f_j\}_{j=1,2,\dots}$ ortonormált bázison kifejtve

$$[\mathbf{O}_\theta]_{j',j} = \langle f_{j'} | \hat{O}_\theta | f_j \rangle! \quad (1.44)$$

Jelölje a fent definiált (nem feltétlenül hermitikus) mátrix jobboldali sajátvektorait $\mathbf{c}_n^\theta$, a baloldali sajátvektorokat pedig $\mathbf{d}_m^\theta$! Lévén hogy ezek sajátvektorok, teljesülnek a

$$\mathbf{O}_\theta \mathbf{c}_n^\theta = \lambda_n^\theta \mathbf{c}_n^\theta \quad (1.45)$$

$$\left[[\mathbf{d}_m^\theta]^T \mathbf{O}_\theta \right]^T = \mathbf{O}_\theta^T \mathbf{d}_m^\theta = \lambda_m^\theta \mathbf{d}_m^\theta \quad (1.46)$$

összefüggések. Ezek teljesítik az ortogonalitási relációt: $[\mathbf{d}_m^\theta]^T \mathbf{c}_n^\theta = 0$, amennyiben $m \neq n$. A fenti összefüggésekben felhasználtuk, hogy az $\mathbf{O}_\theta$ baloldali sajátvektorai megfeleltethetők a transzponált mátrix jobboldali sajátvektorainak. Innen egy tetszőleges c-bra, illetve c-ket állapot felírható (helyreprezentációban):

$$(x|\Psi_n^\theta) = \sum_j c_{j,n} f_j(x) \quad (1.47)$$

$$(\Psi_m^\theta|x) = \sum_j c_{j,m} f_j^*(x). \quad (1.48)$$

A mátrix és a transzponáltja ugyanazt a spektrumot adják, így az $\mathbf{O}_\theta$ mátrix $\mathbf{c}_n^\theta$ oszlop-sajátvektora, és a transzponált mátrix $\mathbf{c}_n^\theta$ oszlop-sajátvektora **ugyanahhoz** a λ_n^θ sajátértékhez tartozik! Innen, amennyiben a korábban is említett önortogonalitástól eltekintünk (ez számunkra most nem lesz releváns), a c-szorzat definiálható:

1.2.5. Definíció (A c-szorzat). Legyenek a mennyiségeink úgy definiálva, ahogyan fent! Ekkor a c-szorzat:

$$(\Psi_m^\theta|\Psi_n^\theta) = \sum_j d_{j,m} c_{j,n} = \delta_{m,n}. \quad (1.49)$$

Lássunk is néhány számunkra releváns állítást a c-szorzattal kapcsolatban!

1.2.3. Állítás. Tegyük fel, hogy $\hat{O}_{\theta=0}$ skálázatlan operátor hermitikus, és a választott bázisfüggvény-rendszerünk $\{f_j(x)\}_{j=1,2,\dots}$ valós, akkor a skálázatlan operátor $\mathbf{O}_{\theta=0}$ mátrixa egy valós, szimmetrikus mátrix, a skálázott operátor $\mathbf{O}_\theta$ mátrixa pedig egy komplex szimmetrikus mátrix lesz. Ekkor a bal- és jobboldali sajátvektorok megegyeznek, azaz $\mathbf{d}_j = \mathbf{c}_j$, és az oszlop-sajátvektorokból álló $\mathbf{C}$ mátrixra pedig $\mathbf{C}^T \mathbf{C} = \mathbb{I}$.

1.2.4. Állítás. Legyen $\hat{O}_{\theta=0}$ hermitikus operátor! Ekkor $\hat{O}_\theta$ nemdegenerált sajátfüggvényei a c-szorzatban ortonormáltak:

$$(\Psi_m^\theta|\Psi_n^\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^\theta(x) \Psi_n^\theta(x) dx = \delta_{m,n}. \quad (1.50)$$

1.2.5. Állítás. Legyen $\hat{O}_{\theta=0}$ hermitikus operátor! Ekkor $\hat{O}_\theta$ nemdegenerált sajátfüggvényeire:

$$\sum_n |\Psi_n^\theta\rangle \langle \Psi_n^\theta| = \mathbb{I}. \quad (1.51)$$

1.2.6. Tétel. Egy Hamilton-operátor nemdegenerált rezonáns sajátállapotait ábrázoló sajátvektorok a c-szorzatban mindig ortogonálisak.

1.2.6.1. Bizonyítás. Legyen Ψ_n és Ψ_m egy $\hat{H}$ Hamilton-operátor két rezonáns sajátfüggvénye E_n és E_m sajátértékkel. Léven, hogy ezek rezonánsak, térben exponenciálisan divergensek, ugyanakkor egy $\mathbf{r} \rightarrow F[\mathbf{r}]$ transzformációval (pl. komplex skálázással) regularizálhatók. Innen

$$(\Psi_m|\hat{H}|\Psi_n) = \int \Psi_m \hat{H} \Psi_n dF[\mathbf{r}] = E_n \int \Psi_m \Psi_n dF[\mathbf{r}] = E_n (\Psi_m|\Psi_n). \quad (1.52)$$

Ugyanígy $(\Psi_n|\hat{H}|\Psi_m) = E_m (\Psi_n|\Psi_m)$. Ismerve, hogy $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ kijelenthető, hogy $(\Psi_n|\hat{H}|\Psi_m) = (\Psi_m|\hat{H}|\Psi_n)$. Ebből a potenciállal való „c-kommutálás” nyilvánvaló, lévén

a potenciál multiplikatív operátor (helyreprezentációban). A kinetikus operátorral való c -kommutálás parciális integrálással bizonyítható. Innen

$$(E_n - E_m) (\Psi_m | \Psi_n) = 0, \quad (1.53)$$

azaz a különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok a c -szorzatban ortogonálisak.

□

Megjegyzés: A c -szorzatnak létezik egy hullámcsomagokra érvényes változata, ahol a hullámcsomag az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásaként adódik. Ez az F -szorzatnak nevezett művelet alkalmas időfüggő sajátértékek kiszámítására nem-hermitikus formalizmusban. Erről bővebben olvashatunk [3] 6.4-6.6 fejezetében.

2. fejezet

Alternatív módszerek az alfa-fürt állapotának leírására

2.1. Átlagtér-modell

„If we knew what it was we were doing, it would not be called research, would it?”

Einstein

Annak érdekében, hogy a későbbiekben a magfizikai szempontból releváns problémák megoldásában fel tudjuk használni a fent levezetett formalizmust és matematikai eszköztárat, elsőként célszerű meghatározni azt az analitikus és numerikus keretrendszert, melyben dolgozni fogunk. A célunk, hogy meghatározzuk egy adott potenciál esetén a komplex-skálázott Hamilton-operátor spektrumát, és ennek elemzésével (felhasználva a matematikai törvényszerűségeket) releváns következtetéseket vonhassunk le az esetlegesen megjelenő kvázi-stacionárius állapot élettartamára és energiájára vonatkozóan. A dolgozat hátralévő részében egy komplex spektrumszámítási módszert ([3] 7.2. fejezet, illetve [4]) fogunk alkalmazni a spektrumok kiszámítására.

Vegyünk egy $|\Phi^\theta(r)\rangle$ (egyelőre csak a sugártól függő) hullámfüggvényt, mely a Schrödinger-egyenlet megoldásként adódik! Legyen $u_j(r)$ egy négyzetesen integrálható bázisfüggvényrendszer! A keresett hullámfüggvény kifejezhető a

$$\Phi^\theta(r) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j^\theta u_j(r) \quad (2.1)$$

alakban, ahol c_j^θ -k valamilyen komplex kifejtési együtthatók. Feltételezve, hogy a bázisfüggvényrendszer elég jól választottuk meg, az egzakt megoldást a bázis első néhány tagja is megfelelő pontossággal fogja közelíteni a numerikus számolásban, azaz

$$\Phi^\theta(r) \approx \sum_{j=1}^N c_j^\theta u_j(r). \quad (2.2)$$

Így a Hamilton-operátor mátrixa közelítőleg számolható a szokásos

$$[\mathbf{H}^\theta]_{i,j} = \langle u_i | \hat{H}^\theta | u_j \rangle \quad (2.3)$$

összefüggéssel. Ezek után amennyiben nem normált bázist választottunk az

$$[\mathbf{N}]_{i,j} = \langle u_i | u_j \rangle \quad (2.4)$$

normamátrix inverzével beszorozva a Hamilton-mátrix közelítése előáll. Ennek diagonalizálásával meghatározhatók az energia-sajátértékek, és a komplex skálázás tulajdonságait ismerve a kvázi-stacionárius állapot energiája (és ennek képzetes része, azaz élettartama is).

A következőkben egy egyszerű példán szemléltetem a komplex skálázás hatásait, és az alkalmazott numerikus módszer tulajdonságait és korlátait. Ezt a problémát korábban [20]-ban és [4]-ben vizsgálták.

Vegyünk egy gömbkoordinátákon szögfüggetlen potenciált! Ekkor a kinetikus tag Laplace-operátora és a hullámfüggvény is szeparálható radiális és szögfüggő részre, melyek közül a szögfüggő rész egységet ad, azaz ezzel nem kell foglalkoznunk. A potenciál legyen Gauss-függvény alakú, azaz a Hamilton-operátor a komplex skálázás után (ld. (1.41)):

$$\begin{aligned} \hat{H}^\theta(r) &= e^{-2i\theta} \hat{T}(r) + \hat{V}_{kG}(e^{i\theta}r) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-2i\theta} \left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \right) + \left[-A_k e^{-C_k e^{2i\theta} r^2} + B_k e^{-D_k e^{2i\theta} r^2} \right], \end{aligned} \quad (2.5)$$

ahol $k = \{1, 2\}$ a két vizsgált esetet indexeli, az A_k, B_k, C_k, D_k konstansok értékeit pedig a 2.1. táblázat tartalmazza. A numerikus számításhoz használjuk a következő bázisrend-

k	1	2
A_k	8	15
B_k	4	12
C_k	0.16	0.3
D_k	0.02	0.1
b	0.9	0.51

2.1. táblázat. Az alkalmazott potenciál-paraméterek a két vizsgált esetre.

szert (ez technikailag a harmonikus oszcillátor sajátfüggvény-rendszere, így a következőkben *harmonikus bázis* néven fogok rá hivatkozni):

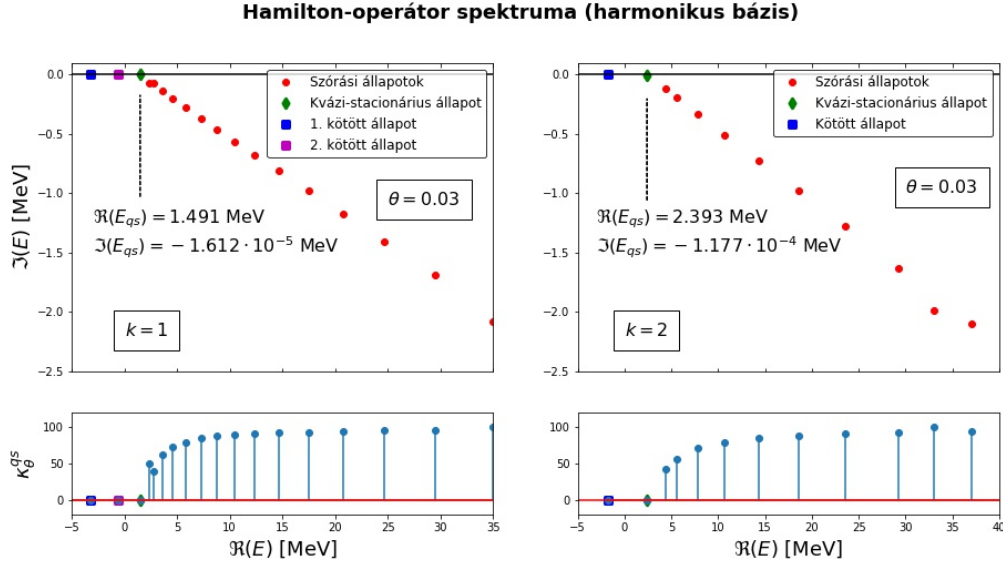
$$\Phi^\theta(r) = \sum_{j=0}^N c_j^\theta \frac{1}{r} e^{-\frac{r^2}{2b^2}} L_j^{1/2} \left(\frac{r^2}{b^2} \right) \frac{1}{b^{3/2}} \left[\frac{2\Gamma(j+1)}{\Gamma(j+3/2)} \right]^{1/2}, \quad (2.6)$$

ahol a b együtthatót *oszcillátor paraméter*nek nevezzük, és értéke a két esetre szintén a 2.1. táblázatban látható. Itt $L_j^{1/2}$ az $\alpha = 1/2$ paraméterű j -edik általánosított Laguerre-polinom (ld. A.2.), $\Gamma(x)$ pedig a Gamma-függvény (ld. A.1.).

A számolást egy Python programnyelven megírt kód segítségével végeztem. A numerikus adatok tárolására a *NumPy* könyvtárat [22], a mátrixok diagonalizálásához a *SciPy* könyvtárat [23], az adatpontok ábrázolásához pedig a *Matplotlib* könyvtárat [24] használtam. Az integrálok kiértékelését a programkód szimbolikusan végezte a *SymPy* könyvtár

függvényeinek segítségével [25]. Az adatok mentését a *Pandas* könyvtár függvényei végezték [26].

A komplex skálázás szögének $\theta = 0.03$ -at választottam, és a közelítést $N = 20$ bázisfüggvényre végeztem el. A kapott spektrumok a 2.1. ábrán láthatók.



2.1. ábra. A (2.5) komplex skálázott Hamilton-operátor spektruma (2.6) harmonikus oszcillátor bázison $\theta = 0.03$ értéknél a 2.1. táblázat paramétereit szerint $k = 1$ -gyel a bal oldali, és $k = 2$ -vel a jobb oldali ábrán. A számolás $N = 20$ bázisfüggvényre futott a $k = 1$ esetben $b = 0.9$ -cel, $k = 2$ esetben pedig $b = 0.51$ -gyel.

*Szórasi állapot*nak nevezünk egy állapotot, melynek valós sajátenergiája pozitív, és a komplex skálázás alatt (közelítőleg) -2θ szöggel fordul el a komplex energia-síkon. *Kötött állapot*nak nevezünk egy állapotot, ha valós sajátenergiája negatív (és nem skálázódik). *Kvázi-stacionárius* az állapot, ha valós sajátenergiája pozitív, de a komplex skálázás alatt kisebb mértékben fordul el, mint a szórasi állapotok. Itt meg kell jegyeznünk, hogyha egzaktul megoldanánk a Schrödinger-egyenletet, akkor a kvázi-stacionárius állapotok sajátenergiája robosztus lenne a skálázási paraméter megválasztásával szemben. A spektrumban azonosított állapotok típusának megvizsgálásához kiszámítottam a

$$\kappa_\theta^{qs} = -\frac{\theta_{qs}}{2\theta} \cdot 100 \quad (2.7)$$

ún. *elfordulási paramétert*, ahol $\theta_{qs} = \arctan(\Im(E)/\Re(E))$ a komplex energia-síkon történő elfordulás szöge, ahol E a kiszámolt sajátenergia. κ_θ^{qs} végső soron a -2θ meredekségű egyenesre való illeszkedést méri százalékosan. Ennek kiszámolt értékei az ábra alsó sorában láthatók. Vegyük sorra a spektrumok releváns részeit!

1. A $k = 1$ esetben:

- Két kötött állapotot találtunk $E_{1,1}^b = -2.637$ MeV (kék négyzet) és $E_{1,2}^b = -0.564$ MeV (magenta négyzet) sajátenergiákkal.

- A spektrum tartalmaz egy kvázi-stacionárius állapotot $E_1^{\text{qs}} = 1.491 - i \cdot 1.612 \cdot 10^{-5}$ MeV energiával (zöld rombusz).

2. A $k = 2$ esetben:

- Csupán egy kötött állapot adódik $E_2^{\text{b}} = -1.787$ MeV (kék négyzet) energiával.
- Találtunk egy kvázi-stacionárius állapotot $E_2^{\text{qs}} = 2.393 - i \cdot 1.177 \cdot 10^{-4}$ MeV (zöld rombusz) energiával.

Meg kell jegyezzük, hogy nagy energiákon ($\Re(E) > 10$ MeV) igen jó illeszkedést kapunk a -2θ egyenesre, ugyanakkor azon szórási állapotokra, melyek valós energiája közel van a kvázi-stacionárius állapot valós energiájához eltérést kapunk. Emellett a $k = 1$ esetben egy oszcillációt tapasztalunk $E_1^{\text{osc}} = 2.322 - i \cdot 6.907 \cdot 10^{-2}$ MeV és $E_2^{\text{osc}} = 2.788 - i \cdot 6.580 \cdot 10^{-2}$ MeV energiákon. Ennek az eltérésnek számos oka lehet, ezek közül az egyik, hogy nem alkalmaztunk megfelelő számú bázisfüggvényt, így a közelítésünk nem volt elég jó.

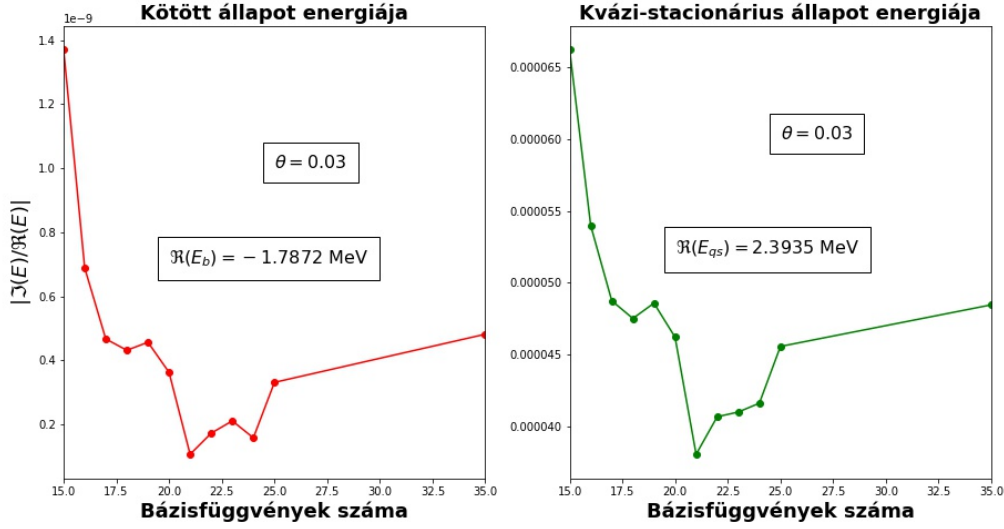
Tapasztalatunk szerint az elfordulási tényező b csökkentésével nagy energiákon jól közelíti a -2θ egyenest, b növelése esetén pedig a kisenergiás spektrum pontosabb, azaz b segítségével hangolható, hogy a sajátfüggvény-rendszer mely sajátértékhez tartozó állapotot tudja jól közelíteni. Éppen ezért a következőkben tipikusan nagyobb b értékekre ($\sim 1.3 - 1.4$) fogunk történni a számolások (lévén, hogy bennünket a kvázi-stacionárius állapotok érdekelnek).

2.1.1. Hibabecslés

Annak érdekében, hogy megvizsgáljam a kapott spektrumban a sajátértékek függését a különböző futtatási paraméterektől több futtatást végeztem egy adott paraméter skálázása mellett, és releváns értékek összehasonlításából következtettem a különböző artefaktumok megjelenésére.

Vizsgáljuk meg először az alkalmazott bázisfüggvények számának hatását a kapott spektrumra! Ehhez a vizsgálathoz vettem a 2.1. táblázat szerint a $k = 2$ paramétercsomagot, és 15 és 25 között változtattam a bázisfüggvények számát (N -t), illetve végeztem egy futtatást 35-re is. A sajátértékek kiszámítása után ábrázoltam a megjelenő kötött és kvázi-stacionárius állapot energiája képzetes és valós részének hányadosát az alkalmazott bázisszám függvényében. Ez látható a 2.2. ábrán.

Az ABC-tétel értelmében azt várjuk, hogy a kötött állapotok nem skálázódnak a komplex skálázás alatt, azaz a kötött állapot képzetes részének vizsgálata direkt hibabecslésre ad lehetőséget. Látható, hogy 15 bázisfüggvény esetén a hiba relative nagy (még itt is csak 10^{-9} -es nagyságrendű, ne feledjük, hogy a bal oldali ábrán az y tengely 10^{-9} -es skálázású!), viszont a bázisfüggvények számának növelésével 10^{-10} környékére csökken. Ami érdekesebb, hogy tovább növelve a bázisszámot a képzetes-valós arány nőni kezd, 35 bázisfüggvényre kb. a duplája, mint 20-ra. Ez persze nem jelenti azt, hogy a 35-ös bázison számolt mátrix diagonalizálása kevésbé jól közelítené a spektrumot, csupán azt, hogy a kötött sajátenergiát közelíti pontatlanabban. Ezenkívül számba kell vennünk azt is, hogy a bázisfüggvények indexének növelésével (azaz a Laguerre-polinom sorszámanak növelésével) a numerikus hibák is nőni kezdenek. Érdekes, hogy hasonló viselkedést látnak a kvázi-stacionárius állapot esetén is.



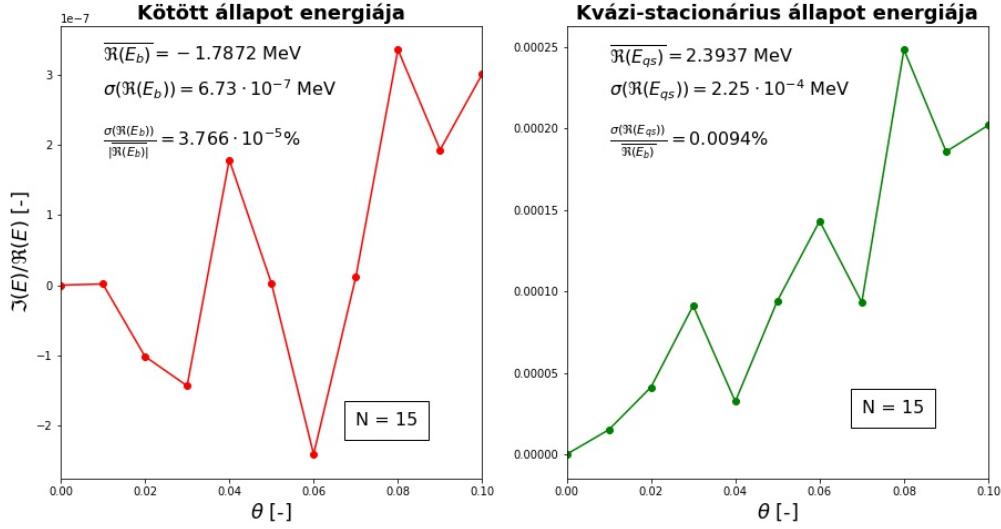
2.2. ábra. A (2.5) komplex skálázott Hamilton-operátor (2.6) harmonikus oszcillátor bázison $\theta = 0.03$, a 2.1. táblázat paramétereit szerint $k = 2$ -vel számolt kötött (bal oldali ábra) és kvázi-stacionárius (jobb oldali ábra) állapotához tartozó sajátenergia képzetes és valós részének hányadosa az alkalmazott bázisfüggvények számának függvényében.

Ezt követően vizsgáljuk meg a θ skálázási szög hatását! Ehhez $N = 15$ bázisfüggvény esetén a $k = 2$ paraméterekre végeztem számolásokat a θ szög változtatásával 0 és 0.1 között, majd a korábbiakhoz hasonló módon kiszámítottam a kötött és kvázi-stacionárius állapotokra a sajátenergia képzetes és valós részének hányadosát. Az eredmények a 2.3. ábrán láthatók.

Nézzük a kötött állapotot! A kapott adatokra kiszámítottam az energia-sajátérték valós részének átlagát, és szórását. Ez a kötött állapotra $\overline{\Re(E_b)} = -1.7872$ MeV és $\sigma(\Re(E_b)) = 6.73 \cdot 10^{-7}$ MeV lett. A kettő aránya $3.766 \cdot 10^{-5}\%$, azaz a kötött állapot energiájának valós részét nagy pontossággal megtaláltuk. A várakozásunk az, hogy a kötött állapot ne skálázzódjon, ennek ellenére mégis megjelenik egy képzetes rész. A valós és képzetes részek aránya a 10^{-7} -es tartományba esik, azaz ez az érték egy jó támpont a közelítésünk helyességére.

A kvázi-stacionárius állapot esetén $\overline{\Re(E_{qs})} = 2.3937$ MeV és $\sigma(\Re(E_{qs})) = 2.25 \cdot 10^{-4}$ MeV-nek adódott, a kettő aránya 0.0094% . Ez azt jelenti, hogy a kvázi-stacionárius állapot esetén a pontosság kisebb, de még így is ezredszázaléknyi az eltérés a különböző szögekre számolt valós energia-sajátértékek között. Ebben az esetben is találunk eltérést a különböző θ értékekre számolt képzetes sajátértékek között. Ennek oka, hogy a 15 bázisfüggvény még igen kevés, és θ növelésével a közelítés jósága csökken.

További számolások találhatók ezzel a potenciálmodellel kapcsolatban B. mellékletben.



2.3. ábra. A (2.5) komplex skálázott Hamilton-operátor (2.6) harmonikus oszcillátor bázison $N = 15$ bázisfüggvény mellett, a 2.1. táblázat paramétereit szerint $k = 2$ -vel számolt kötött (bal oldali ábra) és kvázi-stacionárius (jobb oldali ábra) állapotához tartozó sajátenergia képzetes és valós részének hányadosa a θ skálázási szög függvényében.

2.2. Számítások a Po-212-re

„I am among those who think that science has great beauty.”

M. Curie

Az előző szakaszban bemutatam az alkalmazott numerikus (szimbolikus) módszereket egy modell-potenciál (Gauss) példáján. Ahhoz, hogy a módszereinket tényleges magfizikai számításokra tudjuk használni, találnunk kell egy potenciálalakot, melyet bizonyos közelítésben *magpotenciál*ként tudunk kezelni.

Sajnos a magpotenciál egzakt alakját nem ismerjük (azaz nem tudjuk az atommag Lagrange-függvényét), így csupán különféle modelleket tudunk felállítani.

R. Hofstadter úttörő elektronszórási kísérletei [27] nyomán az atommag sűrűségét, és az ebből fakadó potenciált leíró függvényt R. Woods és D. Saxon állították fel [28]. A mérések alapján a nukleonok által a magerőből érzett potenciál (átlagtér közelítésben):

$$V(r) = -\frac{V_m}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (2.8)$$

az ún. Woods-Saxon potenciál, mely igazából egy speciális Fermi-Dirac függvény, lévén a nukleonok feles spinű fermionok. Itt V_m a potenciálgödör mélysége, mely tipikusan 50 MeV körül van. A számolások során ennek egy alternatív, de a numerikus módszerek szempontjából jobban alkalmazható alakját fogom használni:

$$V_{WS}(r) = -V_m \frac{1 + \cosh(R/a)}{\cosh(r/a) + \cosh(R/a)} = -V_m f(r), \quad (2.9)$$

ahol $f(r)$ -t a dolgozatban *Fermi-féle függvénynek* fogom nevezni, a az atommag „felületvastagsága”, melyet *diffúzitásnak* nevezzük, tipikus értéke $a \sim 0.6 \text{ fm}$, R pedig a *magsugár*, mely direkt módon kapcsolódik a mag tömegszámához: $R = r_0 A^{1/3}$, ahol r_0 egy megfelelően megválasztott paraméter, többnyire $r_0 \sim 1.2 - 1.5 \text{ fm}$ (ennek értéke izotópfüggő).

A magpotenciál egy másik széles körben alkalmazott modellje a *független részecske héjmodell*. A héjmodell alapvető célja, hogy a potenciált olyan alakban szeretnénk keresni, hogy a Schrödinger-egyenlet (az alaprendszeren legalábbis) analitikusan megoldható legyen, és visszaadja (szintén mérésekből ismert) teljes betöltöttségeket, az ún. *mágikus számokat*. Megfigyelték, hogy azon atommagok lényegesen stabilabbak, ahol a proton vagy neutronszám a 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 értékek valamelyike [29]. Az első héjmodell D. Ivanenko szovjet fizikus vezette be 1932-ben, de a ma is alkalmazott modell J. Jensen [30] és M. Goeppert-Mayer [31] nevéhez fűződik. A modell alapja egy harmonikus oszcillátor-potenciál, melyet a Woods-Saxon tag, és egy spin-pálya tag perturbál, utóbbi előállítja a héjszerkezetet, előbbi pedig az energiaszintek pontos értékeit. Az általános héjmodell-Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + C\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} + D\hat{L}^2, \quad (2.10)$$

ahol $\hat{\mathbf{L}}$ a pályaimpulzus, $\hat{\mathbf{S}}$ a spin, C és D megfelelően megválasztott paraméterek. Az $M\omega_0^2/2$ paraméterezés helyett gyakran alkalmazzuk a V_m/R^2 alakot a korábbi jelölésekkel. Mivel az oszcillátor potenciált is a magpotenciál karakterizálására használjuk, így ez is csak a maganyagon belül érvényes, azaz célszerű szorozni a Fermi-függvénnyel.

A fent említetteken kívül az atommagon belül érvényesül egy Coulomb-potenciál, lévén az atommag pozitívan töltött, össztöltése $Q = Ze$. Tekintsünk az alfa-bomlás egy olyan klaszter-héjmodelljét, melyben az alfa-részecske és a már kialakult mag kéttest-problémáját szemléljük!

Az alkalmazott közelítésben az atommagot gömbszimmetrikusnak tekintjük, a töltéssűrűségét pedig homogénnek. A gömbön kívül a potenciál azonos a ponttöltésével, azaz (1.3) alapján számolható. Innen az alfa-részecske által érzett potenciál a magon kívül:

$$V_C^k(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{2Z\alpha\hbar c}{r} = \frac{c_0}{r}, \quad (2.11)$$

ahol Z a **leánymag** rendszáma, és a fizikai konstansok szorzatára bevezettük a $c_0 = Z \cdot 2.88 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$ jelölést. Mivel a magon belül a magerő jóval nagyobb, mint a Coulomb-kölcsönhatásból származó erő, így élhetünk azzal a közelítéssel, hogy a magon belül csak a magerő érvényesül a héjmodellnél ismertetett tagokkal, a Coulomb-tag pedig csak a magon kívül érvényesül. Azaz beszorozhatjuk egy $(1 - f(r))$ taggal, mely biztosítja számunkra, hogy a magon belül csupán a magerőt vegyük figyelembe. Így elkerülhetjük, hogy két különböző függvénnyel kelljen leírunk a potenciált, mivel ez okozhat problémákat a komplex skálázásban.

Itt lehetőségünk adódik a probléma további egyszerűsítésére. A héjmodell szerint páros-páros magokra a maradék mag magspinje nullának tekinthető, továbbá az alfa-klaszter

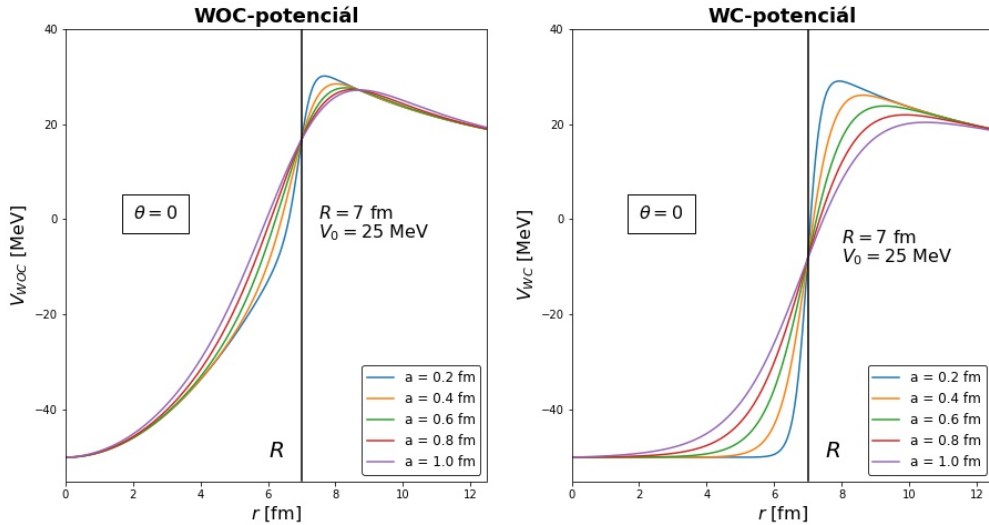
spinje nulla, így a redukált kép értelmében a centrifugális potenciálban megjelenő impulzusmomentum a két test l eredő impulzusmomentuma. Dolgozzunk gömbhullám-közelítésben, azaz legyen $l = 0$, így a centrifugális és spin-pálya tagokat elhagyhatjuk. A végső potenciálképlet felírása előtt vezessünk be további konstansokat! Legyen $L = \sqrt{K_0 R}/\sqrt{2}$ hossz dimenziójú paraméter, ahol

$$K_0 = \frac{c_0}{V_0 L} + 2, \quad (2.12)$$

ahol bevezettük a $V_0 = V_m/2$ mennyiséget. Innen már felírható a vizsgált potenciál:

$$V_{\text{WOC}}(r) = \underbrace{-2V_0 f(r)}_{\text{W: Woods-Saxon}} + V_0 \underbrace{\frac{K_0}{L^2} r^2 f(r)}_{\text{O: oszcillátor}} + \underbrace{(1 - f(r)) \frac{c_0}{r}}_{\text{C: Coulomb}}. \quad (2.13)$$

Erre a potenciálalakra a továbbiakban úgy fogok hivatkozni, mint *WOC-potenciál*. Amennyiben egy számolásban nem használom az összes tagot, úgy a potenciál alsó indexében jelzem (pl. a $V_{\text{WC}}(r)$ a Woods-Saxon- és Coulomb-tagok összege). A WOC és WC potenciálok láthatók a 2.4. ábrán.



2.4. ábra. WOC- (bal oldali ábra) és WC- (jobb oldali ábra) potenciálok $V_0 = 25$ MeV és $R = 7$ fm esetén, a különböző értékei mellett ($a = \{0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1 \text{ fm}\}$), $r \in [0; 12.5 \text{ fm}]$ értékeire.

Mindent összevetve a komplex-skálázott Hamilton-operátor ezzel a potenciállal a következő alakot ölti:

$$\hat{H}_0^\theta = -\frac{\hbar^2}{2M} e^{-2i\theta} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + V_0 \left(\frac{K_0}{L^2} e^{2i\theta} r^2 - 2 \right) f(re^{i\theta}) + (1 - f(re^{i\theta})) \frac{c_0}{e^{i\theta} r}, \quad (2.14)$$

ahol M a redukált tömeg. Most már, hogy megvan a megfelelő modellünk, végezzünk számításokat egy konkrét izotóp esetére! Legyen ez a $^{212}_{84}\text{Po}$! Ez az izotóp alfa-bomlással $^{208}_{82}\text{Pb}$ -cá bomlik, a bomlás energiája $Q_\alpha = 8.954$ MeV (ez jó közelítéssel a kiszabadult

alfa-rész kinetikus energiája, a nagy tömegkülönbség miatt a leánymag visszalökődése elhagyható. A kvantummechanikai modellünkben ezt fogjuk *alfa-energiának* nevezni.), felezési ideje pedig $T_{1/2} = 0.3 \mu\text{s}$ [10]. Innen kiszámolható a polónium atommagjában található alfa-klaszter kvázi-stacionárius állapota képzetes energiájának kétszerese a

$$\Gamma^{\text{kís}} = \frac{\hbar \log 2}{T_{1/2}} \quad (2.15)$$

képletből, amely alapján $\Gamma^{\text{kís}} = 1.52 \cdot 10^{-15} \text{ MeV}$. Itt a felső index azt jelöli, hogy ez Γ kísérletekben mért értéke. Természetesen azt nem várhatjuk a modellünktől, hogy visszaadja ezt az értéket, azért sem, mert ebben benne foglaltatik az alfa-klaszter magbéli fűrtösödésének (klaszterizációjának) valószínűsége is, melyre jelen modell nem terjed ki. Annyit viszont el tudunk mondani, hogy $\Gamma^{\text{kís}} = s_0 \cdot \Gamma$, ahol Γ az átlagtér modellből számolt elbomló klaszterállapot szélessége, s_0 pedig valamilyen (izotópfüggő) konstans, melyet *atommag-szerkezeti faktornak* nevezünk. Ennek jelentőségét később ismertetem.

Itt ugyanakkor felmerül egy plusz probléma, nevezetesen a futásidő kérdése. Az olyan paramétereket, mint pl. a magsugár, táblázatokban megtaláljuk, illetve léteznek rá fél-empirikus szabályok, mint pl. a fent ismertetett. Ugyanakkor V_0 paraméterre csak durva becsléseink vannak, így ezt nekünk kell a modell alapján önkonzisztens módon megtalálni. Ebben segítséget nyújt nekünk, hogy az izotóptáblázatból ismerjük a bomlás energiáját. Ezt a modellünkben úgy kezeljük, mint a bomló rendszer egyik kvázi-stacionárius állapotának valós sajátenergiája. Így egy futtatássorozattal, megfelelő paraméterek megválasztása mellett addig változtatjuk V_0 -t, amíg a spektrumban elő nem áll a várt sajátérték. A számítások során a 2.2. táblázatban látható paramétereket alkalmaztam.

Jelölés	Érték	Mértékegység
Z	82	-
A	208	-
θ	0.03	-
R	7.7727	fm
b	1.35	fm
L	9.6473	fm
a	0.67	fm
N	30	-
N_p	$3 \cdot 10^7$	-
r	0-45	fm
V_0	22.462	MeV

2.2. táblázat. A $^{212}_{84}\text{Po}$ spektrumának számolásához alkalmazott paraméterek listája.

A számolásokhoz L -t meg kell határozni. Ez a fent ismertetett definíciókból lehetséges. Ha behelyettesítünk K_0 és L definíciójába, és L -re rendezzük, akkor azt kapjuk, hogy L előáll, mint a

$$L^3 - R^2 L - \frac{R^2 c_0}{2V_0} = 0 \quad (2.16)$$

egyenlet megoldása. Ez egy ún. Tartaglia-alakú harmadfokú egyenlet, azaz felírható az $y^3 + py + q = 0$ alakban (egyébként állítás szerint minden harmadfokú egyenlet erre az alakra rendezhető), és ennek megoldása a

$$y = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} \quad (2.17)$$

képlettel számolható, amit Cardano-képletnek nevezünk. L értékét a sugár és a potenciálgödör mélysége ($2V_0$) adja meg.

Ugyanakkor ahhoz, hogy a konkrét izotópra végezzünk számolást, meg kell határoznunk V_0 -t. Ehhez különböző V_0 paraméterek esetén kiszámoltam a spektrumot, melyben megkerestem a kvázi-stacionárius állapotokhoz tartozó energiákat. Ekkor azonban a futásidő igen nagyra adódott, ugyanis a szimbolikus számolás mind Matlabban, mind Pythonban igen időigényes, és nem ad lehetőséget nagyszámú skálázás elvégzésre. Ennek feloldására áttértem az integrálok numerikus kiértékelésére.

2.2.1. Numerikus módszerek

Az itt bemutatott eljárásokat pl. [32] is tartalmazza. A Hamilton-operátorban minden esetben van egy második derivált képzés a kinetikus tagban, így meg kell adnunk egy módszert, mellyel a második derivált numerikusan számolható. Tegyük fel, hogy az f függvényt mintavételezzük valamilyen x_i alappontokon! Legyen f x_0 -ban felvett értéke f_0 , x_{-1} -beli értéke f_{-1} , és x_1 -beli értéke f_1 ! Legyenek $x_1 - x_0 = x_0 - x_{-1} = h$ egyenlő távolságra levő pontok! Ekkor f második deriváltja x_0 -ban közelítőleg

$$\frac{d^2 f}{dx^2}_{x=x_0} \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}. \quad (2.18)$$

A numerikus integrálok kiértékelésére több lehetőség is adódik. Ezek közül a dolgozatban kettőt ismertetek. Ezek a *trapézformula* és a *Simpson-formula*.

1. A **trapézformula** esetén az egyváltozós függvény alatti területet egy trapézzal közelítjük. Legyen a függvény értéke x_k -ban f_k , és x_{k+1} -ben f_{k+1} . Ekkor az általuk kifeszített trapéz térfogata

$$dA_k = \frac{f_{k+1} + f_k}{2} \cdot (x_{k+1} - x_k). \quad (2.19)$$

Tegyük fel, hogy a függvényt egyenlő távolságra levő $\{x_k\}_{k=0,\dots,n}$ pontokon értékeljük ki, azaz $x_{k+1} - x_k = h$, és $f(x_k) = f_k$. Ekkor f integrálja x_0 és x_n között:

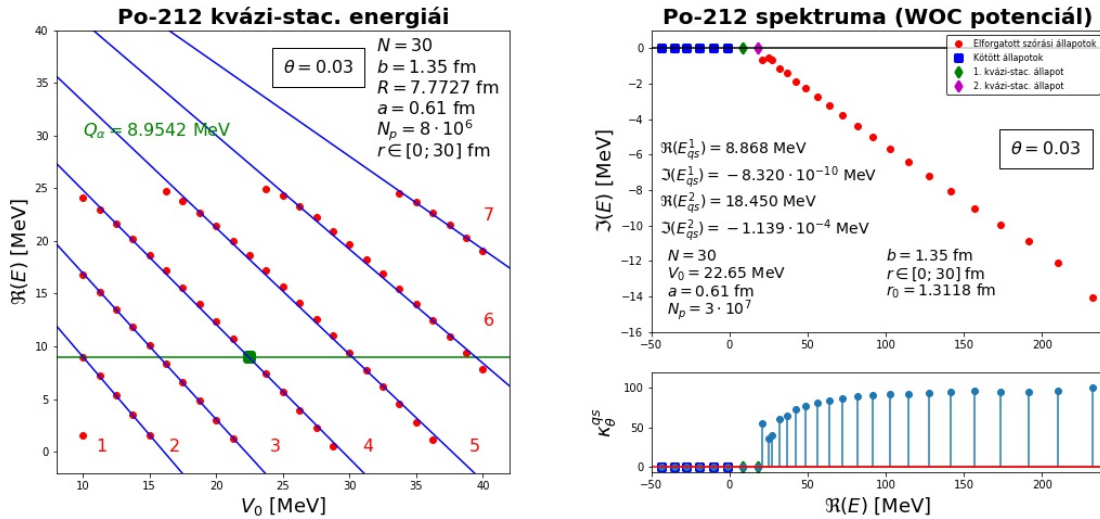
$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx A = h \left(\frac{f_0}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f_k + \frac{f_n}{2} \right). \quad (2.20)$$

2. A trapézformula igazából egy elsőrendű közelítés, némely esetekben nagyobb pontosság érhető el másodrendben. Ez az ún. **Simpson-formula**, melynek értelmében az integrál közelítése (az általános Newton-Cotes szabályt követve):

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx A = \frac{h}{6} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + f_n). \quad (2.21)$$

További közelítést igényel az, hogy a sugárban 0 és végtelen között kell integrálnunk, ez természetesen numerikusan nem lehetséges, így választanunk kell egy végértéket, ameddig az integrálás tart. Ez nagyban befolyásolja a közelítésünk hibáját. Szerencsére az alkalmazott (2.6) bázisfüggvényeink egy Gauss-taggal levágnak, így pl. $b = 1.35$ -nél $r = 30$ fm-re már 10^{-50} körüli függvényértékek adódnak.

Most, hogy megvan a megfelelő numerikus módszerünk, eljutottunk oda, hogy meghatározzuk a $^{212}_{84}\text{Po}$ esetére V_0 paramétert. Ehhez ennek értékét 10 MeV és 40 MeV között skáláztam 1.25 MeV-enként a 2.2. táblázat adatai szerint (kivéve V_0 -t), majd kiválasztottam a kvázi-stacionárius állapotokhoz tartozó energiákat az ABC-tétel segítségével, és ezek valós energiáit ábrázoltam V_0 függvényében. Eredményeim a 2.5. ábra bal oldalán láthatók.



2.5. ábra. $^{212}_{84}\text{Po}$ (2.14) komplex skálázott Hamilton-operátor esetén megjelenő kvázi-stacionárius állapotaihoz tartozó sajátenergiák valós részei a V_0 paraméter függvényében a 2.2. táblázat paramétereivel, trapézformulával integrálva (bal oldali ábra) és az így meghatározott V_0 paraméterrel számolt spektrum (jobb oldali ábra).

Itt N_p jelöli azon pontok számát, melyeken a trapézformula kiértékelésre került. Elemezzük kicsit ezt az ábrát! Az ábra lényegében (közel) párhuzamos (közel) egyenesekből áll. Ez azt jelenti, hogy egy-egy sajátérték közel lineáris függvénye V_0 -nak (ami a potenciálgödör mélységének a fele). Az egyazon állapotot jellemző, különböző V_0 -hoz tartozó értékek egy egyenesre esnek, és az ábrán pirossal számozva láthatók. Ezek a görbék ugyanakkor elkezdődnek és végződnek. Ennek az az oka, hogy amint elkezd mélyülni a potenciálgödör, az alagutazás valószínűsége csökken, így a szórési állapotok közül néhány belép a kvázi-stacionárius rezsimbe, a kvázi-stacionáriusakból pedig kötöttek lesznek. Az 1-es állapotot leszámítva (mely egyetlen pontot tartalmaz) egyenest illesztettem az adatsorokra. Ennek eredménye látható a 2.3. táblázatban. Természetesen a keresett sajátértéket több adatsorból is elő tudjuk állítani, viszont itt segítségül hívhatjuk azt a tényt, hogy a potenciálgödör mélysége tipikusan 40 – 50 MeV, azaz $V_0 \approx 20 - 25$ MeV. Innen hamar kiderül, hogy ide eső eredményt a 4. adatsor szolgáltat. Emlékeztetőül:

Sorszám	a	b
1	-	-
2	-1.4818 ± 0.00396	23.832 ± 0.0499
3	-1.3893 ± 0.00676	30.852 ± 0.1084
4	-1.2746 ± 0.01397	37.584 ± 0.2824
5	-1.2016 ± 0.01719	45.282 ± 0.4633
6	-1.0816 ± 0.02392	51.665 ± 0.7718
7	-0.8824 ± 0.03401	54.510 ± 1.2563

2.3. táblázat. A 2.5. ábra bal oldalán látható energia-sajátértékekre illesztett egyenesek illesztési paraméterei, és hibái. Az illesztés $y = ax + b$ alakú, az adatsorok számozása az ábrán látható.

a keresett bomlásenergia $Q_\alpha = 8.954 \text{ MeV}$. Az illesztési paraméterekből visszaszámolva $V_0 = 22.64 \text{ MeV}$ -nak adódik. Ezt az értéket behelyettesítve már ténylegesen kiszámolható a $^{212}_{84}\text{Po}$ spektruma. Ez látható a 2.5. ábra jobb oldalán. Hasonló számolás található [33]-ban.

A skálázás tapasztalatainak megfelelően két kvázi-stacionárius állapotot találtunk (az ábrán zöld és magenta rombusz), melyek közül a zöld rombuszal jelölt értéket feleltetjük meg az alfa-klaszter állapotának. Az első $E_{\text{qs}}^1 = 8.868 - i \cdot 8.320 \cdot 10^{-10} \text{ MeV}$ sajátenergiájánál, a második pedig $E_{\text{qs}}^1 = 18.450 - i \cdot 1.139 \cdot 10^{-4} \text{ MeV}$ -nál található.

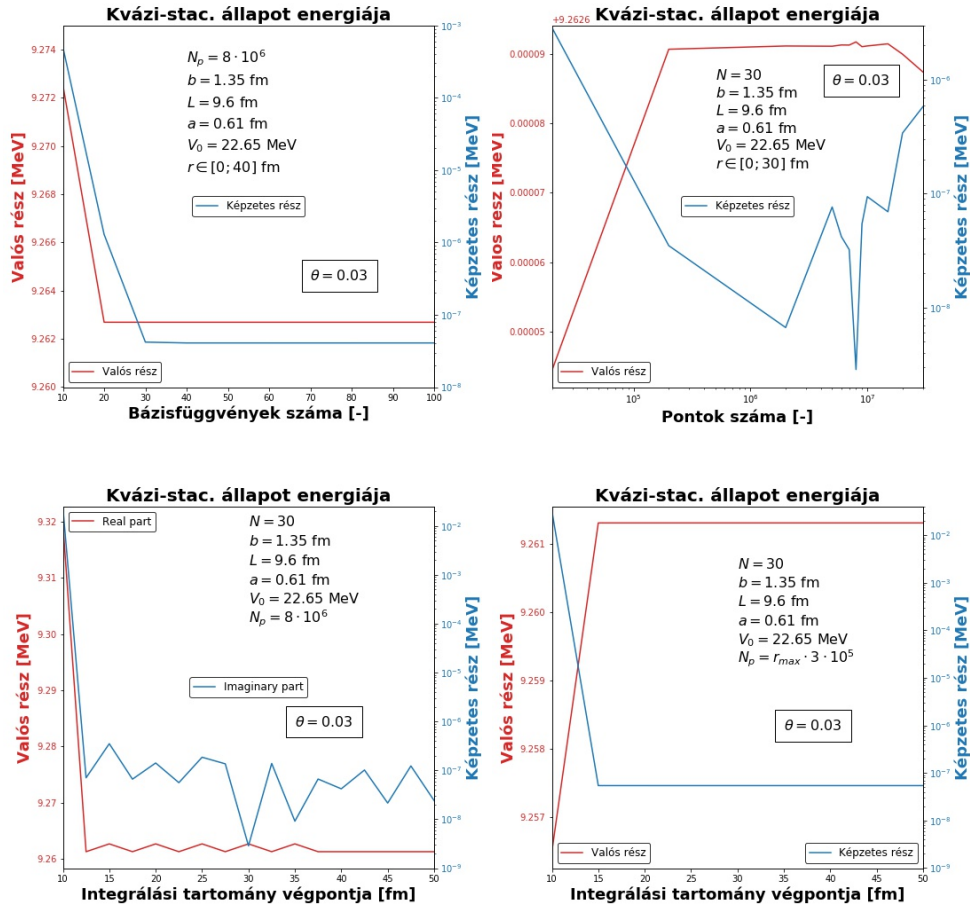
Tekintve, hogy a $^{212}_{84}\text{Po}$ felezési ideje kb. 300 ns, a kísérleti képzetes rész $\Gamma^{\text{kis}} = 1.521 \cdot 10^{-15} \text{ MeV}$. Alkalmazva az $\Gamma^{\text{kis}} = s_0 \Gamma$ képletet, ahol Γ az átlagtér-modellünkben számolt képzetes rész kétszerese, meghatározható a Po-212-re jellemző $s_0 = 9.14 \cdot 10^{-7}$ érték.

Numerikus integrálás tulajdonságai

Ebben a szakaszban szeretném megvizsgálni a mátrixok numerikus kiértékelésének tulajdonságait, és az integrálási paraméterek megválasztásának hatását a kapott spektrumokra. Ehhez a fent ismertetett Po-212 problémát választottam a 2.2. táblázat paraméterei szerint (kivéve a skálázás alá eső paramétereket). Célszerűnek tartottam vizsgálni, hogy a kvázi-stacionárius állapot sajátenergiája valós és képzetes része hogyan alakul a bázisfüggvények megválasztásának, az integrálási tartomány felosztásának, és az integrálási határoknak a függvényében, utóbbi kettőt ellenőriztem egymástól függetlenül, illetve úgy is, hogy a kettő szorzatát állandó értéken tartottam. Eredményeim a 2.6. ábrán láthatók.

Az integrálás Simpson-formulával történt. Az ábrákról egyértelműen leolvasható, hogy a numerikus módszerünk a legtöbb esetben konvergens eredményt ad. Azt találjuk, hogy ebben a paraméterszettben az integrálási tartomány végpontját $r_{\text{max}} \approx 20 \text{ fm}$ körül megválasztva már nem okozunk nagy hibát, bár a felosztás számának fixen tartása mellett (bal alsó ábra) tapasztalunk egy oszcillációt a képzetes részben.

A bázisfüggvények száma esetén is azt tapasztaljuk, hogy ezt nem muszáj 30 fölé emelni, mert igen kis eltérések adódnak ekkor, ezzel nagyon sokat nyerhetünk a futásidőn (lévén, hogy a bázisfüggvények számával négyzetesen skálázódik). Érdekes viselkedést tapasztalunk a felosztás számának függvényében. Azt találjuk, hogy a túl sűrű felosztás elkezd



2.6. ábra. Az integrálási paraméterek hatásának vizsgálata a kvázi-stacionárius állapot valós és képzetes részére. Vizsgált paraméterek: bázisfüggvények számának hatása (bal felső ábra), az integrálási tartomány felosztásának sűrűsége (jobb felső ábra), az integrálási tartomány végpontja fix számú felosztási ponton (bal alsó ábra) és az integrálási tartomány végpontja fix sűrűségű felosztási ponton (jobb alsó ábra).

elrontani az eredményeket, itt az alkalmazott számítógép képességei limitálják a pontosságot. A képzetes részben $8 \cdot 10^6$ pont alkalmazása esetén tapasztalunk egy minimumot, ez azt jelzi számunkra, hogy ennél az értéknél elég jól megközelítjük az egzakt értéket anélkül, hogy a gépi pontosság közbeszólna.

3. fejezet

Izotón atommagok vizsgálata

3.1. A vizsgált atommagok tulajdonságai, a dolgozat célkitűzése

„Prediction is very difficult,
especially if it's about the future.”

N. Bohr

A magfizikai nomenklatúrában *izotón atommagok* alatt az azonos neutronszámú magokat értjük. Az azonos protonszámú magokat nevezzük *izotópoknak*, az azonos tömegszámúakat pedig *izobároknak*.

A vizsgált izotópok kiválasztásának megértéséhez először meg kell vizsgálnunk az általunk alkalmazott modell érvényességi tartományát. Korábban a 2.2. szakaszban bemutattam az atommag független részecske héjmodelljének alapjait. A héjmodell jól magyarázza a mágikus számok létezését és ezek energiaszintjeit. Amikor viszont megkísérelünk egyéb mérhető paramétereket kiszámítani a héjmodellt alkalmazva, hamar ellentmondásokba ütközünk a kísérleti eredményekkel történő összevetésben. Egyszerű megfontolásokból belátható, hogy az atommag teljes impulzusmomentuma, az ún. *magspin* mozgásállandó, fix mérhető mennyiség [1]. Az atommag protonok és neutronok kötött rendszere, azaz teljes impulzusmomentuma a komponensek impulzusmomentumainak az impulzusmomentum-összeadási szabály szerint vett összege. Itt azonban figyelembe kell azt is vennünk, hogy a nukleonok feles spinű fermionok, azaz a spinből is származik egy járulék. Innen a mag teljes $\hat{\mathbf{I}}$ impulzusmomentuma:

$$\hat{\mathbf{I}} = \sum_{i=1}^Z \hat{\mathbf{J}}_i^p + \sum_{j=1}^{A-Z} \hat{\mathbf{J}}_j^n, \quad (3.1)$$

ahol $\hat{\mathbf{J}}_i^p$ és $\hat{\mathbf{J}}_j^n$ rendre az i -edik proton és j -edik neutron teljes impulzusmomentuma. Szerencsére a magerőt létrehozó kölcsönhatás olyan, hogy az azonos nukleonokat zéró impulzusmomentumú párokba rendezi. Így a magspin csupán a proton- és neutronszám párosságától függ, azaz csak a párosítatlan nukleon okoz nemnulla impulzusmomentumot. Páros-páros magok esetén a magspin 0, páros-páratlan esetben félegész, páratlan-páratlan esetben pedig egész szám. Kiderül továbbá, hogy az atommag elektromos dipólmomentuma zéró, azaz az atommag hullámfüggvénye paritás-sajátállapotban van.

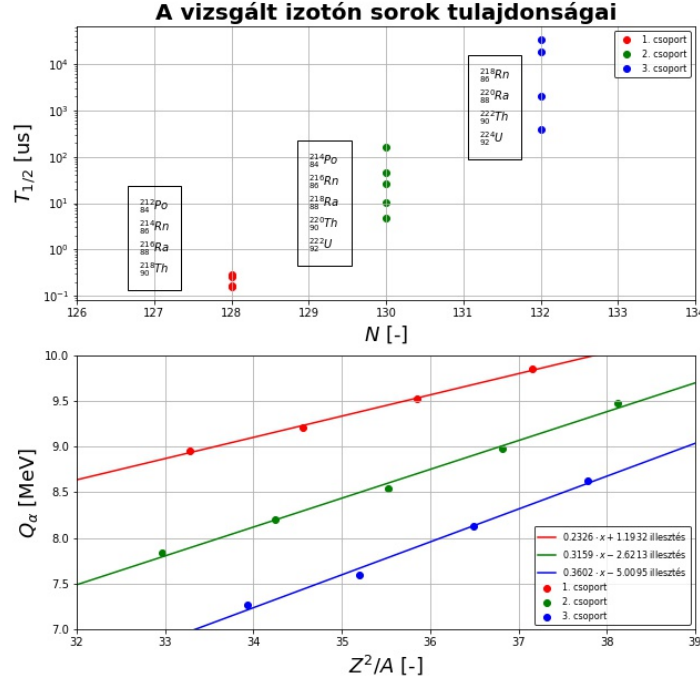
Nézzük meg, hogy a héjmodell milyen értékeket jósol erre a két igen fontos mennyiségre. Vegyünk egy izotópot, legyen ez a ^{19}F , mely a fluor egyetlen stabil izotópja, fogmosáskor nap mint nap bevisszük a szervezetünkbe. Ez egy páratlan-páros mag, $8+1=9$ protonja van. A 8 mágikus szám, azaz az első két nukleonhéj (1s és 1p) betöltött, a 9. proton az 1d héj 5/2-es momentumú alhéján ül, azaz a fluor magspinje 5/2, ezzel szemben mérések alapján 1/2. További probléma adódik a páratlan-páros magok elektromos kvadrupól-momentumának vizsgálatakor, melyre a mérések esetenként 30-szoros értéket adnak a héjmodellből számolthoz képest. A probléma feloldása abban rejlik, hogy a héjmodell az atommagot (és a magpotenciált) gömbszimmetrikusnak tételezi föl, azonban kiderül, hogy a páratlan-páros magok forgási ellipszoid-deformációt szenvednek [34].

Lévé, hogy az általunk alkalmazott (2.13) WOC-potenciál is gömbszimmetrikus, így csak páros-páros magokat vizsgálhatunk (a mag deformációjának figyelembe vételével páratlan-páros magok is vizsgálhatók). További megkötést ad, hogy olyan magokat kell keresnünk, melyek egyrészt alfa-bomlók, másrészt a felezési idejük nem túl nagy. A nagy felezési idő kis bomlásállandót jelent, azaz Γ értéke is igen kicsi lesz. Vegyük pl. az $^{238}_{92}\text{U}$ magot! Ennek felezési ideje $T_{1/2} = 4.468$ by, azaz a bomlásállandója $\lambda = \log 2/T_{1/2} \approx 4.916 \cdot 10^{-18}$ 1/s. Az ehhez tartozó Γ érték $\Gamma = \hbar\lambda = 3.236 \cdot 10^{-39}$ MeV, azaz az ehhez tartozó komplex energia-sajátérték képzetes része $\Im(E) = -\Gamma/2 = -1.618 \cdot 10^{-39}$ MeV. A modellünk közelítései, ahová beleértjük például az alfa-fürtösödés (klaszterizáció), azaz az alfa-klaszter magon belüli képződése figyelembe vételének hiányát, és a numerikus pontosság mértéke mellett ennek elérése lehetetlen. A néhány száz nanoszekundum és néhány milliszekundum közötti felezési idejű izotópok vizsgálata ugyanakkor egy reális célnak tűnhet. A fennálló szakirodalomból [10]-t és [35]-t vizsgálva észrevehető, hogy a 128-as, 130-as és 132-es izotón sorban vannak megfelelő tulajdonságú atommagok. Ezek idevágó adatait tartalmazza a 3.1. ábra és C.1. táblázat.

A 3.1. ábra alsó részén látható, hogy az alfa-energiák a Coulomb-tag (közelítőleg) lineáris függvényei. Emellett a felső ábrán látható, hogy a felezési idők alapján is három viszonylag jól elkülöníthető csoportba oszthatók. Korábban bevezettük a kísérleti- és az átlagtér-modellből számolt Γ -paraméterek közti kapcsolatot: $\Gamma^{\text{kís}} = s_0 \cdot \Gamma$. Várakozásink szerint az izotón csoportokon belül s_0 értéke valamilyen jól detektálható szabályszerűséget követ (legjobb esetben konstans), azaz a kapott képzetes részek aránya megegyező a kísérleti képzetes részek (vagy ekvivalens módon a felezési idők) arányával.

Itt elérkeztünk a dolgozat fő célkitűzésének ismertetéséhez: Célunk, hogy az eddigiekben bemutatott elméleti és numerikus módszereket felhasználva igazoljuk az energia-sajátértékek képzetes része és a felezési idők alakulása közötti kapcsolatot. Ez felfogható úgy, mint a számítási módszer validációjának egy szignifikáns lépése. E lépés sikeressége esetén a módszer felhasználható eddig ismeretlen felezési idők becslésére.

Még egy további probléma vár kezelésre a számítások megkezdése előtt, nevezetesen a magsugár meghatározásának problémája. A numerikus módszer próbái során kiderül, hogy az energia-sajátértékek igen érzékenyek az r_0 paraméter megválasztására. Az atommag sugara alatt többféle fogalmat értünk. Beszélhetünk egyrészt töltéssugarról, mely a protonok által betöltött tértartományt jellemzi. Ez kis tömegszámok esetén nagyjából megegyezik a maganyag sugarával. Nagy tömegszámokra viszont neutrontöbblet alakul ki a magban, és a két érték eltávolodik egymástól. r_0 értéke sajnos bomlási csatornán-



3.1. ábra. A vizsgált izotón sorok tagjainak felezési ideje a neutrons szám függvényében (felső ábra) és alfa-energiái a Coulomb-együttható (Z^2/A) függvényében (alsó ábra).

ként eltérhet még egy adott mag esetén is. [35]-ben a szerzők nagy számú atommagra kiszámították ezeket az értékeket. A fejezet további szakaszában két számítássorozatot ismertettek, az elsőt konstans $r_0 = 1.3118$ fm esetén, a másodikat pedig C.1. táblázat paramétereire alapján. A módszer hasonló, mint a korábban ismertetett: V_0 skálázásával megvizsgálom a megjelenő kvázi-stacionárius állapotok energiáit, és a valós részt az alfa-energiához illeszttem (szintén C.1. táblázatban feltüntetve), ezt felhasználva megvizsgálom a képzetes részeket és összevetem őket. A skálázás numerikus eredményei a kétféle magugár-definícióra C. mellékletben láthatók. A futások itt a (2.13) WC-részére futottak, ugyanis amennyiben az oszcillátor-tagot is hozzávesszük, úgy a potenciáldomb magassága is V_0 -függő lenne, ezt pedig ebben a közelítésben szeretnénk elkerülni. Az oszcillátor-potenciál figyelembe vétele további megfontolásokat igényel, és egy későbbi munka tárgya.

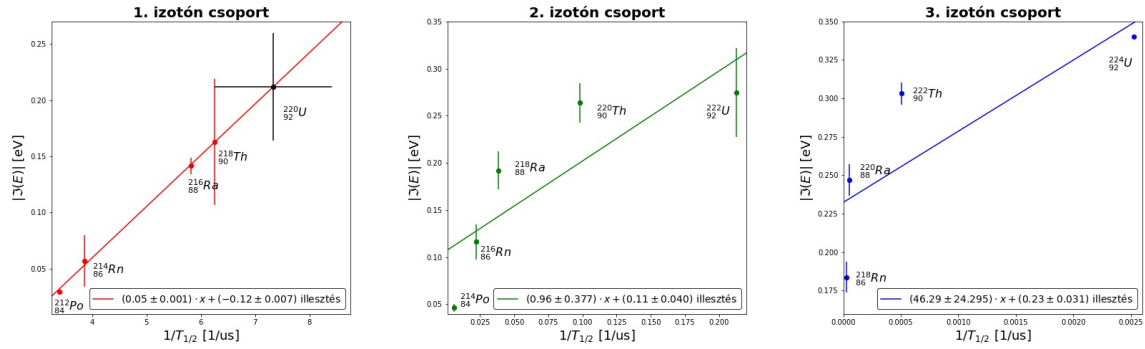
Megvizsgálva a fent jelzett mellékletben szereplő ábrákat és táblázatokat (melyek nagyjából 100 óra futásidő eredményeit tartalmazzák) egyértelmű eltérés látható a konstans r_0 esetén, és az izotóponként változó r_0 -ra számolt eredmények között. Ez talán a görbék jellegében nem szembetűnő, de számértékeikben már annál inkább. A valós részek mindkét módszer esetén jól egyeznek, de a képzetes részekre nagyságrendi eltérések tapasztalhatók, mégpedig oly módon, hogy a változtatott r_0 -kon történő futtatás kb. 3 nagyságrenddel magasabb képzetes részeket ad. Ennek fő oka az a és b paraméterek skálázása után érthető meg. A feltételezésünk az, hogy ezek a paraméterek egy izotón

csoporton belül állandóak. A várakozásunk alapja, hogy egy izotón-csoporton belül csak a protonok száma változik, a magstruktúrából eredő mennyiségek, például a fűrtösödés nem. Ebből következően a protonok számának változása által az izotón csoportokban az élettartamok változását meghatározó tényező a Coulomb-gát változása lesz, amit a V_0 -al is hangolhatunk a fixen tartása mellett (ne feledjük, hogy az a diffúzió a Fermi-függvény levágásának gyorsaságát adja meg, azaz azt, hogy a maganyag határa mennyire „éles”). b csupán egy skálázó paraméter a sajátfüggvényekben, melynek a numerikus közelítés jóságára van hatása. A két paraméter hatását minden izotón csoport legkisebb rendszámú tagjára elemeztem. Ennek eredménye látható C.2., C.3., C.8., C.9., C.15. és C.16. ábrákon. Itt az látható, hogy a valós részekre az a és b paramétereknek nincs igazi hatása (ahogyan ez el is várható): a kapott valós értékekre egyenes illeszthető, melynek paraméterei az ábrákon láthatók. Az a paraméter tipikus értékei 0.6 – 0.7 fm környékén mozognak, ilyen kis változtatás mellett ez nem ad igazi eltérést a sajátenergiák valós részében. A b esetén pedig lényegében semmi hatást nem tapasztalunk (az illesztési paraméterek jó közelítéssel 0 meredekséget adnak). A képzetes részeknél már más a helyzet. Itt azt tapasztaljuk, hogy változó r_0 -k esetén ezek a paraméterek monoton függvényei, míg konstans r_0 -ra azt látjuk, hogy a görbék nagy részénél megjelenik lokális minimumhely (ez azért jó, mert minél jobban szeretnénk megközelíteni a kísérleti értéket, tehát minél kisebb képzetes energiát szeretnénk az adott potenciálstruktúra esetén előállítani). Ebből azt a következtetést tudjuk levonni, hogy a változtatott r_0 -kra a paramétereinket egy más tartományban kell megválasztanunk, hogy konzisztens eredményeket kapjunk. További érv a konstans r_0 -k használata mellett, hogy a modellünk semmilyen mélyebb megfontolást nem tartalmaz r_0 értékére, ez csupán egy paraméter, melyet ugyan kísérleti megfontolások alapján, de „kézzel” helyezünk el a modellünkben. Így a modell konzisztenciája megkívánja ennek állandó értéken tartását (s így lényegében ez csak a V_0 -tól függ). Így a továbbiakban közölt eredmények konstans $r_0 = 1.3118$ fm esetére vonatkoznak. A V_0 -t skálázó ábrákon a valós részek egyenesekre illenek egy adott sajátállapot sajátenergiája esetén V_0 függvényében. Az adatsorokra egyeneseket illesztettem mindkét sugár-megközelítés esetén, melynek paraméterei az ábrák alatti táblázatokban láthatók. Az illesztésekből kiszámolható, hogy milyen V_0 esetén kapjuk meg a mérési adatból származó Q_α bomlási energiát. Ahogy az ábrán látható, ezt több sajátérték is előállítja a számunkra, ugyanakkor itt kihasználhatjuk, hogy $V_0 \approx 25$ MeV, azaz az ehhez legközelebb eső V_0 -t kell választanunk. A kapott V_0 -k az illesztés hibáit figyelembe véve a 3.1. táblázatban láthatók.

A táblázatban látszik, hogy a V_0 paramétereket relative jó közelítéssel megtaláltuk. Ezt követően a képzetes részeket ábrázoltam. A kapott V_0 értéket körülvevő két számítási pont közé egyenest illesztettem, és ehhez meghatároztam a Q_α alapján számolt V_0 értékhez tartozó képzetes részt, ezek szintén láthatók a 3.1. táblázatban. Az ábrázolhatóság kedvéért a képzetes részek konstans r_0 esetén $\text{meV} = 10^{-9}$ MeV mértékegységben, változó r_0 esetén pedig $\text{eV} = 10^{-6}$ MeV mértékegységben kerültek felvezetésre. Látható, hogy konstans r_0 esetén a relatív hibák lényegesen kisebbek, mint változó r_0 esetén, ez továbbra is azt jelzi számunkra, hogy a konstans értékeket kell alkalmaznunk. Innen már nem marad más feladatunk, mint a kiszámolt képzetes részeket ábrázoljuk a kísérleti bomlás-állandók (illetve jelen esetben a felezési idők reciprokának) függvényében. Ez konstans r_0 -ra a 3.2. ábrán látható.

Sor	Izotóp	V_0 [MeV]	$\Im(E)$ [meV]	V_0 [MeV]	$\Im(E)$ [eV]
	-	Konstans r_0		Változó r_0	
1	$^{212}_{84}\text{Po}$	25.53 ± 0.504	29.17 ± 0.711	23.04 ± 0.579	21.84 ± 8.710
1	$^{214}_{86}\text{Rn}$	25.27 ± 0.561	56.88 ± 22.923	22.37 ± 0.649	20.80 ± 18.079
1	$^{216}_{88}\text{Ra}$	24.96 ± 0.444	141.59 ± 7.423	21.71 ± 0.692	21.77 ± 10.943
1	$^{218}_{90}\text{Th}$	24.65 ± 0.468	162.53 ± 56.145	21.29 ± 0.618	16.96 ± 6.176
2	$^{214}_{84}\text{Po}$	26.10 ± 0.589	46.40 ± 4.204	23.01 ± 0.680	13.22 ± 5.947
2	$^{216}_{86}\text{Rn}$	25.77 ± 0.545	116.10 ± 18.584	21.81 ± 0.654	13.24 ± 7.760
2	$^{218}_{88}\text{Ra}$	25.44 ± 0.483	192.07 ± 20.515	21.51 ± 0.575	11.81 ± 4.867
2	$^{220}_{90}\text{Th}$	25.06 ± 0.534	263.64 ± 20.906	25.02 ± 0.653	23.94 ± 51.045
2	$^{222}_{92}\text{U}$	24.62 ± 0.501	274.58 ± 47.189	21.92 ± 0.605	12.10 ± 6.045
3	$^{218}_{86}\text{Rn}$	26.21 ± 0.529	183.70 ± 9.908	22.46 ± 0.674	5.57 ± 8.002
3	$^{220}_{88}\text{Ra}$	25.89 ± 0.500	246.73 ± 10.274	22.38 ± 0.635	5.29 ± 6.268
3	$^{222}_{90}\text{Th}$	25.44 ± 0.553	303.24 ± 7.203	21.82 ± 0.535	6.85 ± 3.485
3	$^{224}_{92}\text{U}$	25.01 ± 0.486	339.99 ± 0.066	21.59 ± 0.497	6.56 ± 2.654

3.1. táblázat. V_0 paraméter skálázásából adódó értékek és az illesztésekből számolt képzetes sajátenergiák a különböző izotópokra a kétféle sugárkonvencióban. A hiba statisztikus jellegű, és Gauss-féle hibaterjedésből származtatott.



3.2. ábra. A skálázásból számolt képzetes részekre illesztett egyenesek a felezési időök reciprokainak függvényében a három izotón csoportra.

Az ábrán az látható, hogy az első izotón csoport esetén az értékek jól illeszkednek egy egyenesre, azaz az illesztés igen kis hibával végrehajtható. Ez azt jelenti, hogy ebben az esetben a paramétereket sikerült egy megfelelő értéktartományban belőni, ahol a kapott képzetes részek aránya jól közelíti a kísérleti arányokat. Ez a másik két csoport esetén nem mondható el, de ne feledjük, hogy itt ugyanazt az a és b értéket alkalmaztuk, ezek pontosítását a következő szakasz tartalmazza. A hibasávokat a képzetes részekre történő illesztés hibájából határoztam meg, így a képzetes részeket leíró görbe meredeksége fogja a hiba mértékét befolyásolni.

3.1.1. Számolások U-220 esetén

Az első izotón csoportban, amely esetén igen jó illeszkedést tapasztaltunk, „találunk” még egy izotópot, ez az $^{220}_{92}\text{U}$, mely egy egyelőre fel nem fedezett izotóp [10]. A korábban bemutatott módszerrel azonban becslés adható a felezési idejére!

Ehhez elsőként ki kell számolnunk a bomlási energiát. Ebben a 3.1. ábra nyújt segítséget, itt ugyanis azt láttuk, hogy az alfa-energiák egy egyenesre illenek. Ennek meredekségének ismeretében megbecsülhető az ismeretlen izotón bomlási energiája. Kiszámolva $Q_\alpha = 10.14 \pm 0.437 \text{ MeV}$ -nak adódik. Ezek után hasonló skálázást kell végrehajtanunk a V_0 paraméterben, mint a korábbi esetekben. Mivel láttuk, hogy az r_0 konstans értéken tartása ad jobb eredményeket, így ebben az esetben csak ezt a számolást végeztem el. Ennek eredménye látható C.20. ábrán. A megfelelő Q_α érték az ábrán a 4. sajátértékre történő illesztésből kapatható meg, melynek paraméterei C.15. táblázatban láthatók. Ebből kiszámolható V_0 értéke, mely $V_0 = 24.354 \pm 0.649 \text{ MeV}$ -nak adódik. A képzetes rész a korábban ismertetett módszerrel maghatározható (két pont közé egyenest illesztve), ebből származóan az U-220-ra számolt képzetes részre $\Im(E) = (2.116 \pm 0.478) \cdot 10^{-7} \text{ MeV}$ értéket kapunk.

Ezt követően a 3.2. ábra adatait kell felhasználnunk, nevezetesen az illesztett egyenes paramétereit, hogy az urán-220-ra kapott képzetes részből vissza tudjuk számolni a felezési idejét (az illesztési paraméterek az ábrán láthatók). Mindezek alapján az $^{220}_{92}\text{U}$ -ra a modellünk alapján becsült felezési idő $T_{1/2} = \underline{\underline{136 \pm 20 \text{ ns}}}$.

3.2. Spektrumok újraszámolása

„Not only is the Universe stranger
than we think, it is stranger than we
can think.”

Heisenberg

Most, hogy az előző fejezetben elvégeztük a paraméterek becslését elérkeztünk oda, hogy a meghatározott paraméterekkel újraszámoljuk a spektrumokat, és pontosabb becslést tudjunk mondani a képzetes részekre, ezáltal a felezési időkkal való összevetést nagyobb pontossággal megtegyük. Erre azért van lehetőségünk, mert a korábbi számításokban nagy pontatlansági faktort jelentett a valós és képzetes részeken történő illesztésekből adódó hiba, ez viszont a paraméterek pontos értékének megadásával csökkenthető.

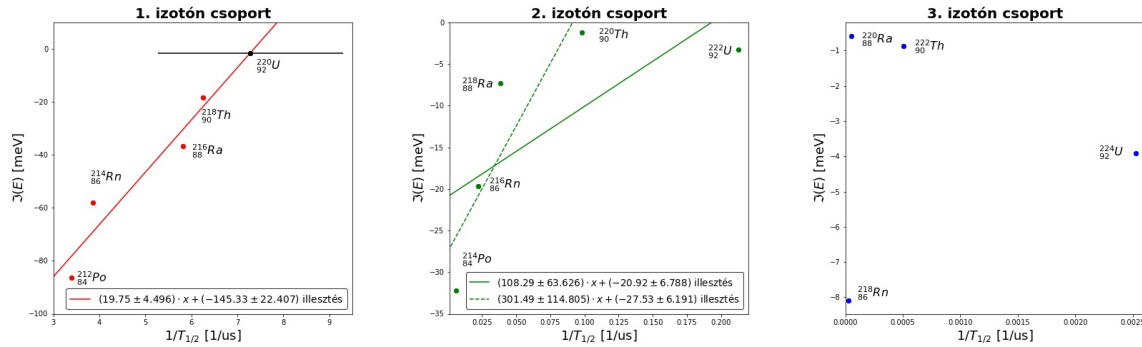
A számolásokat a korábbiakhoz hasonlóan (2.13)-ban definiált potenciál WC-részére hajtottuk végre kizárólag a konstans $r_0 = 1.3118 \text{ fm}$ értéket alkalmazva. A számolási paraméterek a 3.2. táblázatban láthatók. Ezt követően a fenti táblázat paramétereivel kiszámítottam a WC-potenciálra a komplex skálázott Hamilton-operátor spektrumát $\theta = 0.03$ -as skálázási szög esetén. Az integráláshoz továbbra is a trapézformulát használtam $r \in [0; 45] \text{ fm}$ integrálási tartományra, $8 \cdot 10^6$ osztópont mellett 30 bázisfüggvényre. A kapott spektrumok, és a $\kappa_\theta^{\text{qs}}$ elfordulási paraméterek láthatók a 3 izotón csoport esetén rendre a D.1., D.2. és D.3. ábrákon.

A kapott spektrumokból leolvasható az alfa-állapotnak megfelelő sajátállapot energia-

Sor	Név	a [fm]	b [fm]	V_0 [MeV]	$\Re(E)$ [MeV]	$\Im(E)$ [meV]
1	$^{212}_{84}\text{Po}$	0.6637	1.31	25.688	8.954	-86.456
1	$^{214}_{86}\text{Rn}$	0.6637	1.31	25.440	9.208	-58.076
1	$^{216}_{88}\text{Ra}$	0.6637	1.31	25.151	9.526	-36.766
1	$^{218}_{90}\text{Th}$	0.6637	1.31	24.860	9.849	-18.422
1	$^{220}_{92}\text{U}$	0.6637	1.31	24.590	10.143	-1.563
2	$^{214}_{84}\text{Po}$	0.6800	1.31	26.247	7.834	-32.184
2	$^{216}_{86}\text{Rn}$	0.6800	1.31	25.928	8.197	-19.661
2	$^{218}_{88}\text{Ra}$	0.6800	1.31	25.624	8.540	-7.335
2	$^{220}_{90}\text{Th}$	0.6800	1.31	25.264	8.973	-1.200
2	$^{222}_{92}\text{U}$	0.6800	1.31	24.857	9.480	-3.319
3	$^{218}_{86}\text{Rn}$	0.7000	1.31	26.375	7.263	-8.086
3	$^{220}_{88}\text{Ra}$	0.7000	1.31	26.082	7.592	-0.579
3	$^{222}_{90}\text{Th}$	0.7000	1.31	25.657	8.127	-0.866
3	$^{224}_{92}\text{U}$	0.7000	1.31	25.257	8.627	-3.914

3.2. táblázat. Az újraszámolt spektrumokból kapott alfa-bomlásnak megfelelő kvázistacionárius energiák valós és képzetes részei, valamint a futási paraméterek a különböző izotópokra.

sajátértékének képzetes része. Ezek alapján elvégeztem a korábban ismertetett illesztést a felezési idők reciprokaire. Ez a 3.3. ábrán látható.



3.3. ábra. Az újraszámolt spektrumokból kapott alfa-energiák képzetes részire illesztett egyenesek a felezési idők reciprokaiknak függvényében a három izotóp csoportra.

A statisztikai hiba ebben az esetben elhanyagolható, ugyanis a 3.2. táblázatban a valós részeket összevetve C.1. táblázatban szereplő alfa-energiákkal látható, hogy igen pontosan megtaláltuk őket (a legtöbb esetben 4 értékes jegy az egyezés), azaz feltételezve, hogy a képzetes részek relatív eltérése is ebbe a nagyságrendbe esik könnyen belátható, hogy ebből nem származik szignifikáns hibaforrás. A fennmaradó eltérés a szisztematikus hiba, mely érkezik egyrészt a közelítések pontatlanságából (ez hozzávetőlegesen a 2.6. ábra alapján lenne becsülhető), illetve természetesen az elmélet közelítéseinek hibáiból. A szisztematikus hiba becslése egy soron következő munka részét képezi.

Az ábrákról azt olvashatjuk le, hogy az újrafuttatás után az egyenesekre illeszkedés nem

olyan jó, mint amit a korábbi illesztésekből kaptunk. A 2. izotón sor esetén (középső ábra) az U-222-es izotóp út el szignifikánsan az egyenestől. Az illesztés a másik 4 tagra kb. 40%-os hibával végezhető el. A 3. sornál (ahogy a korábbi esetben is láttuk) az egyenesre illeszkedés nem teljesül. A nagyfokú eltérésnek oka lehet természetesen az elméleti modell hiányossága (itt ne feledjük pl. azt, hogy ezek a számítások csak a WC-potenciálra készültek), vagy a numerikus közelítés pontatlansága (pl. kevés bázisfüggvény alkalmazása).

Az első csoport esetén az illesztés nagyjából 25%-os hibával elvégezhető, azaz a tendencia tisztán látható. Ebben az esetben is ki lehet számolni az $^{220}_{92}\text{U}$ -ra becsült felezési időt. Itt a statisztikai hiba a képzetes részekre történő egyenes illesztéséből jön. Ezek alapján a felezési idő: $T_{1/2} = 137 \pm 38$ ns, mely szinte tökéletesen egyezik a korábban számolt értékkel.

Végül eljutottunk oda, hogy felírjuk a dolgozatban bemutatott eljárás szisztematikus formáját:

Numerikus módszer ismeretlen alfa-bomló (páros-páros) atommagok felezési idejének becslésére:

1. Megkeressük az ismeretlen felezési idejű atommag izotón sorának elemeit, és ebből kiválasztjuk a páros-páros alfa-bomló magokat.
2. A WC- (vagy WOC-) potenciál V_0 paraméterét skálázva hozzávetőlegesen megkeressük a különböző magokhoz tartozó értékeket.
3. Az izotón sor legnagyobb tömegszámú tagját vizsgálva meghatározzuk a potenciál a és a bázisfüggvény-rendszer b paraméterét, és ezeket az izotón soron belül állandó értéken tartjuk. A paraméterek kiválasztásánál az a fő szempont, hogy a képzetes részek negatívak legyenek, és abszolút értékben minél kisebbek.
4. A korábban hozzávetőlegesen meghatározott V_0 paraméterek környékén nagyobb felbontású skálázást végrehajtva megkeressük azon V_0 -kat, melyek esetén a kvázi-stacionárius állapotok energiájának valós része minél jobban megközelíti a kísérleti alfa-energiát.
5. Ezt követően ezekkel a paraméterekkel kiszámoljuk a komplex-skálázott spektrumokat, és a kvázi-stacionárius alfa-állapothoz tartozó energia képzetes részét ábrázoljuk a bomlásállandó (vagy valamilyen ezzel lineáris összefüggésben lévő mennyiség) függvényében.
6. Az adatsorra egyenest illesztünk, és az ismeretlen mag esetén kapott képzetes részre extrapolálunk. Innen meghatározható ennek felezési ideje.

4. fejezet

Összefoglalás, kitekintés

„Akárhogyan lesz, immár kész a
leltár.
Éltem - és ebbe más is belehalt már.”

József Attila

Jelen szakaszban szeretném összefoglalni a dolgozatban bemutatott munkát. A dolgozat a radioaktív alfa-bomlás folyamatában kialakuló alfa-klaszter kvázi-stacionárius állapotának konzisztens kvantummechanikai leírásával foglalkozott. Az alfa-bomlás egy klasszikusan tiltott spontán magátalakulás, mely kvantummechanikai alagúteffektus által mehet végbe. Igen hamar kiderül azonban, hogy a Schrödinger-egyenletet megoldva a bomlás egy igen egyszerű modelljére (ld. 1.1. szakasz) a megoldások valós sajátenergia esetén nem lesznek illeszthetők, így komplex energia-sajátértékre lesz szükségünk. A komplex energia-sajátértékek képzetes részét a véges élettartamnak feleltetjük meg. Ha a komplex energia-sajátértéket $E = E_r - i\Gamma/2$ alakban definiáljuk, akkor teljesül a $\Gamma = \hbar\lambda$ összefüggés, ahol λ az alfa-klaszter élettartamának reciproka.

Könnyen juthatunk arra a következtetésre, hogy a megoldás tisztán kimenő határfeltételre történő illesztése magával vonja a Hamilton-operátor nem-hermitikusságát. Innen azt ismerhetjük fel, hogy az alfa-bomlás tárgyalása a nem-hermitikus kvantummechanika keretei között célravezető. Kiderül azonban, hogy a megoldások aszimptotikusan divergensek lesznek.

A nem-hermitikus alfa-bomló rendszert leíró Hamilton-operátor nem-hermitikussága nem szembetűnő, hiszen ezen tulajdonsága csupán a megoldások illesztéséből származik, ezért valamilyen speciális transzformáció segítségével a nem-hermitikusságot expliciten „láthatóvá” kell tennünk. Ebben a dolgozatban erre a *komplex skálázást* használtuk (ld. 1.2.1. szakasz). A megoldások divergenciájának kezelésére az újradefiniált skalárszorzatot, az irodalomban *c-szorzatnak* nevezett műveletet alkalmaztuk (ld. 1.2.2. szakasz). A dolgozatban bemutattam a komplex skálázás legfontosabb matematikai tulajdonságait, melyek az (1.2.5) *ABC tétel*ben sűrítethetők.

Ezt követően a 2. fejezetben bemutattam az alkalmazott számítási módszereinket, és a komplex skálázás hatását elemeztem a 2.1. szakaszban a (2.5) Hamilton-operátor spekt-

rumát közelítve. Ennek vizsgálata során bemutattam az ABC-tétel teljesülését: a kötött állapotok nem transzformálódnak a komplex skálázás alatt, míg a szórési állapotok a -2θ meredekségű egyenesen vesznek fel pozíciót a komplex energia-síkon. A kvázi-stacionárius állapotok energiájának valós része pozitív, képzetes részüket pedig megfeleltethetjük az állapot élettartamának. A $k = 2$ paraméterszetre sikerült találnunk egy kvázi-stacionárius állapotot, melynek energiája $E_2^{\text{qs}} = 2.393 - i \cdot 1.177 \cdot 10^{-4}$ MeV-nak adódott. Láthattuk, hogy a kötött állapotok igen kis mértékben skálázódnak, viszont a szórési állapotok esetén találtunk olyan sajátértékeket, melyek nem illeszkedtek a -2θ egyenesre, ezek arra engednek következtetni, hogy a közelítésünk pontosságán még lehetne javítani.

A 2.2. szakaszban bemutattam a független részecske héjmodellen alapuló (2.13) WOC-potenciált, melyet később széles körben alkalmaztunk számításink során. Vizsgálat tárgyát képezte a $^{212}_{84}\text{Po}$ izotóp, melynek kiszámítottam a komplex skálázott spektrumát a WOC-potenciállal. Ehhez numerikus integrálást alkalmaztam, melynek vizsgáltam tulajdonságait, és megmutattam, hogy a közelítéseink kellően konvergensek. Beláthattuk azt, hogy a módszerünk nem alkalmas a kísérleti $\Gamma^{\text{kís}}$ előállítására, ennek oka, hogy csupán az alfa-klaszter kvázi-kötött állapotának jellemzőit tudja meghatározni, nem a teljes, mag szerkezeti sajátosságokat is tartalmazó bomlási folyamatot, mint pl. az alfa-fürtösödést, ugyanakkor érvényes a $\Gamma^{\text{kís}} = s_0 \Gamma$ összefüggés, ahol Γ az önkonzisztens modellünkből számolt érték. A Po-212 esetén $s_0 = 9.14 \cdot 10^{-7}$ -nek adódott. A várakozásunk, hogy s_0 egy adott izotón csoporton belül nem változik, azaz ha ábrázoljuk az izotón csoport különböző tagjaira a kapott képzetes részeket a bomlásállandó függvényében, akkor egy egyenesre esnek.

A fenti állítás ellenőrzésére a 3. fejezetben vettem az $N = 128$, $N = 130$ és $N = 132$ izotópok néhány alfa-bomló páros-páros atommagját (ld. C.1. táblázat), és az ő esetükben is megkíséréltem a komplex skálázott spektrum kiszámítását. Ehhez először széleskörű becslést végeztem a WC-potenciál paramétereire (nevezetesen a V_0 mélységre, az a diffuzitásra és a b oszcillátor-paraméterre). Ennek eredményei láthatók a C. mellékletben. A kvázi-stacionárius energiák valós részére történő illesztésből a kísérleti alfa-energia ismeretében meghatároztam V_0 -t, majd a képzetes részekből megadtam a bomló rendszert jellemző Γ értéket. Ezeket a különböző izotópokra ábrázoltam a bomlásállandók függvényében. Azt találtam, hogy az $N = 128$ -as csoport tagjai jól illeszkednek egy egyenesre, míg a másik két esetben az egyezés nem volt olyan jó. A számolások során két sugár-definíciót is alkalmaztam, az egyik a szakirodalom alapján meghatározott r_0 -k használatát, a másik pedig konstans $r_0 = 1.3118$ fm használatát jelenti, és beláttam, hogy a pontosság jelen fokán az utóbbi definíció kifizetődő. A számolások alapján megbecsültem az $^{220}_{92}\text{U}$ eddig ismeretlen izotóp felezési idejét, melyre $T_{1/2} = 136 \pm 20$ ns adódott.

Ezt követően a 3.2. szakaszban újraszámoltam az illesztett paraméterek alapján a spektrumokat. Az a és V_0 értékeket úgy hangoltam, hogy a kvázi-stacionárius állapotok energiájának valós részei 4 értékes jegyre megközelítsék a kísérleti alfa-energiákat. Ebben az esetben is ábrázoltam a képzetes részeket a felezési idő reciproka függvényében. Ekkor kevésbé jó egyezést tapasztaltam, de az 1. és 2. csoport esetén itt is felfedezhető volt egy szisztematikusság. Ebben az esetben is kiszámoltam az $^{220}_{92}\text{U}$ felezési idejét, melyre $T_{1/2} = 137 \pm 38$ ns adódott, ami nagyon jó egyezést mutat az előző módszerből kapott

értékkel.

Összefoglalva elmondható, hogy a bemutatott módszer alapján jósolt értékekben felfedezhetők összefüggések a kísérleti adatokkal, viszont a reprodukció a paraméterek nagyon pontos hangolását igényli. A megközelítés validációjában nagy segítség lenne, ha az $^{220}_{92}\text{U}$ esetén előállnának kísérleti adatok.

Számításaink kiterjeszthetők páratlan-páros magokra is, amennyiben figyelembe vesszük a mag (és ebből fakadóan a potenciál) deformációját.

A módszerünk előnye, hogy a potenciálba újabb tagokat befoglalva egyéb kölcsönhatások, pl. lézertérrel való kölcsönhatás is vizsgálható, így kimutatható a lézertér felezési időre gyakorolt esetleges hatása, melynek hosszú távon igen kedvező befolyása lehet a nukleáris hulladékok kezelésére.

Köszönetnyilvánítás

„Be van fejezve a nagy mű, igen.
A gép forog, az alkotó (nem) pihen.”

*Madách Imre, a szerző zárójeles
megjegyzésével*

Mindenekelőtt szeretném megköszönni témavezetőimnek, Dr. Kis Dániel Péternek és Szilvási Rékának (azaz a „BME Magfizikai Kutatócsoport” tagjainak) azt a rengeteg támogatást és segítséget, amit szűkebb értelemben a dolgozat elkészítésében, tágabb értelemben pedig a magfizika lenyűgöző világának megismerésében adtak számomra! Hálával tartozom, hogy egy ilyen kicsi, de remek csapat tagja lehetek!

Szeretném megköszönni a JNEA-nak, hogy anyagi támogatást nyújtanak tanulmányaimhoz, beleértve ennek a dolgozatnak elkészültét is!

Hálával tartozom családomnak azért, hogy támogattak és támogatnak a természettudományos pályámon! Külön szeretném megköszönni igaz barátaimnak, és harcostársaimnak, a WJSz, és ezen belül különösen a Filozófiaseminárium tagjainak, hogy egy olyan szellemi és baráti közösséget alkothatunk, amelyben mindannyian építhetjük egymást!

S.D.G.

Irodalomjegyzék

- [1] K. S. Krane. *Introductory nuclear physics*. Wiley, New York, NY, (1988).
- [2] G. Gamow. Zur Quantentheorie des Atomkernes. *Zeitschrift für Physik*, **51**:204–212, (1928).
- [3] N. Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, (2011).
- [4] R. Szilvási and D. P. Kis. Investigation of complex-energy shift in time-dependent perturbed decaying systems. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **55**(27):275301, (2022).
- [5] R. Szilvási and D. P. Kis. Complex energy-based description of alpha decay in intense laser fields. Preprint published on Researchgate, (2023).
- [6] <https://kisfiz.hu/atommagfizika.php?show=energiavolgy>.
- [7] Nuclear fusion and fission, apr 3 (2023). [Online; accessed 2023-09-19].
- [8] E. Rutherford. VIII. Uranium radiation and the electrical conduction produced by it. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **47**(284):109–163, (1899).
- [9] E. Rutherford. XV. The magnetic and electric deviation of the easily absorbed rays from radium. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **5**(26):177–187, (1903).
- [10] International Atomic Energy Agency. Live Chart of Nuclides, (2023). <https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html>.
- [11] E. Merzbacher. The Early History of Quantum Tunneling. *Physics Today*, **55**(8):44–50, (2002).
- [12] L. Mandelstam and M. Leontowitsch. Zur Theorie der Schrödingerschen Gleichung. *Zeitschrift für Physik*, **47**:131–136, (1928).
- [13] H. Geiger and J. M. Nuttall. LVII. The ranges of the α particles from various radioactive substances and a relation between range and period of transformation. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **22**(130):613–621, (1911).

-
- [14] S. A. Gurvitz and G. Kalbermann. Decay width and the shift of a quasistationary state. *Physical Review Letters*, **59**:262–265, Jul (1987).
- [15] L. Szunyogh. Szemelvények a Kvantummechanika 1 előadás anyagából, (2022). <https://www.dropbox.com/s/qu6l0q718hpy4ty/Kvantummechanika1-szemelvenyek.pdf?dl=0>.
- [16] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Clarendon Press, Oxford,, (1930).
- [17] A. I. Baz', Ya. B. Zel'dovich, and A. M. Perelomov. *Scattering, Reactions and Decay in Nonrelativistic Quantum Mechanics*. Moskva, Fiziko-Matematicheskoi Literatury, 1966.
- [18] J. Aguilar and J. M. Combes. A Class of Analytic Perturbations for One-body Schrödinger Hamiltonians. *Communications in Mathematical Physics*, **22**:269–279, (1971).
- [19] E. Balslev and J. M. Combes. Spectral properties of many-body Schrödinger operators with dilatation-analytic interactions. *Communications in Mathematical Physics*, **22**:280–294, (1971).
- [20] A. Csótó, B. Gyarmati, A. T. Kruppa, K. F. Pál, and N. Moiseyev. Back-rotation of the wave function in the complex scaling method. *Physical Review A*, **41**:3469–3477, (1990).
- [21] N. Moiseyev, P. R. Certain, and F. Weinhold. Resonance properties of complex-rotated hamiltonians. *Molecular Physics*, **36**(6):1613–1630, (1978).
- [22] C. R. Harris et al. Array programming with NumPy. *Nature*, **585**(7825):357–362, (2020).
- [23] P. Virtanen et al. and SciPy 1.0 Contributors. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. *Nature Methods*, **17**:261–272, (2020).
- [24] J. D. Hunter. Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering*, **9**(3):90–95, (2007).
- [25] A. Meurer et al. SymPy: symbolic computing in Python. *PeerJ Computer Science*, **3**:e103, (2017).
- [26] W. McKinney. Data Structures for Statistical Computing in Python. In Stéfan van der Walt and Jarrod Millman, editors, *Proceedings of the 9th Python in Science Conference*, pages 56 – 61, (2010).
- [27] R. Hofstadter. Electron Scattering and Nuclear Structure. *Reviews of Modern Physics*, **28**:214–254, Jul (1956).
- [28] R. D. Woods and D. S. Saxon. Diffuse Surface Optical Model for Nucleon-Nuclei Scattering. *Physical Review*, **95**:577–578, Jul (1954).
-

- [29] M. Goeppert-Mayer. On Closed Shells in Nuclei I. *Physical Review*, **74**:235–239, Aug (1948).
- [30] O. Haxel, J. H. D. Jensen, and H. E. Suess. On the „Magic Numbers” in Nuclear Structure. *Physical Review*, **75**:1766–1766, (1949).
- [31] M. Goeppert-Mayer. Nuclear Configurations in the Spin-Orbit Coupling Model. I-II. *Physical Review*, **78**:16–23, (1950).
- [32] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York, ninth dover printing, tenth gpo printing edition, (1964).
- [33] R. Szilvási and D. P. Kis. Complex energy-based description of alpha decay in intense laser fields. Preprint, (2023).
- [34] A. Bohr and B. R. Mottelson. Collective and Individual-Particle Aspects of Nuclear Structure. *Matematisk-fysiske Meddelelser, Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab*, **27**, (1953).
- [35] S. Singh, S. Kumar, B. Singh, and A. K. Jain. Nuclear radius parameters (r_0) for even-even nuclei from alpha decay. *Nuclear Data Sheets*, **167**:1–35, (2020).