KVANTUMMECHANIKAI POTENCIÁLOK VIZSGÁLATA SZÓRÁSELMÉLETI MÓDSZEREKKEL

Akadémiai doktori értekezés

Írta:
Apagyi Barnabás

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Elméleti Fizika Tanszék
2005.

TARTALOMJEGYZÉK

1. A kutatás háttere és célkitűzés

A XX. század 20-as éveiben kidolgozott kvantummechanika megmutatta, hogy a fizika egyes klasszikus mennyiségei, mint például a két objektum tömegközéppontja közti távolságtól függő hatóerő, vagy potenciál, csak átlagos (valószínűségi) értelemben léteznek.

Ugyanakkor a kvantummechanika effektív-tér elméletei, mint például az optikai potenciál elméletek, vagy az inverz szórás elméletek, megmutatták, miként lehet leszármaztatni ezen átlagos fizikai mennyiségeket, ha pontos értéküket nem is határozhatjuk meg egzaktul sohasem valós fizikai rendszer esetén.

Kutatási feladatnak ezért azt tűztem ki célul, hogy az összetett kvantumrendszerek közti effektív kölcsönhatások meghatározására szolgáló egyes módszereket, elméleteket továbbfejlesszem annak érdekében, hogy általuk az atom- és magfizikai kölcsönhatások mind pontosabb felderítésére nyíljon lehetőség.

A kölcsönhatások meghatározásának két lehetséges alapvető megközelítése, a kötött állapotok és a szórási állapotok vizsgálata közül az utóbbival foglalkozom behatóbban, s ezen belül is a nemrelativisztikus, tehát viszonylag alacsony energiájú ütközésekkel. Olyan ütközéseket vizsgálok, amelyekben mindig csak két fragmentum vesz részt. Alacsony energián indokolt ez a közelítés, mert ionizáció (break-up) csak magasabb energián, az ún. felbomlási küszöb felett valósulhat meg. A lehetséges rugalmatlan, illetve átrendeződéses folyamatokat a potenciál abszorpciós részével veszem figyelembe, de végzek vizsgálatot a reakciófolyamatokat kormányozó valós potenciálok inverz módszerrel történő meghatározására is.

A szóráselméleti módszerek és kölcsönhatások mind pontosabb ismerete igen fontos mind kísérleti, mind elméleti szempontból, amint azt az alábbi példák is mutatják.

A felső légkörben lejátszódó gerjesztési, ionizációs és rekombinációs folyamatok, amelyeket az elektron-atom, elektron-molekula kölcsönhatás szabályoz, nagy befolyással vannak mind a Föld hőháztartására (globális felmelegedés, ózon probléma, negatív ion formálódás), mind az időjárásra (ciklonok keletkezése). Elektron-atom, elektron-molekula szórással tanulmányozhatók olyan atomi, illetve molekula állapotok, amelyekből vibrációs populácós inverzió révén új típusú lézerek fejleszthetők ki. Ezen atomi/molekula állapotok megismerését teszik lehetővé a fotoionizációs kísérletek is, amelyek elméleti számolására hatásos elméleti módszerek állnak rendelkezésre; olyan módszerek, amelyek a kvantumkémiai szerkezetszámolás teljes arzenálját felhasználják, ugyanakkor a kontínuumba ionizálódott részecskét szóráselméleti variációs módszerekkel (pl. Schwinger variációs módszer) kezelik. Itt igen fontos tényező a módszer pontossága, ha olyan állapotot tanulmányozunk, amelyre vonatkozóan nincs, vagy nem végezhető kísérlet. Bemutatom, hogy sikerült egy olyan direkt szórás módszert kifejleszteni, amely minden eddigi módszernél pontosabb értéket szolgáltat az elektron-hidrogénatom ütközés fázistolásaira és ugyanakkor mentes a számítási eredményeket néha félrevívő hamis szingularitásoktól.

Magashőmérsékletű szupravezetők elméleti vizsgálatában fontos szerepe van a sávszerkezet számolásra kifejlesztett szóráselméleti módszereknek (lmto, kkr-cpa), és ezen számolások eredményei érzékenyen függnek az anyagot (ez esetben speciális kerámiát) alkotó atomok törzse és a vezetési sávot létrehozó elektronok kölcsönhatását jellemző fázistolásoktól. Ezen kölcsönhatásokat általában ún. muffin-tin közelítésben veszik figyelembe, azonban az elektromos dipol polarizáció esetleg fontos hosszúhatótávolságú effektusokat eredményezhet. A polarizációs potenciál fázistolást módosító szerepével kapcsolatos vizsgálatokat az inverz szórás keretein belül eddig tudomásom szerint rajtam kívül még nem végzett senki.

Az atommagok szerkezetét, nívósémáját feltáró nehéz-ion kísérleteket továbbra is végeznek, elsősorban az egzotikus magok megismerése céljából (pl. neutrondús magok, szupernehéz elemek), de egy erős lézerforrás (röntgenlézer) lehetősége is benne rejlik a kutatásokban. Jóllehet a klasszikus magfizika manapság veszített az iránta érdeklődők táborából, számtalan megoldatlan kérdés tisztázása várat magára. Így például az az egyszerű alapkérdés is, hogy milyen a kölcsönhatás térbeli alakja két ütköző atommag között. A dolgozatban bemutatom, hogy a kvantum inverz szóráselmélet ennek a kérdésnek egy szeletére választ adhat.[1] Az atommagok kölcsönhatásainak részletesebb feltárása továbbra is fontos a radioaktivitás, a maghasadás, és az energiatermelés egyes kérdéseinek pontosabb megismerése szempontjából.

[1] Érdemes megjegyezni, hogy a kvantum inverz szórás egyik lényeges elemét képezi az inverz szórás transzformációnak, amely lehetővé tette a szolitonoknak (nemlineáris evolúciós parciális differenciál egyenletek stabil, részecskeszerű, haladóhullámú megoldásainak) a felfedezését. A szolitonoknak a műszaki és elméleti fizika sok területén jelentős szerep jut (optikai szálak, szökőárak, ciklonok, elemi részecskék leírása, szuperfolyékonyság, stb.)

Ugyanakkor az atomi/molekuláris rendszerek közti kölcsönhatások megismerése egyre közelebb visz bennünket a kémiai reakciók tervezhetőségéhez, amely jelentősége egészségügyi (gyógyszervegyészet), táplálkozástudományi (enzimek szerepe), genetikai, stb. szempontból beláthatatlan távlatokkal kecsegtet. Ugyanígy, az új anyagok gyártása, az anyagtudomány, a nanotechnológia, a félvezető ipar, a szerves vezetők fejlesztése stb, mind igénylik ezen atomi/molekuláris kölcsönhatások ismeretét, modellezését.

Mindezek alapján az alábbi három konkrét területet választottam ki kutatásom céljául:

Magreakciók leírása klaszter modellel [T1/1-3];[2]

Szóráselméleti variációs módszerek továbbfejlesztése és alkalmazása direkt szórásproblémák megoldására [T2/1-4];

Az inverz szóráselmélet módszereinek továbbfejlesztése és alkalmazása atom- és magfizikai kölcsönhatások meghatározására [T3/1-10].

[2] A tézisekben összefoglalt eredményeket tartalmazó cikkekre [T1/...], [T2/...], ... megjelöléssel, az általános irodalomra pedig [1], [2], ... felül indexelt számozással hivatkozom. (Ez utóbbi nem tévesztendő össze a néhány helyen előforduló lábjegyzet számozással.)

2. Magreakciók leírása klaszter modellel

Mivel korábbi munkásságom folytatásaként a transzfer reakciókkal még behatóbban szerettem volna foglalkozni, meg kellett vizsgálni a magreakció leírások elméleteit. Céljaimnak leginkább a rezonáló csoport módszer (rgm) felelt meg, mert ebben a leírásban a transzlációt végző tömegközéppont eleve nem szerepel, így a tömegközéppont mozgásából adódó ún. szellemállapotokat nem kell kitranszformálni. A módszer alapfeltevése az, hogy a két fragmentumból álló rendszer teljes hullámfüggvényét a fragmentumok szerkezetét leíró és ismertnek feltételezett belső hullámfüggvény, valamint a két fragmentum egymáshoz viszonyított mozgását jellemző relatív hullámfüggvény szorzatának sorozatából lehet felépíteni. A belső (vagy csatorna) hullámfüggvényben a klaszterek különböző partíciókban fordulhatnak elő s ezek az elosztás csoportok azonos energiához tartoznak, energetikailag egymással rezonálnak – innen az elnevezés. A módszert még csatolt reakció csatornák (crc) módszerének, vagy a atomfizikában szoros-csatolás módszernek (close-coupling) is szokták hívni.

Ezen kétfragmentumos magreakció elméletnek egy újszerűnek mondható, de mindenképpen kompaktnak tekinthető formulázását vázolom a következő pontban az említett csatolt csatornás klaszter modell közelítésben.

2.1 Csatolt reakció csatornák módszere

A teljes hullámfüggvényt kifejtjük az összes lehetséges δ két-fragmentumos állapotok szuperpozíciójaként [T1/1]:

$$\Psi^I = \sum_{\delta n} \frac{1}{\sqrt{N^\delta}} \mathcal{A}^\delta R_n^{\delta I}(r_\delta)\psi_n^{\delta I}(\hat{\mathbf{r}}_\delta, \xi_\delta), \tag{1}$$

ahol $\mathcal{A}^\delta$ antiszimmetrizál az azonos nukleonokra az A_1^δ és A_2^δ nukleont tartalmazó fragmentumok között, és ez a művelet a P_q^δ permutációs operátorral a következőképpen fejezhető ki:

$$\mathcal{A}^\delta = 1 + \sum_{q=1} \varepsilon_q^\delta P_q^\delta \qquad \varepsilon_q^\delta = \pm 1. \tag{2}$$

Az N^δ normálási faktor

$$N^\delta = A!/(A_1^\delta!)(A_2^\delta)! \tag{3}$$

az (1)-es kifejtésben fellépő tagok számával egyenlő, ahol A a teljes nukleonszámot jelöli.

Az $R_n^{\delta I}$ radiális hullámfüggvény a fragmentumok szórási és kötött állapotát jellemzi, és a fragmentumok tömegközéppontját összekötő r_δ relatív távolságtól függ.

A $\psi_n^{\delta I}$ csatorna hullámfüggvényt felírhatjuk a pályamozgást leíró gömbfüggvény és a fragmentumok belső állapotait jellemző struktúra függvény direkt szorzataként:

$$\psi_n^{\delta I} = [Y^l(\hat{\mathbf{r}}_\delta) \otimes \Phi_\kappa^{\delta J}(\xi_\delta)]^{[I]} \qquad n = (l, \kappa, J), \tag{4}$$

amely felírásból látható, hogy I a rendszer teljes impulzusmomentumát (csatorna spin) jelöli.

A struktura függvények a δ fragmentációhoz tartozó H_δ belső Hamilton operátor sajátfüggvényei:

$$H_\delta \Phi_\kappa^{\delta J} = E_{\kappa J}^\delta \Phi_\kappa^{\delta J}, \tag{5}$$

$$H_\delta = H_{A_1^\delta} + H_{A_2^\delta} \tag{6}$$

Lokális effektív kétrészecske potenciálokat feltételezve a nukleonok között, a teljes Hamilton operátor tetszőleges δ fragmentáció esetén három részből áll: a H_δ belső Hamilton operátorból és a relatív mozgás T_δ kinetikus, illetve V_δ potenciális energia operátorából:

$$H = H_\delta + T_\delta + V_\delta, \tag{7}$$

ahol tehát

$$V_\delta = \sum_{i \in A_1^\delta, j \in A_2^\delta} v_{ij}. \tag{8}$$

Fenti definíciókat beírva a

$$(H - E)\Psi^I = 0 \tag{9}$$

Schrödinger egyenletbe, az alábbi csatolt integro-differenciál egyenletrendszert kapjuk az $R_n^{\delta I}(r)$ radiális hullámfüggvények meghatározására:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_\delta} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu_\delta r^2} + V_{nn}^{\delta I}(r) + E_{\kappa J}^\delta - E \right) R_n^{\delta I}(r)$$

$$= -\sum_{n'\neq n} V_{nn'}^{\delta I}(r) R_{n'}^{\delta I}(r) - \sum_{\delta' n'} \int r'^2 dr' K_{nn'}^{\delta\delta' I}(r,r') R_{n'}^{\delta' I}(r'), \qquad (10)$$

ahol a lokális potenciálokat a következő, sok dimenziós integrál kiszámításával kapjuk:

$$V_{nn'}^{\delta I} = \left\langle \psi_n^{\delta I}(\hat{r}_{r\delta}, \xi_\delta) | V_\delta | \psi_{n'}^{\delta I}(\hat{r}_{r\delta}, \xi_\delta) \right\rangle, \qquad (11)$$

a nemlokális kerneleket pedig a következő kompakt formában írhatjuk:

$$K_{nn'}^{\delta\delta' I} = \left(\frac{N^\delta}{N^{\delta'}} \right)^{1/2} \left\langle \frac{\delta(r_\delta - r)}{r^2} \psi_n^{\delta I} | H - E | (\mathcal{A}^{\delta'} - \delta_{\delta\delta'}) \frac{\delta(r_{\delta'} - r')}{r'^2} \psi_{n'}^{\delta' I} \right\rangle. \qquad (12)$$

Az utóbbi kifejezésben előforduló δ függvényeknek az a hatásuk, hogy az $\mathbf{r}_\delta$ és $\mathbf{r}_{\delta' q} = P_q^{\delta'} \mathbf{r}_{\delta'}$ relatív koordinátákra való integrálást eliminálja és e koordinátákat r, illetve r' változókkal helyettesíti.

A kernel a következő hermitikus tulajdonsággal rendelkezik:

$$K_{nn'}^{\delta\delta' I}(r,r') = K_{n'n}^{\delta'\delta I*}(r',r). \qquad (13)$$

A kernelben a potenciálokból eredő nemlokalitás mellett jelen van a csatorna hullámfüggvények nemortogonalitásából eredő nemlokális hatás is, ami a következő felírásból jól látszik:

$$K_{nn'}^{\delta\delta' I}(r,r') = \mathcal{N}_{nn'}^{\delta\delta' I}(r,r') g_{\delta' n'}(r') + \mathcal{V}_{nn'}^{\delta\delta' I}(r,r'), \qquad (14)$$

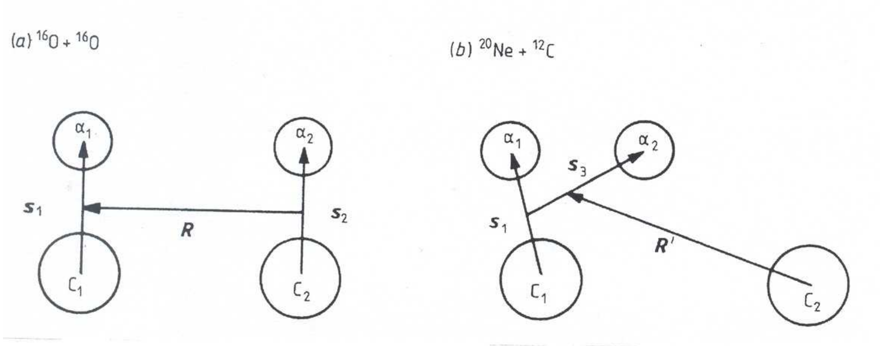
ahol

$$\left\{ \begin{matrix} \mathcal{N}_{nn'}^{\delta\delta' I} \\ \mathcal{V}_{nn'}^{\delta\delta' I} \end{matrix} \right\} = \left(\frac{N^\delta}{N^{\delta'}} \right)^{1/2} \left\langle \frac{\delta(r_\delta - r)}{r^2} \psi_n^{\delta I} | (\mathcal{A}^{\delta'} - \delta_{\delta\delta'}) \left\{ \begin{matrix} 1 \\ V_{\delta'} \end{matrix} \right\} \frac{\delta(r_{\delta'} - r')}{r'^2} \psi_{n'}^{\delta' I} \right\rangle, \qquad (15)$$

$$g_{\delta' n'}(r') = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\delta'}} \frac{1}{r'} \frac{d^2}{dr'^2} r' + \frac{l'(l'+1)\hbar^2}{2\mu_{\delta'} r'^2} + E_{\kappa' J'}^{\delta'} - E. \qquad (16)$$

2.2 Lokális és nemlokális potenciálok számítása

Az előző pontban szereplő lokális és nemlokális potenciálok kiszámítása sokdimenziós integrálások elvégzését teszik szükségessé. Általában egy $n+1$ klaszterből álló modell esetén $3n-1$ dimenziós integrált kell kiszámítani a lokális potenciálokra, és $3n-2$-szeres integrálás elvégzése szükséges a nemlokális potenciálok meghatározásához. Ez a feladat még a mai számítógép kapacitás mellett is megterheli a gépet, adott (pl. gépi) pontosság betartása esetén.



1. ábra. Relatív és klaszteren belüli koordináták definíciója: (a) $^{16}\mathrm{O} +^{16}\mathrm{O}$, (b) $^{20}\mathrm{Ne} +^{12}\mathrm{C}$

Tekintsünk egy konkrét modellt, a két ^{12}C- és α-klaszterből álló modellt, amellyel a $^{16}\mathrm{O}(^{16}\mathrm{O},^{12}\mathrm{C})^{20}\mathrm{Ne}$ alfa-transzfer reakciót kívánjuk leírni. A bemenő és kijövő csatornabeli konfigurációt az 1. ábrán vázoltam. A megfelelő csatorna hullámfüggvények, a szükséges szimmetrizációk figyelembe vétele nélkül, a következők:

$$\psi^{I}_{^{16}\mathrm{O}+^{16}\mathrm{O}} = \Phi_{\mathrm{C}\alpha}(s_1)\Phi_{\mathrm{C}\alpha}(s_2)Y^{I}_{M}(\hat{R})/4\pi, \tag{17}$$

$$\psi^{I}_{^{20}\mathrm{Ne}+^{12}\mathrm{C}} = \Phi_{\mathrm{C}\alpha}(s_1)\Phi^{J=0}_{\mathrm{O}\alpha}(s_3)Y^{I}_{M}(\hat{R}')/4\pi, \tag{18}$$

ahol a csatorna spint a relatív mozgás pálya impulzusmomentuma adja meg, mivel az egyszerűség kedvéért alapállapoti klaszter konfigurációkat tekintünk (ezt a tényt a kimeneti csatorna esetén külön is jelöltem).

A következőkben egy lokális és egy nemlokális potenciál számíthatóságát vizsgáljuk meg az adott klaszter modell keretén belül. A bemenő csatornában a direkt (nem szimmetrizált) lokális effektív potenciál a (11) alatti definícó és az 1. ábra alapján a következőképpen írható:

$$V_{eff}^{\mathrm{O-O}}(r) = \int \mathrm{d}^3\,\mathbf{R}\mathrm{d}^3\,\mathbf{s}_1\mathrm{d}^3\,\mathbf{s}_2 \psi^{I*}_{^{16}\mathrm{O}+^{16}\mathrm{O}}\, V\, \psi^{I}_{^{16}\mathrm{O}+^{16}\mathrm{O}} \delta(R-r)/R^2, \tag{19}$$

ahol a csatorna hullámfüggvényt (17) adja, a V potenciált pedig, lokális klaszter potenciálokat feltételezve a klaszterek között, a következőképpen kell felvenni :

$$\begin{aligned} V = {} & V_{\mathrm{C_2C_1}}(|\mathbf{R} - \frac{1}{4}\mathbf{s}_1 + \frac{1}{4}\mathbf{s}_2|) + V_{\alpha_2\mathrm{C}_1}(|\mathbf{R} - \frac{1}{4}\mathbf{s}_1 - \frac{3}{4}\mathbf{s}_2|) \\ & + V_{\mathrm{C}_2\alpha_1}(|\mathbf{R} + \frac{3}{4}\mathbf{s}_1 + \frac{1}{4}\mathbf{s}_2|) + V_{\alpha_2\alpha_1}(|\mathbf{R} + \frac{3}{4}\mathbf{s}_1 - \frac{3}{4}\mathbf{s}_2|). \end{aligned} \tag{20}$$

A csatorna hullámfüggvények nemortogonalitásából adódó direkt (kicserélődés nélküli) nemlokális potenciál pedig a következőképpen írható:

$$\mathcal{N}^I(r, r') = \int \mathrm{d}^3\,\mathbf{R}\mathrm{d}^3\,\mathbf{s}_1\mathrm{d}^3\,\mathbf{s}_2 \frac{\delta(R-r)}{R^2}\frac{\delta(R'-r')}{R'^2} \psi^{I*}_{^{16}\mathrm{O}+^{16}\mathrm{O}} \psi^{I}_{^{20}\mathrm{Ne}+^{12}\mathrm{C}} \tag{21}$$

A fenti példák jól mutatják, hogy az integrálok kiszámítására érdemes valamilyen egyszerűsítő eljárást bevezetni.

A fellépő bonyolult, sokdimenziós integrálok elvégzésére általánosított multipol sorfejtési eljárást javasolok. Ez az eljárás alkalmas olyan hullámfüggvények vagy potenciálok impulzusmomentum sajátfüggvények szerint haladó multipol sorba való fejtésére, amelyek tetszőleges számú vektor lineárkombinációjától függenek. A multipol sorfejtés együtthatói általában kétdimenziós integrálok, amelyek az eredeti függvény Fourier-transzformáltját és szférikus Bessel-függvények szorzatát tartalmazzák az integrandusban. Ezt a kétdimenziós integrált sikerül analitikusan is kiértékelnem az eredeti hullámfüggvényre vonatkozó Fourier-Bessel, illetve Dini kifejtési technika alkalmazásával. Az így rendkívül hatásossá (egyszerűvé) váló multipol sorfejtési eljárást alkalmazom a fenti szén-alfa klaszterből összetettnek gondolt oxigén atommag ütközések leírásánál jelentkező matrixelemek kiértékelésére. A módszer teljesítőképességére jellemző, hogy az itt fellépő, tipikusan 8-dimenziós integrálokat gyorsan konvergáló egydimenziós integrálok sorozatának kiszámítására vezeti vissza.

2.3 Multipol sorfejtéses eljárás

Egy $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i \mathbf{r}_i$ vektor összegtől függő, az $Y_m^l(\hat{r})$ gömbfüggvény transzformációs tulajdonságaival rendelkező $\varphi_{\kappa lm}$ hullámfüggvény a következőképpen fejthető multipol sorba az $\hat{r}_i$ irányokat tartalmazó $Y_{m_i}^{l_i}(\hat{r}_i)$ gömbfüggvények szerint [T1/2]:

$$\varphi_{\kappa lm}\left(\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i \mathbf{r}_i\right) = (4\pi)^{(n-1)/2} \sum_{l_1 \ldots l_n}^{\infty} g_{l_1 \ldots l_n}^{l}(\gamma_1 r_1, \ldots, \gamma_n r_n)$$
$$\times \sum_{\lambda_2 \ldots \lambda_{n-1}} D_{l_1 l_2}^{\lambda_2} D_{\lambda_2 l_3}^{\lambda_3} \ldots D_{\lambda_{n-1} l_n}^{\lambda_n = l} [\ldots [[Y^{l_1}(\hat{r}_1) \otimes Y^{l_2}(\hat{r}_2)]^{l_2} \otimes Y^{l_3}(\hat{r}_3)]^{\lambda_3} \ldots]_m^l, \qquad (22)$$

ahol

$$\varphi_{\kappa lm}(\mathbf{r}) = \Phi_{\kappa l}(r) Y_m^l(\hat{r}) \qquad (23)$$

$$D_{l_1 l_2}^{\lambda} = (-1)^{l_1 + l_2} \hat{l}_1 \hat{l}_2 \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (24)$$

$$Y_m^l(\hat{r}) = (-i)^l Y_{lm}(\hat{r}). \qquad (25)$$

Itt az Y_{lm} függvények a szokásos gömbfüggvényeket[1] jelölik . A $g_{l_1 \ldots l_n}^{l}$ függvények a következő integrálból számíthatók:

$$g_{l_1 \ldots l_n}^{l}(\gamma_1 r_1, \ldots, \gamma_n r_n) = \frac{2}{\pi} \int_o^{\infty} k^2 \mathrm{d}\, k j_{l_1}(k\gamma_1 r_1) \ldots j_{l_n}(k\gamma_n r_n) \int_0^{\infty} r^2 j_l(kr) \Phi_{\kappa l}(r), \qquad (26)$$

ahol a j_l a szférikus Bessel-függvényt jelöli.

A $g_{l_1 \ldots l_n}^{l}(\gamma_1 r_1, \ldots, \gamma_n r_n)$ általánosított multipol sorfejtési együtthatókban megjelenő kettős integrál miatt úgy gondolhatnánk, hogy eredeti problémánkat, a sokdimenziós potenciál integrálok kiszámítását még tovább bonyolítottuk. Azonban, már a multipol sorfejtés (22) képletében is észrevehettük, hogy ez a sorfejtés $2n$ szögváltozóra való integrálást analitikusan elvégezhetővé tett annak árán, hogy a jelenleg még két integrálást igénylő g együtthatókat meghatározzuk előre. (Természetesen annyi g együtthatóra van szükség, amennyi $\varphi_{\kappa lm}$ függvény előfordul a kiszámítandó lokális ill. nemlokális potenciál integrandusaiban.)

A következő pontban azonban látni fogjuk, hogy maguk a g együtthatók is 'integrálmentesíthetők' a Fourier-Bessel kifejtés megfelelő általánosításával.

2.4 Hullámfüggvények, vagy potenciálok Fourier-Bessel és Dini sorfejtése

Jól ismeretes,[2] hogy egy tetszőleges $f(x)$ függvény egyenletesen konvergens Fourier-Bessel (FB) sorba fejthető a $[0,1]$ intervallumon a következőképpen:

$$f(x) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{\mathrm{FB}} J_\nu(j_m^\nu x), \qquad \nu \geq -\frac{1}{2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \tag{27}$$

ahol a FB együtthatókat az

$$a_m^{\mathrm{FB}} = \frac{2}{J_{\nu+1}^2(j_m^\nu)} \int_0^1 t f(t) J_\nu(j_m^\nu t) \mathrm{d}\, t \tag{28}$$

képlet határozza meg, ahol a $\{j_m^\nu\}$ számsorozat a J_ν Bessel-függvény növekvő sorrendben elrendezett pozitív zérushelyeit jelöli.

Az FB sorfejtésre vonatkozó egyenletes konvergencia egyik feltétele az, hogy $f(1) = 0$ legyen. Ez a feltétel általánosságban nem teljesíthető, ezért célszerű olyan módosításhoz fordulni, amely ezt a megszorítást már nem tartalmazza a függvényre nézve.

Ilyen módosítást végzett el Dini.[2] Egy $f(x)$ tetszőleges függvény Dini sorfejtése a következő formulákkal kapható meg:

$$f(x) = B_0(x) + \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{\mathrm{D}} J_\nu(k_m^\nu x) \qquad \nu \geq -\frac{1}{2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \tag{29}$$

ahol a Dini-együtthatókat az

$$a_m^{\mathrm{D}} = \frac{2(k_m^\nu)^2}{[(k_m^\nu)^2 - \nu^2] J_\nu^2(k_m^\nu) + (k_m^\nu)^2 J_\nu'^2(k_m^\nu)} \int_0^1 t f(t) J_\nu(k_m^\nu t) \mathrm{d}\, t \tag{30}$$

formulából számolhatjuk, ahol az $m-$szerint növekvő sorrendbe rendezett k_m^ν állandókat viszont a

$$z^{-\nu} \left(z J_\nu'(z) - \frac{f'(1)}{f(1)} J_\nu(z) \right) = 0 \tag{31}$$

kifejezés pozitív zérus helyei adják meg.

A (29) kifejtésben megjelenő B_0 'induló' taggal ritkán kell foglalkozni, mert csak $-f'(1)/f(1)+\nu>0$ esetén ad járulékot, ezért a konkrét alakját[2] most nem idézzük.

Az egzakt (29) kifejtést $N \sim 10-15$ taggal elegendő figyelembe venni ahhoz, hogy a számítógépi pontosságot elérjük. Közelítsük az előző pontbeli $\Phi_{\kappa l}$ függvényt N tagot tartalmazó Dini sorfejtéssel:

$$\Phi_{\kappa l}^{appr}(r)=\sum_{\nu=1}^{N} b_\nu^{\mathrm{D}} j_l(\beta_\nu r), \qquad 0\le r\le R, \tag{32}$$

ahol b_ν^D a (30)-as együtthatókkal, β_ν a (31)-es kifejezéssel kapcsolatos, növekvő sorrendben elhelyezett zérushelyeket jelöl, R pedig egy olyan maximális radiális koordinátát jelöl, amelyen kívül $\Phi_{\kappa l}$ (és így $\Phi_{\kappa l}^{appr}$ is) már elhanyagolhatóan kicsiny. E kifejezést behelyettesítve a multipol sorfejtés g együtthatóját meghatározó (26) összefüggés második integráljába, és kihasználva a Bessel függvényekre vonatkozó

$$\int_0 r^2 \mathrm{d}\, r j_l(rk) j_l(rk') = \frac{\pi}{2}\frac{\delta(k-k')}{kk'} \tag{33}$$

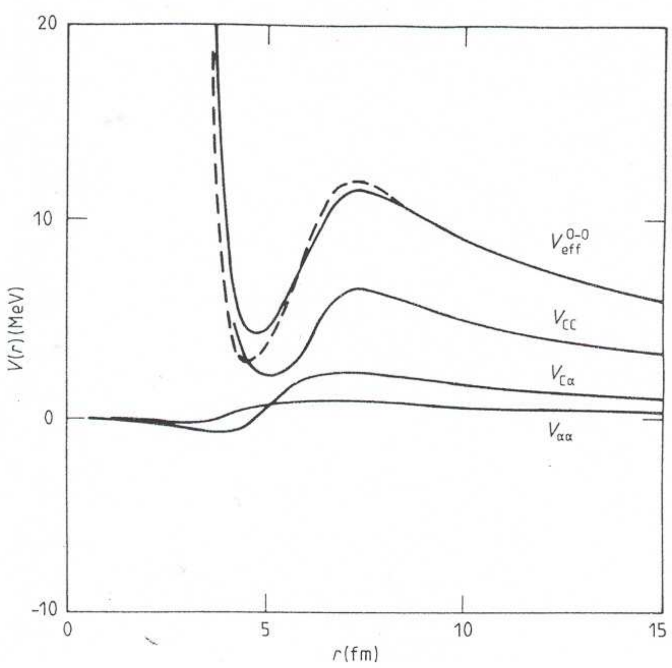
ortogonalitási feltételt, analitikus kifejezést nyerünk a multipol sorfejtési g együtthatókra:

$$\begin{aligned} & g^{l}_{l_1\ldots l_n}(\gamma_1 r_1,\ldots,\gamma_n r_n) \\ &= \frac{2}{\pi}\int_o^\infty k^2 \mathrm{d}\, k j_{l_1}(k\gamma_1 r_1)\ldots j_{l_n}(k\gamma_n r_n)\sum_{\nu=1}^{N} b_\nu^{\mathrm{D}}\int_0^\infty r^2 j_l(kr) j_l(\beta_\nu r) \\ &= \sum_{\nu=1}^{N} b_\nu^{\mathrm{D}} j_{l_1}(\beta_\nu\gamma_1 r_1) j_{l_2}(\beta_\nu\gamma_2 r_2)\ldots j_{l_n}(\beta_\nu\gamma_n r_n), \end{aligned} \tag{34}$$

ahol minden információt az aktuális (kötött állapoti) hullámfüggvényről a b_ν^D együtthatók hordoznak.

Mindezen eszközök felhasználásával, az előző pontban vizsgált hét dimenziós integrálás mindössze egydimenziós integrálást tartalmazó formára egyszerűsödik le:

$$\begin{aligned} V_{eff}^{\mathrm{O-O}}(r) &= \sum_{\nu=1}^{N}\Big(b_\nu^{\mathrm{D}}(\mathrm{CC}) j_0(\beta_\nu^{\mathrm{CC}} r) I_0^2(\frac{1}{2}\beta_\nu^{\mathrm{CC}}) \\ &+2 b_\nu^{\mathrm{D}}(\mathrm{C}\alpha) j_0(\beta_\nu^{\mathrm{C}\alpha} r) I_0^2(\frac{1}{4}\beta_\nu^{\mathrm{C}\alpha}) + b_\nu^{\mathrm{D}}(\alpha\alpha) j_0(\beta_\nu^{\alpha\alpha} r) I_0^2(\frac{3}{4}\beta_\nu^{\alpha\alpha})\Big), \end{aligned} \tag{35}$$



2. ábra. Klaszter potenciálok, $V_{CC}, V_{\alpha\alpha}, V_{C\alpha}$ és a (35), (36) egyenletekkel definiált $V_{eff}^{\mathrm{O-O}}(r)$ effektív potenciál (legfelső folytonos görbe). Szaggatott vonal jelöli az egyszerű összeadással kapott $V_{CC} + 2V_{C\alpha} + V_{\alpha\alpha}$ potenciált.

ahol az I_0 integrált a

$$I_0(x) = \int_0^\infty s^2 \mathrm{d}\, s \phi_{\mathrm{C}\alpha}^2 j_0(xs) \tag{36}$$

kifejezés definiálja, az b_ν^{D} és β_ν konstansok pedig a megfelelő, adott CC, Cα, $\alpha\alpha$ potenciálokra vonatkozó Dini-kifejtési együtthatókat, illetve zérushelyeket jelölik.

A csatorna hullámfüggvények nemortogonalitásából eredő (direkt) nemlokális potenciál az

$$\mathcal{N}(r,r') = \left(\frac{5}{2}\right)^3 \int \mathrm{d}\,\hat{r} \mathrm{d}\,\hat{r}' \Phi_{C\alpha}^*(|-2\mathbf{r} + \frac{5}{2}\mathbf{r}'|) \Phi_{O\alpha}^{J=0}(|-\frac{5}{2}\mathbf{r} + \frac{15}{8}\mathbf{r}'|) Y_M^{I*}(\hat{r}) Y_M^I(\hat{r}')/4\pi$$

$$= \left(\frac{5}{2}\right)^3 \sum_{l_1 l_2} (-1)^{l_1 l_2} (2l_1+1)(2l_2+1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & I \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2$$

$$g^{\mathrm{O}*}_{l_1 l_1 0}(-2r, \frac{5}{2}r', 0) g^{\mathrm{Ne}}_{l_2 l_2 0}(-\frac{5}{2}r, \frac{15}{8}r', 0) \tag{37}$$

egyszerű formába írható át, ami már nem tartalmaz integrálást és ahol az O, ill. Ne felső index azt jelenti, hogy a megfelelő g multipol együttható a $\phi_{\mathrm{C}\alpha}$, illetve a $\phi^{J=0}_{\mathrm{O}\alpha}$ klaszter függvényhez tartozik.

2.5 Nemlokális potenciálok lokalizálása

Tekintettel arra, hogy az azonos részecskék/klaszterek közötti kicserélődési szimmetria, illetve a reakciócsatornák figyelembevétele nemlokális potenciálok felléptére vezet, e téma keretén belül érdemes azt is vizsgálni, hogy miként interpretálhatók a fellépő nemlokális potenciálok. Mivel általában csak lokális potenciálok hatását tudjuk elképzelni, ezért többféle lokalizációs eljárást fejlesztettek ki a 80-as években. Ezek közül az általam bevezetett Taylor sorfejtésre alapozott eljárást egy 2000-ben megjelent összefoglaló műben[3] külön fejezetben ismertetik.

Ebben az alfejezetben lokalizációs eljárásom egy továbbfejlesztett változatával [T1/3] ismerkedünk meg egy csatorna esetén, amikor a nemlokalitás kizárólag a kicserélődési effektusból származik.

Egy csatorna esetén a δ fragmentációs indexre és az n gerjesztési állapotokra vonatkozó összegzés, valamint ezen jelek explicit feltüntetése elhagyható. Egyedüli kvantumszámunk az ütközés relatív pályamomentumát jellemző l impulzusmomentum kvantumszám lesz. Bevezetve továbbá az $R_l(r) = f_l(r)/r$ jelölést a radiális szórási függvényre, (10) alatti egyenletrendszerünk a következő, nemlokális potenciált tartalmazó Schrödinger egyenletetre redukálódik:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\,r^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2} + V_D(r) - E\right) f_l(r)$$

$$+ \int_0^\infty \tilde{K}_l(r,r') f_l(r') \mathrm{d}\,r' = 0, \tag{38}$$

ahol tehát V_D a lokális direkt potenciált jelenti, $\tilde{K}_l$ pedig a kicserélődésből eredő nemlokális potenciál.

Ez a nemlokális potenciál összefügg az előző pontban bevezetett nemlokális kernellel, valamint szintén rendelkezik hermitikus tulajdonsággal:

$$\tilde{K}_l(r,r') = rK_l(r,r')r' = \tilde{K}_l^\dagger(r',r). \tag{39}$$

A nemlokális potenciál lokalizációjára kétféle szempontból is szükség lehet: egyrészt a direkt potenciált módosító hatását így jobban tudjuk értelmezni, másrészt a csak lokális potenciálokat tartalmazó Schrödinger egyenletet sokkal könnyebb megoldani, mint a nemlokáis potenciált is tartalmazót.

Taylor sorfejtési technikát alkalmazva a radális függvényre $r'-r \sim 0$ környezetében:

$$f_l(r') = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \frac{(r'-r)^\lambda}{\lambda!}\partial_r^\lambda f_l(r), \tag{40}$$

formálisan elérhetjük, hogy a (38) alatti Schrödinger egyenletben a nemlokális potenciált tartalmazó második tag

$$\int_0^\infty \tilde{K}_l(r,r')f_l(r')dr' = \sum_{\lambda=0}^{\infty} W_\lambda^{(l)}(r)f_l(r) \tag{41}$$

alakúvá váljon, ahol

$$W_\lambda^{(l)}(r) = \frac{1}{\lambda!}U_\lambda^{(l)}(r)\partial_r^\lambda, \tag{42}$$

ahol a nemlokális potenciál momentumait a

$$U_\lambda^{(l)} = \int_0^\infty \tilde{K}_l(r,r')(r'-r)^\lambda dr' \tag{43}$$

kifejezéssel definiáltuk.

Mármost a (41)-ben definiált operátor összeg hermitikus, az egyes $W_\lambda^{(l)}$ operátorok viszont nem azok. Mivel a gyakorlatban csak véges sorfejtést tudunk végrehajtani, a (41)-beli összeg minden egyes tagját külön-külön hermitikussá tesszük a következő módon:

$$W_\lambda^{(l)}(r) = \frac{1}{2}\frac{1}{\lambda!}\left(U_\lambda^{(l)}(r)\partial_r^\lambda + (-1)^\lambda\partial_r^\lambda U_\lambda^{(l)*}(r)\right) = W_\lambda^{(l)\dagger}(r). \tag{44}$$

Harmadrendig kiírva a lokalizált potenciálokat, kapjuk:

$$W_0^{(l)}(r) = U_0^{(l)}(r), \tag{45}$$

$$W_1^{(l)}(r) = -\frac{1}{2}U_1^{(l)\prime}(r), \tag{46}$$

$$W_2^{(l)}(r) = \frac{1}{4}U_2^{(l)\prime\prime}(r) + \frac{1}{2}U_2^{(l)\prime}(r)\partial_r + \frac{1}{2}U_2^{(l)}(r)\partial_r^2, \tag{47}$$

$$W_3^{(l)}(r) = -\frac{1}{12}U_3^{(l)\prime\prime\prime}(r) - \frac{3}{12}U_3^{(l)\prime\prime}(r)\partial_r - \frac{3}{12}U_3^{(l)\prime}(r)\partial_r^2, \tag{48}$$

ahol $'$ az r szerinti deriválást jelöli és az U_λ momentumokat valósnak tételeztük fel. Egyszerű számolással meggyőződhetünk arról, hogy a fenti $W_i^{(l)}$, $i = 0, 1, 2, 3$ potenciálok, bár nem látszik róluk közvetlenül, valóban hermitikusak.

Egy érdekessége a harmadrendű tagnak az, hogy nem tartalmaz deriválást harmadrendben, az a számolás során kiesett.

Ez a tény lehetőséget ad arra, hogy egy Schrödinger egyenlethez hasonló egyenletet származtassunk le, harmadrendig elmenve a (41)-es Taylor sorfejtésben. A (45)-(48) alatti operátorokat (41)-be, majd ezt (38)-ba helyettesítve kapjuk:

$$A_l(r)\frac{\mathrm{d}^2 f_l(r)}{\mathrm{d}\, r^2} + B_l(r)\frac{\mathrm{d}\, f_l(r)}{\mathrm{d}\, r} + \Big(C_l(r) - E\Big) f_l(r) = 0, \tag{49}$$

ahol most $f_l(r)$ a (38) egyenletben fellépő igazi hullámfüggvény közelítését jelenti. A bevezetett új $A_l(r)$, $B_l(r)$, and $C_l(r)$ függvények a következő képletekből számolhatók:

$$A_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu} + \frac{1}{2}U_2^{(l)} - \frac{3}{12}U_3^{(l)\prime} \equiv -\frac{\hbar^2}{2\tilde{M}_l(r)}, \tag{50}$$

$$B_l = \frac{1}{2}U_2^{(l)\prime} - \frac{3}{12}U_3^{(l)\prime\prime} = A_l', \tag{51}$$

$$C_l = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2} + V_D(r) + U_0^{(l)} - \frac{1}{2}U_1^{(l)\prime} + \frac{1}{4}U_2^{(l)\prime\prime} - \frac{1}{12}U_3^{(l)\prime\prime\prime}. \tag{52}$$

A következőkben a (49) alatti egyenletet 'igazi' Schrödinger egyenletté transzformáljuk, amiben konstans μ tömeg jelenik meg, és nincs elsőrendű derivált [lévén $f(r)$ a radiális hullámfüggvény]. Ezt a célt egy $T_l(r)$ transzformáció bevezetésével valósítjuk meg, aminek a definíciója a következő:

$$T_l(r) f_l(r) = \tilde{f}_l(r), \qquad T_l(r \to \infty) = 1. \tag{53a}$$

Annak feltétele, hogy az $\tilde{f}_l'$ első derivált eltűnjön a (49) egyenletből, egy elsőrendű differenciálegyenletet eredményez a $T_l(r)$ transzformációs függvényre vonatkozóan:

$$T_l'/T_l = B_l/(2A_l). \tag{53b}$$

Ezen manipulációval a Schrödinger egyenletet a kívánt formában kaptuk meg:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\tilde{f}_l'' + \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2} + \tilde{V}_l - E\right)\tilde{f}_l = 0, \tag{54}$$

ahol a 'lokalizált' potenciál:

$$\tilde{V}_l = E - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{C_l - E}{A_l} - \frac{1}{4}\left(\frac{B_l}{A_l}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{B_l' A_l - B_l A_l'}{A_l^2}\right], \tag{55}$$

a Taylor sorfejtés harmad rendjéig korrekt.

Könnyű belátni, hogy effektív lokális potenciálunk energia és impulzusmomentum függése kizárólag a nemlokalitásból ered. Ha ugyanis, amint az nagy r távolságokra igaz, az A_l, B_l, C_l függvényekben szereplő $U_\lambda^{(l)}$ függvények zérushoz tartanak, $\tilde{V}_l$ közelíti az eredeti V_D direkt lokális potenciált [ami most $C(r)$-ben van 'elrejtve']. Hasonló megjegyzést lehet tenni az (50) alatt bevezetett távolság és impulzusmomentum függő $\tilde{M}_l(r)$ 'effektív tömeggel' kapcsolatban is.

A fenti lokalizációs eljárás általánosítható több-csatornás esetre. Ekkor az A_l, B_l, C_l mennyiségek matrixokká válnak és függni fognak a δ és n csatorna kvantumszámoktól. Megjegyzendő még, hogy léteznek egzakt lokalizációs eljárások,[4] azonban ezek csak akkor hajthatók végre, ha már rendelkezésre áll (38) két független megoldása. Ezért ezen egzakt eljárások legfeljebb tesztelő szerepet tölthetnek be, hiszen, ha megvan a megoldás, nincs szükség a megoldást, vagy interpretációt könnyítő lokalizációs közelítésre.

2.6 Alkalmazás n$-{}^{40}$Ca szórásra

Alkalmazási példaként tekintsük a n$-{}^{40}$Ca szórásra vonatkozó ún. Frahn-Lemmer nemlokális kernelt[5]

$$\tilde{K}_l(r,r') = 4\pi r r' V(R) H_l(r,r'), \qquad \left(R = \frac{r+r'}{2}\right), \tag{56a}$$

ahol

$$V(R) = \frac{-71}{1+e^{(R-4.17)/0.65}}\,\mathrm{MeV}, \tag{56b}$$

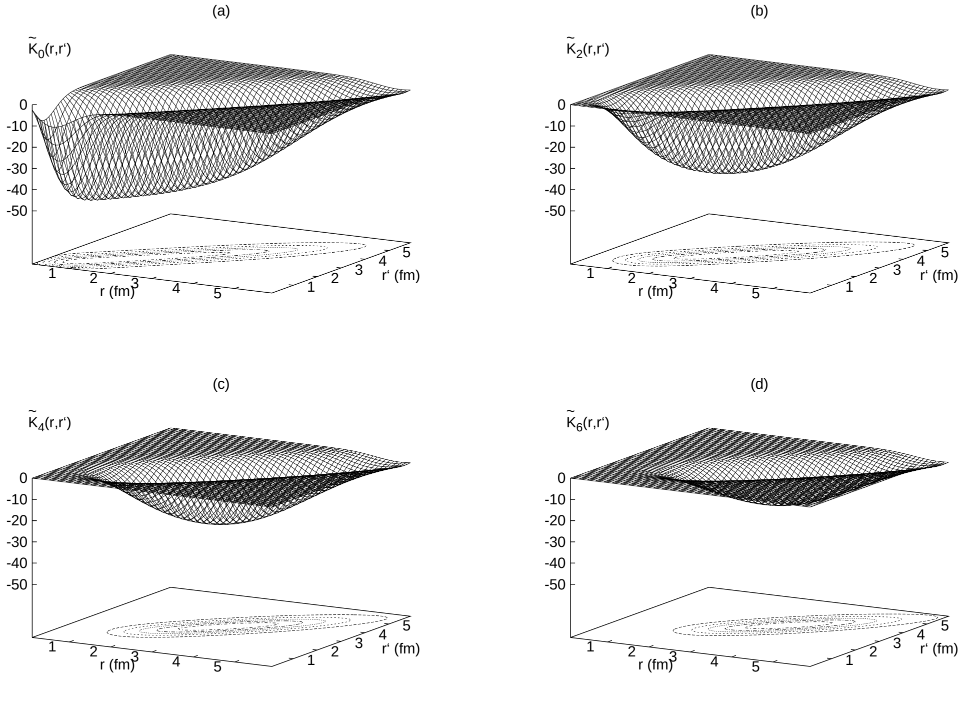
az alakfaktor és

$$H_l(r,r') = \frac{1}{(\pi\gamma^2)^{3/2}} e^{-(r^2+r'^2)/\gamma^2} i_l(2rr'/\gamma^2), \quad (\gamma = 0.85\,\mathrm{fm}^2) \tag{56c}$$

a nemlokalitásból eredő faktor, amelyben i_l a módosított Bessel-függvény. (A fenti képletekben az összes hossz típusú mennyiség fm-ben mérendő).

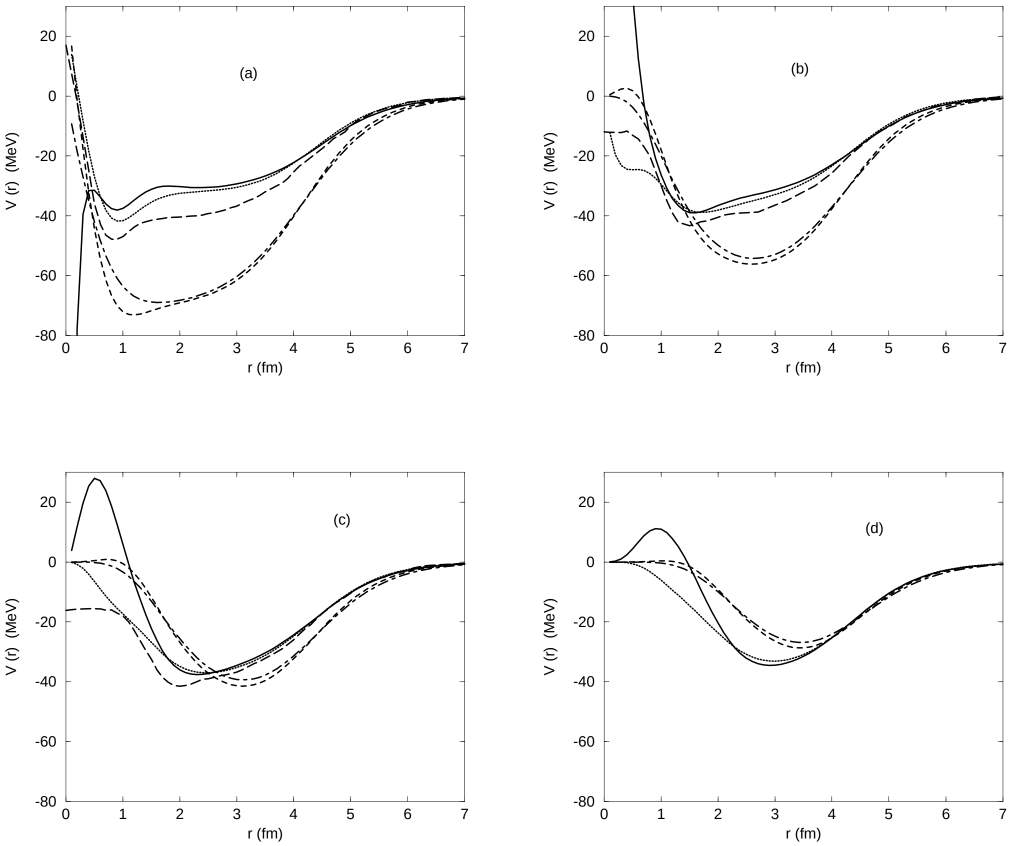
Ez a potenciál realisztikusnak tekinthető, amennyiben a belőle számolt hatáskeresztmetszet jól fitteli az alacsony energiás $n+{}^{40}$Ca szórási adatokat.

A kernelt a 3. ábra szemlélteti $l = 0, 2, 4, 6,$ kvantumszámokra. Jól látható, hogy a nemlokalitás az $r \sim r'$ főátló mellett koncentrálódik, és a nagysága csökken l növekedésével.



3. ábra. Az (56) alatti Frahn-Lemmer nemlokális potenciál MeV/fm egységekben n-^{40}Ca szórásra; (a) $l = 0$, (b) $l = 2$, (c) $l = 4$, (d) $l = 6$.

A 4. ábra mutatja a Frahn-Lemmer nemlokális potenciálra kapott eredményt, amit az (55) alatti képlet alapján számoltam az $l = 0, 2, 4, 6$ impulzusmomentum kvantumszámokra $E = 30$ MeV szórási energia mellett. Minden egyes kis ábra legalább négy görbét tartalmaz, amelyek rendre a (41) alatti Tayor sorfejtés $\lambda_{max} = 0, 1, 2,$ ill. 3-ad rendű közelítésének felelnek meg. A 4a)-c) ábrákon a pont-vonallal jelölt görbe az egzakt nemlokális potenciált jelöli, amelyhez való konvergencia felfedezhető az egyes ábrákon. A konvergenciát természetesen az egyes potenciálokból számolt fázistolások is mutatják, amint azt az 1. táblázatban bemutatom. Végső következtetés az, hogy a másod, ill. harmad rendű Taylor közelítés lényegesen jobb eredményt ad, mint a nullad illetve első rend.



4. ábra. $\tilde{V}_l(r)$ lokalizált potenciálok, amelyeket az (56) alatti Frahn-Lemmer nemlokális potenciálra kaptam Taylor sorfejtés alkalmazásával az (55) képlet szerint $E = 30$ MeV energán; pontozott vonal: $\lambda = 0$, rövid szaggatott vonal: $\lambda = 1$, hosszú szaggatott vonal: $\lambda = 2$, folytonos vonal: $\lambda = 3$, pontozott-szaggatott vonal: egzakt (Wronskian) eredmények [5]-ből. (a) $l = 0$, (b) $l = 2$, (c) $l = 4$, (d) $l = 6$.

Érdekes, hogy lokalizációs eljárásom első használata a visszafelé történő alkalmazás volt, amit inverz lokalizációnak, vagy delokalizációs eljárásnak is nevezhetünk. Az algebrai szóráselmélet különleges, az addigi modelleknek nem megfelelő (nem Woods-Saxon alakú), erősen oszcilláló, energia függő lokális potenciálokat produkált, amelyek jól leírták a szilícium-oxigén atommagok rugalmas ütközéseiben mért szögeloszlásokat (differenciális

1. táblázat. Néhány $\tan\delta_l$ érték, amelyeket az (56) alatti nemlokális potenciál (55) szerinti Taylor sorfejtéses közelítéséből számolva kaptam különböző λ_{max} és E esetén. $\lambda = \infty$ jelenti a közelítés nélküli fázistolás értékeket.

E (MeV)	λ	$\tan\delta_0$	$\tan\delta_1$	$\tan\delta_2$		
	0	4.666	−0.208	0.166		
	1	7.433	−0.191	0.141		
1	2	−0.776	−0.463	0.037		
	3	−0.774	−0.490	0.035		
	∞	−0.624	−0.436	0.040		
E (MeV)	λ	$\tan\delta_0$	$\tan\delta_1$	$\tan\delta_3$	$\tan\delta_5$	
	0	−1.188	−8.352	0.068	0.075	
	1	−0.978	−5.720	0.067	0.063	
10	2	1.236	1.184	−0.196	0.067	
	3	1.274	1.082	−0.205	0.067	
	∞	1.790	1.373	−0.182	0.068	
E (MeV)	λ	$\tan\delta_0$	$\tan\delta_2$	$\tan\delta_4$	$\tan\delta_6$	$\tan\delta_8$
	0	1.206	0.142	−1.098	0.766	0.048
	1	1.424	0.201	−1.017	0.690	0.040
30	2	−0.700	−0.760	−2.077	0.644	0.042
	3	−0.656	−0.819	−2.117	0.655	0.043
	∞	−0.374	−0.619	−1.951	0.655	0.043

hatáskeresztmetszeteket). A delokalizációs eljárás eredménye az volt, hogy a potenciálok oszcilláló jellege a nemlokalitásból ered[6].

Nemlokális potenciálok egy másik módszerrel történő lokalizálására még visszatérek a későbbiekben (ld. 4.2.2 pont).

3. Szóráselméleti variációs módszerek fejlesztése és alkalmazása direkt szórásproblémák megoldására

Direkt szórásproblémának nevezzük azon szóráselméleti feladatokat, amelyekben a potenciálok ismertek és a szórásamplitúdó, illetve a fázistolások meghatározására törekszünk. Ezen szórási mennyiségeket tehát a különféle reakcióelméletekből számíthatjuk ki, amik a Schrödinger egyenlet különféle közelítésekkel, feltevésekkel történő megoldását jelentik.

A magfizikai vizsgálatokra megfogalmazott (10) alatti csatolt egyenletrendszerünket ebben a fejezetben egy egyszerűbb problémára, az elektron-atom ütközés problémájára fogjuk specializálni és megoldani. Csak olyan ütközésekkel foglalkozunk, amelyeknél a szóródó elektron kinetikus energiája az atom ionizációs küszöbe alatt van.

Egy elektronnak egy n-elektront tartalmazó atomon való szóródását a $\Psi^{(d)}(q_1, \ldots, q_{n+1})$ $(n + 1)$-elektron hullámfüggvény írja le, ahol d a Schrödinger egyenlet egy speciális (degenerált) megoldását jelenti és a q_i szimbólumok az $\mathbf{r}_i$ egyelektron koordinátákon kívül az $\eta^{1/2}_{\pm 1/2}$ spin szabadsági fokot is magukban foglalják. Ezt az $(n + 1)$-elektron hullámfüggvényt (1)-hez hasonló módon kifejtjük az n-elektron hullámfüggvények Φ_c teljes rendszere szerint és rögtön csonkítjuk is P tagra:

$$\Psi^{(d)}(q_1, \ldots, q_{n+1}) = \mathcal{A} \sum_{c=1}^{P} \psi^{(c)} R^{(cd)}, \tag{57}$$

ahol

$$\psi^{(c)}(\hat{\mathbf{r}}, \xi) = [\Phi_c^{J_c}(q_1, \ldots, q_n) \otimes [Y^{l_c}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \eta^{1/2}]^{j_c}]^{I_c} \tag{58a}$$

és

$$R^{(cd)}(r) = r^{-1} f^{(cd)}(r). \tag{58b}$$

A (57) alatti kifejtést az atomfizikában szoros csatolás kifejtésnek nevezik. Ennek a Schrödinger egyenletbe helyettesítésével nyert, (10)-nek megfelelő egyenletek a csatolt csatornás, vagy szoros csatolás egyenletek, amelyeket kompakt formában, a csatorna kvantumszámokat b, c, d betűkkel jelölve, a következőképpen írhatunk:

$$\sum_{c=1}^{P} \hat{D}^{(bc)} f^{(cd)} = 0, \quad b = 1, \ldots, N. \tag{59}$$

Itt $\hat{D}^{(bc)}$ jelenti a c csatornából a b-be való szórást okozó operátort, ami a

$$\hat{D}^{(bc)} = H^{(bc)} - \epsilon_c \delta^{(bc)} \tag{60}$$

formában írható, ahol a relatív mozgást jellemző

$$\epsilon_c = E - E_c \tag{61}$$

csatorna energia az E teljes energia és az E_c target energia különbsége.

A $H^{(bc)}$ csatorna Hamilton operátornak a kinetikus energia része diagonális szerkezetű, a potenciális energia része pedig nemdiagonális lokális és nemlokális tagokból áll ($\hbar = 1, m = 1, e = 1$):

$$H^{(bc)} = \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_c(l_c+1)}{2r^2} \right] \delta^{(bc)} + \hat{U}^{(bc)}, \tag{62}$$

ahol tehát

$$\hat{U}^{(bc)} = V^{(bc)}(r) + \hat{W}^{(bc)}, \tag{63}$$

$$V^{(bc)}(r) = \langle \psi^{(b)}(\hat{\mathbf{r}}, \xi) | V | \psi^{(c)}(\hat{\mathbf{r}}, \xi) \rangle \tag{64a}$$

és

$$\hat{W}^{(bc)} f^{(bc)} = \int_0^\infty r W^{(bc)}(r, r') r' f^{(bc)}(r') \mathrm{d}\, r', \tag{64b}$$

$$W^{(bc)}(r, r') = \langle \psi^{(b)}(\hat{\mathbf{r}}, \xi) | H - E | (\mathcal{A} - 1) \psi^{(c)}(\hat{\mathbf{r}}, \xi) \rangle. \tag{64c}$$

Itt $H = H_T + T_e + V$ a target+elektron rendszer teljes Hamilton operátora, és V a target atom és a szóródó elektron közti Coulomb kölcsönhatást jelenti.

Mivel az (59) alatti egyenletet most meg akarjuk oldani, specifikálni kell a határfeltételeket is. Az $f^{(cb)}$ megoldás rövidhatótávolságú viselkedését az $l_c(l_c+1)/r^2$-es centrifugális tag szabja meg:

$$f^{(cb)}(r) \propto r^{l_c+1}, \qquad r \to 0. \tag{65}$$

Az (59) és (60) alatti egyenletekben csupán nyitott csatornákra szorítkozunk a továbbiakban ($\epsilon_c \geq 0, c = 1, \ldots, P$), így a radiális csatorna hullámfüggvények szokásos aszimptotikus alakja a következőképpen írható:

$$f^{(cd)}(r) \propto k_c^{-1/2}[\delta_{cd} \sin(k_c r - l_c \pi/2) + K_{cd} \cos(k_c r - l_c \pi/2)], \qquad r \to \infty, \tag{66}$$

ahol

$$k_c^2/2 = \epsilon_c. \tag{67}$$

A K_{cd} mennyiség jelenti a K szimmetrikus reaktancia matrix egy elemét, amely a T átmeneti szórás matrixszal a következő kapcsolatban áll:

$$T = K(I - iK)^{-1}. \tag{68}$$

A c csatornából a d-be vezető reakció parciális (reakció) hatáskeresztmetszetet pedig a

$$\sigma_{cd} = \frac{4\pi}{k_c^2} |T_{dc}| \tag{69}$$

összefüggés adja meg.

3.1 Legkisebb négyzetek variációs módszer csatolt csatornás reakcióegyenletek megoldására

Mind a magreakció elméletek, mind az atomfizikai reakció elméletek csatolt csatornás közelítése nagyszámú csatolt integro-differenciál egyenlet szimultán megoldását igényli. Ilyen egyenletek direkt numerikus integrálási technikával történő megoldása még a legnagyobb számítógépek használatával is nehézségbe ütközik, mivel a nemlokális potenciálok fellépte miatt memória helyfoglalási problémák és összegzésből eredő pontatlansági hibák léphetnek fel. Azonban a kötött állapotok számolására kifejlesztett, bázisfüggvények szerinti kifejtési technika alkalmazásával e nehézségek megszűnnek. Ezért kezdtem el vizsgálni a kifejtési technikára épülő legkisebb négyzetek variációs módszert (LVM), amit Ladányi és Szondy[7] még a 60-as évek végén fejlesztett ki intézetünkben, potenciálszórásra. (Variációs direkt módszereknek az egyszerű direkt módszerekhez képest a pontosságban van előnyük, mint látni fogjuk a későbbiekben.)

Ebben a fejezetben az LVM módszert alkalmassá teszem reakciók számolására, azaz csatolt csatornás integro-differenciál egyenletek megoldására [T2/1].

Minden kifejtési technikának az a lényege, hogy a meghatározni kívánt függvényt egy végtelen elemű bázis teljes rendszere szerinti véges összegű kifejtéssel közelíti. Az (59)-es egyenletben $f^{(cd)}$ a meghatározandó függvény, ennek aszimptotikus alakjából leolvashatók a szórást jellemző fontos mennyiségek. A reakcióban (ütközésben) álló partnerek relatív szórási hullámfüggvényét ezek szerint a következő kifejtéssel közelítjük:

$$f^{(cd)'} = \sum_{i=-1}^{N} a_i^{(cd)} \varphi_i^{(c)}(r), \tag{70}$$

ahol a közelített radiális függvénytől is természetesen megköveteljük a (65), valamint (66) alatti határfeltételek kielégítését. Ezért kifejtési (bázis) függvényeinket a következőképpen vesszük fel:

$$\varphi_{-1}^{(c)}(r) = k^{1/2} r j_l(kr) \tag{71}$$

$$\varphi_0^{(c)}(r) = k^{-1/2}(1 - e^{-\beta r})^{l+1} \cos(kr - l\pi/2) \tag{72}$$

$$\varphi_i^{(c)}(r) = A_i r^{l+i} e^{-\alpha r}, \quad i = 1, \ldots, N \tag{73}$$

ahol az r relatív koordináta, a k, l fizikai, a β, α nemfizikai (regularizációs, ill. skála-) paraméterek, valamint az A_i normálási állandók mind a c csatornára vonatkoznak. A d csatornához való csatolást az $a_i^{(cd)}$ lineáris kifejtési együtthatók adják, amelyeket az LVM variációs módszerrel határozunk meg.

A (71) és (72) alatti (ún. kontinuum) függvények a határfeltételek kielégítését segítik, ezért az előfordulási súlyukat megszabó $a_{-1}^{(cd)}$ és $a_0^{(cd)}$ együtthatókat a szóráselméletben (aszimptotikus) normalizációs faktoroknak nevezzük. A (66) aszimptotikus alakból nyilvánvaló, hogy ezeknek csak relatív aránya fontos, ezért a_{-1}-et egyrészt diagonálisnak, másrészt azonosnak vehetjük minden csatornára:

$$a_{-1}^{(cd)} = \delta^{(cd)} a_{-1}. \tag{74}$$

Az a_{-1} normálási együttható szerepére még visszatérek.

A (70)-(74) alatti egyenleteket az (59) csatolt Schrödinger egyenletbe helyettesítve a jobb oldal nem lesz zérus:

$$\sum_{c=1}^{P} \hat{D}^{(bc)} f^{(cd)'} = \Delta^{(bc)}(r, a_{-1}, a_0^{(1d)}, a_0^{(2d)}, \ldots, a_N^{(Pd)}), \quad b = 1, \ldots, P. \tag{75}$$

ahol a $\Delta^{(bc)}$ deviációk nemcsak a relatív távolságtól, de az összes lineáris kifejtési paramétertől is függnek még. Az is nyilvánvaló, hogy ezek a deviációs függvények 'rövidhatótávolságúak', azaz $r \to \infty$ esetén zérushoz tartanak.

Ahhoz, hogy az $a_i^{(cd)}$ együtthatókat meghatározzuk a legkisebb négyzetek variációs módszerrel, bevezetjük a $\chi_h^{(b)}(r)$ négyzetesen integrálható függvényekből álló teljes rendszert, amelynek elemeit tesztfüggvényeknek nevezzük. Atomfizikai probléma esetén tesztfüggvény rendszerünket a jól ismert Slater-függvények alkothatják:

$$\chi_h^{(b)}(r) = B_h^{(b)} r^{l_b+h} e^{-\gamma_b r}, \quad h = 1, 2, \dots \tag{76}$$

ahol figyelemmel voltunk a (65) alatti origóbeli határfeltételre és bevezettünk egy újabb nemlineáris skálaparamétert (γ_b), valamint normálási állandót ($B_h^{(b)}$).

Deviációs vektorunk egyes komponenseit az imént bevezetett tesztfüggvény térben a következő skalárszorzat adja meg:

$$\left\langle \chi_h^{(b)} | \Delta^{(bc)} \right\rangle = \int_0^\infty \chi_h^{(b)}(r) \Delta^{(bc)}(r) \mathrm{d}\, r. \tag{77}$$

Ezen komponensek négyzetösszege nyilvánvalóan egyfajta mértékét adja a radiális hullámfüggvények fenti kifejtés által teljesülő pontosságának, ezért bevezetjük az alábbi hibafunkcionált:

$$\lambda^{(d)}[f^{(1d)'}, \dots, f^{(Pd)'}] = \frac{\sum_{b=1}^P \sum_{h=1}^M w_h^{(b)} \left| \left\langle \chi_h^{(b)} | \Delta^{(bc)} \right\rangle \right|^2}{|a^{-1}|^2}, \tag{78}$$

amely az összes $f^{(1d)'}, \dots, f^{(Pd)'}$ meghatározandó radiális hullámfüggvénynek az egzakttól való eltérését, hibáját méri. A fenti hiba funkcionálban M jelenti a tesztfüggvények számát, $w_h^{(b)}$ egy kényelmesen választható pozitív súlyfaktor és a nevezőbeli, határfeltétellel kapcsolatos a_{-1} együttható [ld. (74) egyenlet] biztosítja a fontos szinuszos tag jelenlétét az elkövetkezendő variációs számolás folyamán.

A tesztfüggvények számára kirójuk az

$$M > N + 2 \tag{79}$$

feltételt. M elvben végtelen kell legyen ahhoz, hogy a tesztfüggvények teljes rendszeréről beszélhessünk. Gyakorlati okokból azonban csak M véges elemű tesztfüggvény térben dolgozhatunk nyilvánvalóan. Mindez elmondható a bázisfüggvények teréről is, amit N

eleműre szűkítünk le. A (79) alatti feltételt akkor érthetjük meg legegyszerűbben, ha meggondoljuk, hogy csupán $M = N + 2$ számú tesztfüggvényt használva, a (78) alatti hiba funkcionál értelmét veszti, hiszen M számú (77) definiálta skalárszorzatot mindig zérussá tehetünk az $N + 2$ számú $a_i^{(cd)}$, $i = -1, \ldots, N$ lineáris paraméterek megfelelő választásával. Ahhoz tehát, hogy hibáról beszélhessünk, minimálisan eggyel több tesztfüggvény elemünk kell legyen, mint báziselem (a báziselem számhoz most hozzászámolva az aszimptotikus normálást biztosító (71)-(72) függvényeket is).

Célunk a (78) alatti hiba funkcionál minimalizálása az a_{-1} és $a_i^{(cd)}$ ($i = 0, \ldots, N$, $c = 1, \ldots, P$) együtthatók optimális megválasztása által. Ehhez képezzük (78) ezen együtthatók szerinti variációját. Az eredmény egy olyan sajátérték probléma lesz, ahol a $\lambda^{(d)}$ sajátérték csak az a_{-1} együtthatóval kapcsolatos (balfelső) diagonálisban fordul elő. Homogén egyenletrendszerről lévén szó, az együttható sajátvektort normálhatjuk úgy, hogy

$$a_{-1} = 1 \tag{80}$$

legyen. Ekkor viszont sajátérték problémánk szétesik egy lineáris inhomogén egyenletrendszer feladatra:

$$\sum_{c=1}^{P}\sum_{i=1}^{N} L_{hi}^{(bc)} a_i^{(cd)} = -L_{h,-1}^{(bd)}, \quad b = 1, \ldots, P, \quad h = 0, \ldots, N, \tag{81}$$

valamint egy explicit egyenletre a (hiba) sajátérték meghatározására:

$$\lambda^{(d)} = L_{-1,-1}^{(dd)} + \sum_{c=1}^{P}\sum_{i=1}^{N} L_{-1i}^{(dc)}. \tag{82}$$

A fenti egyenletekben az L matrix elemeit a következő formulák definiálják:

$$L_{hi}^{(bc)} = \sum_{b=1}^{P}\sum_{h'=1}^{M} w_{h'}^{(b')} \left\langle \chi_{h'}^{(b')} | \hat{D}^{(b'b)} | \varphi_h^{(b)} \right\rangle^* \left\langle \chi_{h'}^{(b')} | \hat{D}^{(b'c)} | \varphi_i^{(c)} \right\rangle, \tag{83}$$

és

$$\left\langle \chi_{h'}^{(b')} | \hat{D}^{(b'c)} | \varphi_i^{(c)} \right\rangle = \int_0^\infty \chi_{h'}^{(b')}(r) \hat{D}^{(b'c)} \varphi_i^{(c)}(r) \mathrm{d}\, r. \tag{84}$$

A szóráselmélet számára érdekes mennyiséget, a K_{cd} reaktancia matrix elemet, a (81) alatti egyenletrendszer megoldásaként a

$$K_{cd} = a_0^{(cd)} \tag{85}$$

összefüggésből kapjuk meg, ami a (66) alatti aszimptotikus határfeltételből, a (70)-(73) alatti kifejtésből, valamint a (74) alatti normálásból nyilvánvánvaló.

Azonban számolásunk szükségszerűen közelítő jellegű. Ez abban is megnyilvánul, hogy a kapott reaktancia matrix nemszimmetrikus, szemben az egzakttal. Ezen a problémán a Taylor sorfejtés esetén már megismert (vö. (44) egyenlet) egyszerű és legitim szimmetrizálási eljárással segítünk, és (85) helyett a reaktancia matrixelemeket a

$$K_{cd} = \frac{1}{2}(a_0^{(cd)} + a_0^{(dc)}) \tag{86}$$

definícióból fogjuk a továbbiakban számolni. Az, hogy mennyire nem szimmetrikus a reaktancia matrix elem, éppen a rugalmatlan (nemdiagonális) csatornákra vonatkozó számolás pontosságára ad egyfajta mértéket. Ezért definiáljuk a

$$\Delta K_{cd} = \frac{1}{2}(a_0^{(cd)} - a_0^{(dc)}) \tag{87}$$

különbséget is, mint a számolás pontosságára jellemző mennyiséget.

A diagonális (rugalmas) csatornákban a hibát a (82) alatti általános hibával jellemezhetjük. Ez alulról korlátos mennyiség, legkisebb értéke zérus. (Egzakt számolás, $N, M \to \infty$ esete.) Rögzített N bázisfüggvény szám esetén, M növelésével a tesztfüggvény tér egyre teljesebbé válik. Ezért, a deviációk rövidhatótávolságú volta, valamint a (78) alatti kifejezés pozitív definitsége miatt nyilvánvaló, hogy $\lambda^{(d)}$ monoton csökken a tesztfüggvények M számának a növekedésével.

Megállapíthatjuk tehát, hogy (78) alatti LVM funkcionál és a belőle (a lineáris paraméterek variálásával, majd a (80) alatti normálással) kapott (82) alatti egyenletrendszer nemcsak a kívánt (86) alatti megoldást adja meg, de az elvégzett számolás jóságára nézve is rögtön felvilágosítást ad (82) révén.

3.2 Eredmények

Fenti csatolt csatornás egyenleteket elektron-hidrogénatom szórás esetére fogjuk megoldani az LVM módszerrel. Az elektron-hidrogénatom ütközés eme szoros csatolás modellje még ma is minden új metodikai fejlesztés próbakövének számít, amely kiválóan alkalmas a választott módszer teljesítőképességének felmérésére is. Egy másik szokásos példa a szórásproblémák számolására szolgáló módszerek tesztelésére az ún. Huck modell, amely elektron-atom szórást modellez csatolt derékszögű potenciálokkal.

Az (57) alatti kifejtés egycsatornás változatát ($P = 1$) sztatikus kicserélődési közelítésnek nevezik, mivel egyetlen, az alapállapoti target atom hullámfüggvény szerepel benne. Az (57) szoros-csatolás kifejtés tehát nem engedi meg az atom gerjesztődését, a target atomot csak 'sztatikusan' veszi figyelembe. Ugyanakkor az $\mathcal{A}$ antiszimmetrizáló operátor kifejti kicserélési hatását, ami a nemlokális potenciált eredményezi.

Amikor két tagot veszünk figyelembe (57)-ben ($N = 2$), akkor kapjuk az ún. kétállapotú szoros csatolás közelítést, ami természetesen magába foglalja a sztatikus közelítést is.

3.2.1 Elektron-hidrogénatom szórás

A hidrogénatom $1s$ és $2s$ hullámfüggvényeit

$$\Phi_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}, \tag{88a}$$

$$\Phi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2}, \tag{88b}$$

használva, a

$$V^{(bc)}(r) = \int \Phi_b(\mathbf{r}') \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{r} \right) \Phi_c(\mathbf{r}') \mathrm{d}^3\mathbf{r}' \tag{89}$$

lokális potenciálokat könnyen kiszámíthatjuk ($b, c = 1, 2$):

$$V^{(11)}(r) = -\left(\frac{1}{r} + 1\right) \exp(-2r), \tag{90a}$$

$$V^{(12)}(r) = V^{(21)}(r) = \sqrt{2}\frac{4}{27} \left(\frac{3r}{2} + 1\right) \exp(-3r/2), \tag{90b}$$

$$V^{(22)}(r) = -\left(\frac{1}{r} + \frac{3}{4} + \frac{r}{4} + \frac{r^2}{8}\right) \exp(-r). \tag{90c}$$

A nemlokális potenciálokra a következő általános képlet adódik ($b, c = 1, 2$):

$$W^{(bc)}(r, r') = (-1)^S 4\pi \Phi_c(r) \left(E - E_c - E_b - \frac{1}{r_>} \right) \Phi_b(r'), \tag{91}$$

ahol $S = 0$ jelenti a szinglett, $S = 1$ a triplett szórást, $r_> = \max(r, r')$ és

$$E_1 = -\frac{1}{2}\mathrm{au}, \quad E_2 = -\frac{1}{8}\mathrm{au}. \tag{92}$$

A (81) alatti egyenleteket

$$M = N + 10 \tag{93}$$

esetén fogjuk megoldani, tehát a minimálisan szükségesnél héttel több tesztfüggvényt veszünk figyelembe. Ezenkívül, az egyszerűség kedvéért, az összes súlyozó paramétert egynek választjuk:

$$w_{h'}^{(b')} = 1, \tag{94}$$

valamint az összes nemlineáris skála paramétert azonosnak vesszük:

$$\alpha_c = \beta_c = \gamma_c = \alpha. \tag{95}$$

Az LVM módszer működésére jellemző konvergencia adatokat a 2. táblázatban soroltam fel az $l_c = 0$ (s-hullám) szórás szinglett fázistolásaira nézve különböző $\alpha = 1.1, 2.0, 3.0$ nemlineáris paraméter értékek mellett, a bázis függvény szám ($N = 2, 4, \ldots, 20$) függvényében. Mindegyik esetre a közelítés jóságára jellemző és a (82) alatti egyenletből számolható hiba sajátérték is fel van tüntetve.

A 2. táblázatot tanulmányozva megérthetjük az LVM módszer lényegét. Az első oszlopban, az $\alpha = 1.1$ nemlineáris paraméter érték esetén végzett számolás esetén azt gondolhatnánk, hogy az $N = 18, 20$ bázisfüggvény elegendően bekonvergált fázistolás értéket (1.87015782) szolgáltatott, megfelelően kicsi hiba sajátértékkel (2×10^{-24}). Azonban láthatjuk a középső oszlopban, hogy ezen fázistolás érték összes jegyére még nem pontos, azaz a konvergencia csak látszólagos, mivel $\alpha = 2$ nemlineáris paraméter melletti számolás az 1.87015778 értéket adja. Ezt az értéket azért tudjuk elfogadni az előző helyett, mert a hozzátartozó hiba sajátérték szignifikánsan, négy nagyságreddel kisebb (8×10^{-28}).

Az LVM vonzó tulajdonsága tehát abban nyilvánul meg, hogy bizonyos kétes esetekben dönthetünk a számolás jósága (pontossága) felől a mindenkori hiba sajátérték vizsgálata révén, amely létezése a módszer lényegéből fakad.

2. táblázat. Számolt $\delta^{[0]}(N,\alpha)$ szinglett s-hullám fázistolás értékek és $\lambda^{(1)}(N,\alpha)$ hiba értékek különböző N bázisfüggvény szám és α nemlineáris skála paraméter esetén. A hullámszám rögzített értéke: $k_1 = 0.2$ au.

N	$\delta^{[0]}(N,1.1)$	$\lambda^{(1)}(N,1.1)$	$\delta^{[0]}(N,2.0)$	$\lambda^{(1)}(N,2.0)$	$\delta^{[0]}(N,3.0)$	$\lambda^{(1)}(N,3.0)$
2	1.86066805	1.6×10^{-3}	1.99938103	5.5×10^{-1}	2.67453477	2.7×10^{0}
4	1.86988303	3.4×10^{-7}	1.88708792	4.8×10^{-3}	1.90236088	2.0×10^{-1}
6	1.87016446	1.6×10^{-10}	1.87360882	1.5×10^{-5}	1.88983351	2.5×10^{-3}
8	1.87015808	8.5×10^{-12}	1.87072980	2.4×10^{-8}	1.88087862	2.0×10^{-5}
10	1.87015610	2.0×10^{-13}	1.87023616	2.4×10^{-11}	1.87464306	1.1×10^{-7}
12	1.87015612	2.8×10^{-15}	1.87016668	1.8×10^{-14}	1.87176175	4.3×10^{-10}
14	1.87015705	2.3×10^{-17}	1.87015858	1.1×10^{-17}	1.87067069	1.4×10^{-12}
16	1.87015765	1.3×10^{-19}	1.87015782	5.7×10^{-21}	1.87030753	3.7×10^{-15}
18	1.87015782	5.5×10^{-22}	1.87015778	2.4×10^{-24}	1.87019800	8.9×10^{-18}
20	1.87015782	2.0×10^{-24}	1.87015778	8.1×10^{-28}	1.87016768	1.9×10^{-20}

A 3. táblázat ugyancsak az egy-csatornás elektron-hidrogénatom ütközés LVM által szolgáltatott fázistolás értékeit mutatja be sztatikus kicserélődési közelítésben triplett és szinglett szórásra, az irodalomban talált más számolással összehasonlítva. Láthatjuk, hogy a különböző hullámszámokra (energiákra) kapott eredmények kivétel nélkül azt jelzik, hogy az LVM pontossága a legnagyobb. Különösen figyelmet érdemel a $k_1 = 0.2$ au esetén kapott triplett szórás fázistolása, amelyet szinte 'spektroszkópiai' (12 jegyes) pontossággal lehetett megkapni az LVM alkalmazásával.

Szoros csatolás közelítésben végzett két-csatornás LVM számolás konvergencia viselkedését mutatja a 4. táblázat, ahol a reaktancia matrixokat soroltam fel a megfelelő hiba sajátértékekkel, illetve nemdiagonális reaktancia matrix különbségekkel (ld. (87) egyenlet), különböző bázis függvény számok esetére, $k_1 = 1$ au bemenő hullámszám és $\alpha = 2$ nemlineáris paraméter esetén. A táblázatot tanulmányozva megállapíthatjuk, hogy 20 bázisfüggvény esetén mind a három (négy) mennyiség esetén hét tizedesjegyű bekonvergált értéket kaptunk a reaktancia matrix elemekre.

3. táblázat. LVM módszerrel $N = 20$ bázisfüggvénnyel számolt $\delta^{[0]}$ szinglett és $\delta^{[1]}$ triplett fázistolások $k_1 = 0.2, 0.5$ és 1.0 au hullámszám esetén, elekton-hidrogénatom ütközésre sztatikus kicserélődési közelítésben. Összehasonlításul más módszerrel (J[8], M[9], HS[10]) elért legpontosabb eredmények is fel vannak tüntetve.

	$\delta^{[0]}$		$\delta^{[1]}$
		$k_1 = 0.2$au	
J			
M			
HS	1.870158		2.67915
LVM	1.87015878		2.67914873382
		$k_1 = 0.5$au	
J	1.031		2.070
M	1.031		2.070
HS			
LVM	1.03149828		2.070066636
		$k_1 = 1.0$au	
J	0.543		1.391
M	0.541		1.389
HS	0.5428946		1.39052
LVM	0.54289464		1.390519779

Végül az 5. táblázat tartalmazza a más módszerekkel történő összehasonlítást a kétcsatornás elektron-hidrogénatom szórás $\sigma_{12}^{[0]}$ parciális hatáskeresztmetszet értékeire, szinglett ütközésre és $k_1 = 1, 1.2, 1.5, 2$ au bemenő hullámszám eseteire vonatkozóan. Itt is az LVM más módszerekhez viszonyított pontosabb volta figyelhető meg.

4. táblázat. Számolt $K_{11}(N;\alpha)$, $\lambda^{(1)}(N;\alpha)$, $K_{12}(N;\alpha)$, $\Delta K_{12}(N;\alpha)$, $K_{22}(N;\alpha)$ és $\lambda^{(2)}(N;\alpha)$ reaktancia matrix értékek elektron-hidrogénatom ütközésre kétállapotú szoros csatolás közelítésben, valamint a számolás pontosságát jellemző hiba sajátértékek, illetve nemdiagonális reaktancia matrixelem különbségek néhány N báziselem szám esetére a $k_1 = 1.0$ au bemeneti hullámszám mellett. A nemlineáris paraméter $\alpha = 2$ au értéken lett rögzítve.

N	$K_{11}(N;2.0)$	$\lambda^{(1)}(N;2.0)$	$K_{12}(N;2.0)$	$\lvert\Delta K_{12}(N;2.0)\rvert$	$K_{22}(N;2.0)$	$\lambda^{(2)}(N;2.0)$
2	1.1058419	2.0×10^{-3}	0.4491678	5.5×10^{-2}	−0.4008107	4.9×10^{-2}
4	1.1490601	4.5×10^{-5}	0.3820256	3.1×10^{-3}	−0.3432615	4.1×10^{-5}
6	1.1525031	1.6×10^{-8}	0.3888019	2.7×10^{-5}	−0.3279702	4.0×10^{-6}
8	1.1527882	7.5×10^{-10}	0.3873718	7.4×10^{-5}	−0.3192054	2.9×10^{-9}
10	1.1530019	4.5×10^{-13}	0.3871720	3.0×10^{-5}	−0.3189450	1.0×10^{-11}
12	1.1530122	9.6×10^{-16}	0.3872067	7.9×10^{-6}	−0.3188105	2.8×10^{-14}
14	1.1530138	2.2×10^{-18}	0.3871972	1.7×10^{-6}	−0.3187685	2.5×10^{-19}
16	1.1530148	1.1×10^{-23}	0.3871968	3.1×10^{-7}	−0.3187697	3.3×10^{-20}
18	1.1530147	1.8×10^{-24}	0.3871970	5.3×10^{-8}	−0.3187692	8.7×10^{-24}
20	1.1530147	4.3×10^{-28}	0.3871970	8.3×10^{-9}	−0.3187691	7.9×10^{-27}

3.2.2 Huck modell

Az LVM-t teszteltem [T2/2] egy egzaktul megoldható három csatornás modellre is, az ún. módosított Huck modellre,[12] amely lényegében három csatolt derékszögű potenciál völgyből áll. Eredete az elektron-hidrogénatom szórás modellezésére vezethető vissza, amennyiben egy részecske szóródik egy másik, végtelen potenciálgödörbe zárt részecskén. A target végtelen tömegű, a szóródó és kötött részecske megkülönböztethető, ezért csak lokális kölcsönhatás van a két részecske között. Definíciója:

$$H = H_T(r_1) + H_R(r_2) + H_{TR}(r_1, r_2) \tag{96}$$

5. táblázat. LVM módszerrel $N = 20$ bázisfüggvénnyel számolt $\sigma_{12}^{[0]}$ szinglett nemdiagonális parciális hatáskeresztmetszet πa_0^2 egységben (a_0 a Bohr sugár) $k_1 = 1.0, 1.2, 1.5$ és 2.0 au bemenő hullámszám esetén, elektron-hidrogénatom rugalmatlan ütközésre két-csatornás szoros csatolás közelítésben. Összehasonlításul más módszerrel (SMM[11], M1[9], M2[9]) elért legpontosabb eredmények is fel vannak tüntetve.

		$\sigma_{12}^{[0]}$		
	$k_1 = 1.0$ au	$k_1 = 1.2$au	$k_1 = 1.5$au	$k_1 = 2.0$au
SMM	0.200	0.102	0.0450	0.0154
M1	0.1997	0.1018	0.0445	0.0147
M2	0.20001	0.1020	0.0449	0.0152
LVM	0.1999839	0.1020873	0.045032	0.01545

ahol a target Hamilton operátora:

$$H_T = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\,r^2} + V_T(r), \quad V_T = \begin{cases} 0 & r < 2\pi, \\ \infty, & r > 2\pi, \end{cases} \tag{97}$$

a szóródó részecske Hamilton operátora pedig:

$$H_R = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\,r^2}. \tag{98}$$

A szóródó és a target részecske közti csatolt csatornás kölcsönhatást a potenciál szeparábilis kifejtési (PSE) alakban vesszük fel:

$$V_{TR}(r_1, r_2) = \sum_{i,j=1}^{\infty} |\Phi_i(r_1)\rangle V_{ij}(r_2)\langle\Phi_j(r_1)|, \tag{99}$$

ahol $V_{ij}(r_2)$ a csatoló potenciál, amelyről feltesszük, hogy rövidhatótávú és konstans:

$$V_{ij}(r) = \begin{cases} c_{ij} & r < 1 \\ 0 & r > 1 \end{cases}, \tag{100}$$

$\Phi_i(r)$ pedig a target hullámfüggvény, azaz

$$\Phi_i(r) = A_i \sin(\sqrt{2E_i}\, r), \quad A_i = \pi^{-1/2}, E_i = i^2/8. \tag{101}$$

Ez a modell elvben tehát végtelen sok csatorna (target állapot) hatását figyelembe tudja venni. Amennyiben a c_{ij} állandókat a következőképpen választjuk (au egységben):

$$c_{12} = c_{21} = \sqrt{5/2},\ c_{13} = c_{31} = 1/10,\ c_{23} = c_{32} = 2/10,\ c_{33} = -2, \tag{102}$$

és minden más $c_{ij} = 0$, akkor kapjuk a módosított Huck modellt,[12] amely azzal a tulajdonsággal rendelkezik, hogy szétcsatolt esetben ($c_{i\neq j} = 0$ au) a harmadik csatorna $E = 0.214493$ au teljes energia esetén rezonancia fázistolással ($\delta^{(33)} = \pi/2, K_{33} = \infty$) rendelkezik, és ez a tulajdonság hasonlít az elektron-hidrogénatom szórás esetére.

A Huck modell számítástechnikailag nehezebb feladatot jelent a potenciál hirtelen ugrása miatt, mint az elektron-hidrogénatom szórás többcsatornás tárgyalása szoros csatolás közelítésben. Ezért kifinomult módszerek seregét vetették be annak érdekében, hogy hatásosan tudják reprodukálni a Huck modell egzaktul ismert szórási adatait. E sok módszer közül itt csak egyet nevezek meg, Nesbet ún. RIAF (restricted-interpolated anomaly-free) módszerét, és a többit illetően is Nesbet monográfiájára[13] utalok. Ezen módszerek egyikével sem lehetett kielégítő (gyorsan konvergáló pontos) eredményt kapni.

Amennyiben a numerikus nehézségek forrása a potenciál diszkontinuitásában keresendő, akkor próbálkozhatunk[12] a (78) alatti bázisfüggvények kiegészítésével oly módon, hogy minden Slater-függvény mellé még egy 'eltolt'

$$\tilde{\varphi}_i = A_i(r-1)^{i+1} e^{-\alpha(r-1)}, \quad r \geq 1, \quad \text{és} \quad \tilde{\varphi}_i = 0, \quad 0 < r < 1 \tag{103}$$

bázisfüggvényt is alkalmazunk. Összességében így tehát $2N$ bázisfüggvényt használunk plusz a két, aszimptotikát biztosító kontinuum függvényt, a (70) alatti kifejtéshez. Tesztfüggvény rendszerünk ennek megfelelően $2N + 10$ elemből fog állni, továbbra is a (76) alatti Slater függvényeket használva elemekként.

A 6. táblázatban az LVM-mel számolt $\delta_{sum}(N; \alpha)$ sajátfázis összeg értékeket láthatjuk különböző N bázisfüggvény szám és α nemlineáris paraméter esetén $E = 1.625$ és 0.625 au teljes energiák mellett. (Megjegyzendő, hogy a kisebb energia esetén a harmadik csatorna zárt, a bemenő hullámszám pedig rendre $k_1 = \sqrt{3}$ és 1 au.) Láthatjuk, hogy erre az egyszerű modellre már $2\times$ nyolc-tíz bázisfüggvény esetén hétjegyű konvergenciát sikerült elérni, annak

6. táblázat. LVM módszerrel a három-csatornás Huck modellre számolt $\delta_{sum}(N;\alpha)$ sajátfázis összegek, növekvő N bázisfüggvény szám esetén, különböző α nemlineáris paraméter értékek és két energia érték mellett.

$k_1 = \sqrt{3}$			$k_1 = 1$		
N	$\delta_{sum}(N;3.25)$	$\delta_{sum}(N;4.25)$	N	$\delta_{sum}(N;2.25)$	$\delta_{sum}(N;2.75)$
2	-1.243387	$+1.477655$	2	1.232993	1.231250
4	-1.221531	-1.218107	4	1.254515	1.253446
6	-1.217267	-1.217633	6	1.257261	1.257215
8	-1.217115	-1.217126	7	1.257265	1.257263
10	-1.217114	-1.217114	8	1.257265	1.257265

ellenére, hogy itt mindhárom csatornát jellemző adatról (hét reaktancia matrix elemről) van szó.

Érdekességképpen megjegyezhető, hogy ha csak két-csatornás számolást végzünk $k_1 = 1$ au esetén, akkor a sajátfázis összeg 1.239534 (rad). Ez is mutatja, hogy a pontos rezonanciahelyek felderítéséhez igen fontos a zárt csatornák módosító hatásának figyelembevétele is.

3.3 Standard variációs módszerek

Szóráselméleti variációs módszerek célja az, hogy olyan stacionárius kifejezést származtassanak le a szórásmennyiségekre (δ_l fázistolás, K reaktancia matrix, T átmeneti matrix, stb.), amelyek másodrendben korrektek, azaz túlmennek az elsőrendű Born közelítésen.

Minden variációs módszer természetes alapja a szórási határfeltételekkel vett Schrödinger egyenlet, vagy a határfeltételeket is magában foglaló Lippmann-Schwinger egyenlet. Ezeket az egyszerű egy-csatornás, s-hullámú ütközés esetére szimbólikus jelölésekkel (operátor alakban) a következőképpen írhatunk fel:

$$(H-E)|f\rangle = 0, \quad \lim_{U\to 0}|f\rangle = |S\rangle + K|C\rangle, \tag{104}$$

és

$$|f\rangle = |S\rangle + GU|f\rangle, \tag{105}$$

ahol $|S\rangle$ illetve $|C\rangle$ a reguláris illetve irreguláris szabad megoldást jelöli, $|f\rangle$ az egzakt megoldás állapotvektora, H az energia operátor, U a potenciál, E a teljes szórási energia, G pedig a szabad megoldáshoz tartozó Green-operátor. Koordináta reprezentációt használva, gömbszimmetrikus potenciál esetén a szórási állapotok, illetve az operátorok a következő alakot öltik:

$$\langle r|S\rangle \equiv S(r) = k^{-1/2}\sin(kr), \quad \langle r|C\rangle \equiv C(r) = k^{-1/2}\cos(kr), \quad \langle r|f\rangle = f(r), \tag{106}$$

$$H(r) = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\,r^2} + U(r), \quad E = k^2, \quad U(r) = 2V(r) \tag{107}$$

$$G(r,r') = -\frac{1}{k}\int_0^\infty \mathrm{d}\,r' S(r_<)C(r_>), \quad \begin{cases} r_< = \max(r,r'), \\ r_> = \min(r,r'), \end{cases} \tag{108}$$

a reaktancia matrixelemet pedig a

$$K = \tan\delta = -\langle S|U|f\rangle = -\frac{1}{k}\int_0^\infty \sin(kr)U(r)f(r)\mathrm{d}\,r \tag{109}$$

képlet adja meg.

Az irodalomban leginkább elterjedt három variációs módszerrel foglalkozunk a továbbiakban, nevezetesen a Kohn, a Schwinger, és az általánosított Newton variációs módszerrel (KVM, SVM, GNVM). Ezen módszereknek a K matrixra vonatkozó stacionárius kifejezései a következők ($|f\rangle$ a továbbiakban variálandó próbafüggvényt is jelenthet):

$$K_f^{KVM} = -\langle S|U|S\rangle - \langle f|E-H|f\rangle, \tag{110}$$

$$K_f^{SVM} = \langle S|U|f\rangle + \langle f|U|S\rangle - \langle f|U-UGU|f\rangle, \tag{111}$$

$$K_f^{SVM} = \frac{\langle f|U|S\rangle\langle S|U|f\rangle}{\langle f|U-UGU|f\rangle}, \tag{112}$$

$$K_{\zeta=Uf}^{GNVM} = -\langle S|U|S\rangle + \langle S|UG|\zeta\rangle + \langle\zeta|GU|S\rangle - \langle\zeta|G-GUG|\zeta\rangle, \tag{113}$$

$$K^{GNVM}_{\zeta=Uf} = -\langle S|U|S\rangle - \frac{\langle\zeta|GU|S\rangle\langle S|UG|\zeta\rangle}{\langle\zeta|G-GUG|\zeta\rangle}. \tag{114}$$

Amint látható, az SVM és GNVM esetén megadtam a normálástól független frakcionális alakot is.

A fenti variációs kifejezések extremálisak abban az értelemben, hogy a jobb, vagy bal oldali f próba függvényt variálva az egzakt megoldás körül, miközben a másik oldali f-et egzakt megoldásnak tekintjük, zérust kapunk. Ugyanakkor a variációs elvek másik feltétele is teljesül: amennyiben f-et az egzakt megoldással azonosítjuk, a fenti kifejezések az egzakt K matrix értéket szolgáltatják.

A Schwinger és Newton módszer előnye, hogy az f, illetve $\zeta = Uf$ próba függvények L_2 bázison kifejthetők, nem igénylik az aszimptotikát biztosító kontinuum függvényeket, mivel az U rövidhatótávolságú potenciál a matrixelemekben előfordul.

Az f, illetve ζ próbahullámfüggvényeket a megfelelő bázison kifejtve az alábbi explicit formulákat nyerjük a reaktancia matrix számolására:

$$K^{KVM} = -\langle S|U|S\rangle - a^T\tilde{H}^{-1}a, \tag{115}$$

$$a_i = \langle S|E-H|\varphi_i\rangle, \quad \tilde{H}_{ij} = \langle\varphi_i|E-H|\varphi_j\rangle; \tag{116}$$

$$K^{SVM} = -d^TD^{-1}d, \tag{117}$$

$$d_i = \langle S|U|\varphi_i\rangle, \quad D_{ij} = \langle\varphi_i|U-UGU|\varphi_j\rangle; \tag{118}$$

$$K^{GNVM} = -\langle S|U|S\rangle - b^TX^{-1}b, \tag{119}$$

$$b_i = \langle S|UG|\varphi_i\rangle, \quad X_{ij} = \langle\varphi_i|G-GUG|\varphi_j\rangle. \tag{120}$$

A Kohn variációs módszer használata közben kellemetlen jelenségre bukkantak. Nevezetesen, amikor a (115) alatti képlet szerint számolták a reaktancia matrix elemet, az olyan energia értékek mellett is rezonanciát jelzett ($K = \pm\infty$), amikor a potenciál nem indokolta jelenlétét. E kellemetlenség oka nyilvánvalóan a bázis kifejtésben, illetve annak csonkolásában keresendő, hiszen (116) alatti $\tilde{H}$ matrix véges bázison nem definit. Bármely nemlineáris α paraméter esetén található olyan E energia érték, ahol a $\tilde{H}$ determinánsa eltűnik, hamis rezonanciát produkálva ezáltal. Mivel sokcsatornás elektron-atom ütközés számolások esetén nagyon fontos a rezonanciák feltérképezése, a Kohn variációs módszert bonyolult eljárásokkal próbálták alkalmassá tenni a hamis rezonanciák elkerülésére. Ezek egyike volt a már említett RIAF (restricted-interpolation anomaly-free), Nesbet által tárgyalt[13] és alkalmazott módszer.

A KVM-mel kapcsolatos problémák vizsgálata a hatvanas, hetvenes évekre nyúlik vissza, amikor fokozatosan előtérbe került a magfizikában már sikeresen alkalmazott, a LS integrálegyenletre alapozott Schwinger variációs módszer [ld. (117)-(118) alatt], majd később az általánosított Newton variációs eljárás [GNVM, (119)-(120) alatt]. Ennek oka az volt, hogy úgy vélték: a SVM, ill. az GNVM mentes a hamis rezonanciáktól, tekintve, hogy UGU, illetve GUG *nemszeparábilis* operátorok matrix közelítését (D-t, ill. X-et) kell invertálni, s ezek csak a fizikai rezonanciák esetén produkálhatnak szingularitást, ellentétben az egyszerű $\tilde{H}$ matrixszal.[3] Explicit számolással azonban könnyű volt bebizonyítani [T2/3,4], hogy vannak olyan fizikailag fontos szórásproblémák (ilyen pl. az elektron-hidrogénatom ütközés), amikor találkozhatunk a SVM esetén is nemfizikai rezonanciákkal, és ezen hamis értékek olyan $k(\alpha)$ hullámszám-nemlineáris paraméter görbe mentén jelentkeznek, ami a *szeparábilis* közelítés esetén előforduló U, illetve G matrix determinánsainak eltűnését jellemzik. Megjegyzendő, hogy a SVM esetén nem minden esetben jelentkeznek az anomáliák: pl. az elektron-hidrogénatom egy-csatornás sztatikus kicserélődési közelítés példája esetén triplett szórásra nem, míg szinglett ütközés esetén tapasztalunk hamis rezonancia megjelenést. Ez nyilván a potenciál definitásával (lokális $\pm$ nemlokális, ld. (91) egyenlet) kapcsolatos, ui. nemdefinit (előjelváltó) potenciál esetén mindig találkozunk hamis rezonanciával. A GNVM esetén a hamis rezonanciák megjelenése a $G = (E - H_0)^{-1}$ matrix zérus sajátértékeivel korrelál, amelyek előfordulása legalább olyan sűrű lehet, mint a KVM módszer $\tilde{H}$ matrixa esetében. Ráadásul megjelenésük univerzális, azaz potenciáltól független, így használata még veszélyesebb, mint az egyszerű KVM alkalmazása.

Mindezek miatt a standard variációs módszerek nem tekinthetők az elméleti számolás 'csodafegyvereinek' és az említett hamis szingularitások állandó monitorozására van szükség.[14] Időközben a KVM eljárásra nézve történt egy jelentős fejlesztés,[15] amennyiben a Schrödinger egyenletet nem a (104) alatti valós (álló hullámnak megfelelő) határfeltételekkel oldották meg és építették rá a (110) alatti variációs elvet, hanem a komplex (haladó hullám) határfeltételekkel. E módszer, az ún. komplex Kohn variációs módszer (cKVM), megtartja a KVM eljárás előnyét annyiban, hogy könnyű (s így olcsó) a szükséges matrixelemeket

[3]Megjegyzendő, hogy ezen vélemény még egy cikk címében is testet öltött, ld. Meyer H -D, Horacek J, and Cederbaum L S: Schwinger and anomaly-free Kohn variational principles and a generalized Lanczos algorithm for nonsymmetric operators, Phys. Rev. A 43 (1991) 3587.

számítani, ugyanakor e matrix sajátértékei is komplexek, így nem nagyon várható, hogy a KVM-re jellemző hamis rezonanciák megjelennek valós energiaértékek esetén. Nem sokáig tartott azonban, amíg kimutatták[16], hogy a cKVM módszer esetén is megjelenhetnek a hamis rezonanciák (igaz azonban, hogy ehhez nagyon speciális értékeket kellett választani a bázisfüggvények skála- és regularizációs paramétereire).

A fentiek miatt érdemes egy olyan módszert kidolgozni, ami biztosan elkerüli a hamis rezonanciákat. Ilyen módszert lehetséges konstruálni, mégpedig éppen az előző pontban ismertetett LVM-re alapozva. A javaslat lényege azon felismerésen alapszik, hogy bármely standard variációs módszer visszavezethető egy speciális módszerre, az ún. momentumok módszerére (MM).

A MM lényegéhez tartozik, hogy az előállítani kívánt f vagy $\zeta = Uf$ megoldás függvényt egy n elemű, a problémának megfelelő bázison való sorfejtéssel közelítjük. Például kötött, rezonancia, vagy szórási probléma tanulmányozása esetén a bázis vagy csupán L^2-es függvényeket tartalmaz, vagy kontinuum függvényeket is. A sorfejtésnek a megfelelő dinamikai egyenletbe való behelyettesítése után természetesen nem zérust kapunk a jobb oldalon, hanem egy rövidhatótávolságú deviációt, ami a koordinátán kívül n számú kifejtési együtthatótól is függ. E deviáció nagyságát 'megmérhetjük' egy alkalmasan választott, ún. tesztfüggvény térben (vö., LVM variációs funkcionál konstruálása, 3.1 fejezet). A MM esetén a bázisfüggvény tér és tesztfüggvény tér elemeinek száma megegyezik, ezért megkövetelhetjük, hogy a deviációnak minden tesztfüggvény térbeli komponense eltűnjön.

Mármost, ügyesen megválasztva a tesztfüggvény tér elemeit, a fenti variációs módszerek mindegyike visszavezethető a MM-re, a következő hozzárendelés révén.

KVM esetén a dinamikai egyenlet a (104) alatti Schrödinger egyenlet, a bázisfüggvény teret kifeszítik a (71)-(73) alatti függvények ($a_1 = 1$ normálást választunk), a tesztfüggvény tér megegyezik a bázisfüggvény térrel. Ekkor a MM módszer alkalmazása a (115) alatti KVM egyenletre vezet.

SVM esetén a dinamikai egyenlet a (105) alatti LS egyenlet, a bázist a (73) alatti L_2 elemek alkotják, tesztfüggvény terünk pedig:

$$|\chi_i\rangle = U|\varphi_i\rangle \equiv |\zeta_i\rangle \tag{121}$$

elemekből áll. Ekkor a MM módszer alkalmazása a (117) alatti SVM egyenletre vezet.

Végül, GNVM esetén a dinamikai egyenlet az (105) alatti egyszer iterált LS egyenlet (azaz $|\zeta\rangle = U|S\rangle + UG|\zeta\rangle$), a bázist L_2 elemek alkotják, a tesztfüggvényeket pedig a

$$|\chi_i\rangle = G|\varphi_i\rangle \tag{122}$$

mennyiségek. Ekkor a MM módszer alkalmazása a (119) alatti GNVM egyenletre vezet.

3.4 Standard variációs módszerek legkisebb négyzetes kiterjesztése

A MM eljárásra visszavezetett standard variációs módszereket ezek után már könnyen kiterjeszthetjük a legkisebb négyzetek korábban ismertetett variációs módszere, az LVM irányában, csupán több teszt függvényt kell venni, mint bázis függvényt. A deviációs komponensekre így kapott túlhatározott problémát egy (78)-hoz hasonló kifejezés variációjából adódó, (81)-(82)-höz hasonlító egyenletrendszer segítségével oldjuk meg.

Az eljárást a GNVM esetén illusztrálom. Tekintsük tehát újból a GNVM variációs kifejezést a K-matrixra:

$$K^{GNVM} = -\langle S|U|S\rangle - \sum_{i,j=1}^{n} \langle S|UG|\varphi_j\rangle (X^{-1})_{ji} \langle \varphi_i|GU|S\rangle, \tag{123}$$

ahol X^{-1} jelenti a (120) alatt felírt

$$X_{ij} = \langle \varphi_i|G - GUG|\varphi_j\rangle$$

matrix inverzét. Mivel az $X = G - GUG$ matrix még akkor is nagyon sok zérus sajátértékkel rendelkezhet, ha nem potenciál szeparábilis kifejtést (PSE) használunk U-ra, a fenti, variációsan másodrendben korrekt kifejezés nem mentes a hamis rezonanciáktól (amelyek, mint kimutattam [T2/4], erősen korrelálnak a $G_{ij} = \langle \varphi_i|G|\varphi_j\rangle$, $i, j = 1, \ldots, n$ csonkított matrix zérus sajátértékeivel). Ezért a GNVM módszer a következőképpen módosítható.

Tekintsük az

$$(1 - UG)\zeta - a_{-1}US = 0 \tag{124}$$

integrálegyenletet, ahol az a_{-1} együttható független r-től, egyébként tetszőleges. Amennyiben $a_{-1} = 1$, akkor (124) egyenlet megoldása, a $\zeta = \zeta_1$ ún. amplitúdó sűrűség, kielégíti a LS egyenlet egyszer iterált (U-val 'beszorzott') változatát.

A radiális amplitúdó sűrűséget kifejthetjük a (73) Slater-függvény bázison. E kifejtés csonkított változata (124) megoldásának egy közelítését adja:

$$\zeta' = \sum_{j=1}^{n} a_j \varphi_j(r), \tag{125}$$

amit behelyettesítve (124)-be, defniáljuk a

$$(1 - UG)\zeta' - a_{-1}US = \Delta(r), \tag{126}$$

deviációs vektort, amely a radiális változón kívül függ még az $a_{-1}, a_1, a_2, \ldots, a_n$ lineáris paraméterektől is.

Definiáljuk a (125) alatti közelítő amplitúdó sűrűség hibájának mértékét egy $n + p$ dimenziós, $|\chi_h\rangle = G|\varphi_h\rangle$ elemekből álló tesztfüggvény térben a következő módon:

$$\lambda[\zeta'] = \frac{\sum_{hh'}^{n+p} \langle \Delta|\chi_h\rangle w_{hh'} \langle \chi_{h'}|\Delta\rangle}{a_{-1}^* a_{-1}}, \tag{127}$$

ahol

$$p \geq 2. \tag{128}$$

A fenti hiba funkcionálban a $w_{hh'}$ súly-matrix valós, szimmetrikus, és összes sajátértéke nagyobb zérusnál. Az egyszerűség kedvéért éljünk a

$$w_{hh'} = \delta_{hh'} \tag{129}$$

választással.

A (127) alatt definiált $\lambda[\zeta']$ funkcionál pozitív szemidefinit, zérus értéket az egzakt megoldás esetén vesz fel:

$$\lambda[\zeta_1] = 0. \tag{130}$$

Variálva $\lambda[\zeta']$ funkcionált az a_{-1} és $a_j, j = 1, ..., n$ lineáris paraméterek szerint, a következő egyszerű sajátérték egyenletet kapjuk:

$$\begin{bmatrix} -L_{-1,-1} - \lambda & L_{-1,1} & \ldots & L_{-1,n} \\ -L_{1,-1} & L_{1,1} & \ldots & L_{1,n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ -L_{n,-1} & L_{n,1} & \ldots & L_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{-1} \\ a_1 \\ \ldots \\ a_n \end{bmatrix} = 0, \tag{131}$$

ahol

$$L_{ij} = \sum_{h=1}^{n+p} X_{ih} X_{hj}, \quad i, j = 1, \ldots, n \tag{132}$$

és

$$L_{i,-1} = \sum_{h=1}^{n+p} X_{ih} \langle \varphi_h | U | S \rangle \tag{133a}$$

$$L_{-1,-1} = \sum_{h=1}^{n+p} \langle S | U | \varphi_h \rangle \langle \varphi_h | U | S \rangle. \tag{133b}$$

Normáljuk a sajátvektort úgy, ahogy (80) alatt tettük:

$$a_{-1} = 1.$$

Ekkor a fenti sajátérték probléma szétesik egy homogén lineáris egyenletrendszerre:

$$\sum_{j=1}^{n} L_{ij} a_j = L_{i,-1}, \quad i = 1, 2, \ldots n, \tag{134}$$

és a sajátértéket (a hibát) megadó képletre:

$$\lambda = \sum_{j,k=1}^{n} L_{-1,j} (L^{-1})_{jk} L_{k,-1} - L_{-1,-1} \tag{135}$$

A közelítő reaktancia matrixot a (125) kifejtésnek a

$$K = -\langle S | U | f \rangle = -\langle S | U | S \rangle - \langle S | UG | \zeta \rangle \tag{136}$$

reaktancia matrix definíciós képletébe helyettesítve kapjuk:

$$K^{LVM-GNVM} = -\langle S | U | S \rangle - \sum_{j=1}^{n} \langle S | UG | \varphi_j \rangle a_j, \tag{137}$$

ami (134) megoldását figyelembe véve, a következőképpen is írható:

$$K^{LVM-GNVM} = -\langle S | U | S \rangle - \sum_{i,j=1}^{n} \langle S | UG | \varphi_j \rangle (L^{-1})_{ji} L_{i,-1}. \tag{138}$$

A (128) alatti $p \geq 2$ feltétel adja meg a tesztfüggvény tér bázisfüggvény térhez viszonyított elemszám többségét. Könnyen beláthatjuk a (123), (132), (133) és (138) egyenletek felhasználásával, hogy azonos elemszám esetén

$$K^{GNVM} = K^{LVM-GNVM} \quad (p = 0). \tag{139}$$

Ezért jogosan tekinthetjük a (138)-as összefüggést az általánosított Newton variációs módszer LVM-es kiterjesztésének.

E kiterjesztés hatásosságát jól illusztrája a 7. táblázat, ahol az egyszerű vonzó Yukawa potenciálon ($U = -2\exp(-r)/r$) való s-hullámú szórás reaktancia matrix elemét tüntettem fel különböző k hullámszámok esetén, egyrészt a GNVM-mel számolva (K_{GN}), másrészt az LVM-GNVM kiterjesztéssel számolva (K_{LN}). Csillaggal jelöltem meg azokat az értékeket, amelyek hamis rezonancia közelére utalnak, s így a pontos értékektől eléggé eltérő hamis értékeket szolgáltatnak a reaktancia matrix elemre. Láthatjuk, hogy a GNVM-mel számolt oszlop tele van csillaggal, míg az LVM-GNVM-mel számolt oszlop a fizikailag várható sima változást mutatja, azaz csökkenő reaktancia matrix értéket k hullámszám növekedtével.

Az LVM kiterjesztésnek – a hamis szingularitások eltüntetésén kívül – megvan az az előnye is, hogy plusz információt szolgáltat a számolás jóságára nézve. Ez különösen fontos lehet abban az esetben, amikor a skálaparaméterek terében több stabilitási tartomány van s ezekben a tartományokban egyformán 'jó' (azaz gyors) a konvergencia a bázisfüggvények számát növelve. Ilyen esetre példát a Newton variációs módszer is szolgáltat.

Tekintsük ugyanis a 8. táblázatot, ahol az elektron-hidrogénatom szinglett ($S = 0$) szórás reaktancia matrixelem értékeket tüntettem fel a Newton variációs módszerrel (K_{GN}) és ennek LVM-es kiterjesztésével ($K_{LN}, p = 5$) számolva egy fix $k = 0.5$ a.u. hullámszám esetén mint az α skálaparaméter és az n bázisfüggvény szám függvénye. Jól látható, hogy két olyan stabilitási (α-tól független) tartomány is van, ahol gyors a bázisfüggvény szám növelése szerinti konvergencia. A két tartomány jól elkülönülő reaktancia matrix értéket szolgáltat, ≈ 1.7 és 2.6 körül. Melyik a fizikai érték? Ezt lehet eldönteni a (135) alatt megadott hibamérték vizsgálatával. Ezek a megfelelő $LVM - GNVM$ számolásból azonnal adódnak. Láthatjuk a 8. táblázatban, hogy a $K_{LN} \approx 1.67$ értékhez tartozó λ_{LN} hibamérték $10 - 13$ nagyságrenddel kisebb, mint a $K_{LN} \approx 2.64$ esetén kapott. Így a költséges stabilitási vizsgálat (több α-ra való számolás) elvégzése nélkül is rögtön kiadódik az LVM-GNVM számolásból, hogy e második érték nem fizikai, az az ún. másodlagos stabilitási tartományhoz tartozik (amely tartomány megjelenése összefüggésben lehet az eredeti módszer hamis szingularitásaival).

7. táblázat. GNVM és LVM-GNVM módszerrel a tisztán vonzó Yukawa potenciálra számolt KGN és KLN reaktancia matrix értékek $n = 5$ bázisfüggvény szám és n+p=8 tesztfüggvény szám esetén, különböző α nemlineáris paraméter értékek és k hullámszám mellett. Csillag jelzi a hamis rezonancia eredményt befolyásoló hatását.

k	$\alpha = 0.8$ K_{GN}	$\alpha = 0.8$ K_{LN}	$\alpha = 1.6$ K_{GN}	$\alpha = 1.6$ K_{LN}	$\alpha = 2.4$ K_{GN}	$\alpha = 2.4$ K_{LN}	K_{exact}
0.50	5.19	4.73	7.69	7.32	8.17	7.99	8.45
0.60	3.89	2.72	4.32	4.03	4.44	4.39	4.51
0.63	-2.90^*	2.62	3.89	3.62	3.97	3.91	4.01
0.68	2.52	2.42	2.61^*	3.17	3.37	3.35	3.42
0.70	2.48	2.35	3.04^*	3.02	3.20	3.17	3.23
1.05	1.89	1.38	1.79	1.79	1.81	1.80	1.82
1.09	-25.02^*	1.36	1.72	1.70	1.74	1.73	1.75
1.10	0.37^*	1.35	1.70	1.66	1.72	1.71	1.73
1.15	1.26	1.32	1.63	1.57	1.64	1.64	1.65
1.25	1.28	1.26	1.57	1.46	1.51	1.50	1.52
1.27	1.27	1.25	1.23^*	1.44	1.49	1.48	1.50
1.30	1.25	1.23	1.40	1.41	1.45	1.45	1.46
1.89	1.07	0.62	1.04	1.01	1.13^*	1.04	1.05
1.90	1.07	0.60	1.03	1.01	0.74^*	1.03	1.05
1.91	1.08	0.59	1.03	1.00	0.98^*	1.03	1.04
2.15	2.76^*	0.58	0.96	0.92	0.94	0.94	0.95
2.18	-74.62^*	0.58	1.01^*	0.91	0.93	0.93	0.94
2.19	-4.61^*	0.58	1.19^*	0.91	0.93	0.93	0.94

3.5 Összefoglalás

Az elektron-hidrogénatom ütközés egy- és két-csatornás közelítésére elvégzett számolások azt mutatták, hogy az LVM az addigi módszereknél nagyobb pontossággal képes a reaktancia

8. táblázat. GNVM és LVM-GNVM módszerrel számolt $K_{GN}(\alpha)$ és $K_{LN}(\alpha)$ reaktancia matrix elem értékek elektron-hidrogénatom szinglett szórás esetén $k = 0.5$ a.u. hullámszámra az α skálaparaméter és az n bázisfüggvény szám függvényeként. A tesztfüggvény tér $p = 5$-tel több elemmel rendelkezik mint az n elemű bázisfüggvény tér.

n	$K_{GN}(5)$	$K_{LN}(5)$	$\lambda_{LN}(5)$	$K_{GN}(7)$	$K_{LN}(7)$	$\lambda_{LN}(7)$
1	2.62	2.68	9.4×10^{-4}	2.54	2.75	1.1×10^{-2}
2	2.63	2.65	2.0×10^{-3}	2.61	2.61	5.5×10^{-4}
3	2.64	2.56	3.4×10^{-3}	2.64	2.64	2.0×10^{-5}
4	2.66	2.91	3.5×10^{-3}	2.64	2.66	5.9×10^{-5}
5	2.75	3.44	6.0×10^{-3}	2.64	2.64	4.6×10^{-5}
..	...	...	...	...	...	...
14	1.67	1.67	3.20×10^{-14}	1.62	1.65	7.5×10^{-12}
15	1.67	1.67	1.70×10^{-15}	1.65	1.66	5.6×10^{-14}
16	1.67	1.67	8.50×10^{-17}	1.66	1.66	4.3×10^{-15}

matrix elemek meghatározására. Ezen belül a triplett szórás sztatikus-kicserélődési esetére vonatkozó fázistolás kiszámításában szinte spektroszkópiai (12 jegyes) pontosságot sikerült elérni [T2/1] húsz Slater-bázisfüggvény alkalmazásával (3. táblázat). Ezt a pontosságot azóta sem sikerült túlszárnyalni semmilyen módszernek. Jóllehet folyóiratban nem publikáltuk [T2/2], de a háromcsatornás Huck modellre elvégzett számolásaim szintén azt mutatták, hogy az LVM még erre a numerikus szempontból nehéz esetre is igen pontos és stabil eredményeket szolgáltat (6. táblázat).

A Schwinger és Newton módszer egyik olyan kellemetlen sajátosságára hívtuk fel a figyelmet, amely addig elkerülte a tudományos közvélemény figyelmét. Egyúttal eljárást is javasoltunk a mind jobban terjedőben levő Newton módszer eme fogyatékosságának leküzdésére. Az új eljárás jelentősen megnövelte az eredeti Newton módszer teljesítőképességét (7. táblázat). Helyén való megemlíteni, hogy tőlünk függetlenül, velünk szinte egy időben S. K. Adhikari is feltárta a NVM hamis rezonanciákra vezető tulajdonságát,[17] de ő egy másik módszert javasolt az anomáliák kiküszöbölésére.

Összefoglalásul még egyszer érdemes kiemelni, hogy az LVM sikeres alkalmazása akkor várható, ha a következő három kritérium együttesen teljesül:

i) stabilitást észlelünk a számolt mennyiségre a nemlineáris skála paraméterek egy vagy több tartományában;

ii) konvergenciát tapasztalunk a számolt mennyiséget illetően a bázisfüggvény szám növelésekor;

iii) amennyiben az előző két kritérium több nemlineáris paraméter tartományban is fennáll, azt az eredményt fogadhatjuk el, amelyikben a hiba sajátérték a legkisebb.

Az LVM-et éppen a iii) kritérium szerinti döntési lehetőség teszi vonzóvá (8. táblázat).

Ugyanakkor azt is meg kell említeni, hogy az LVM fő alkalmazási területe a bonyolult reakciók számolásában lehet, mivel az egyszerű lokális potenciálproblémák megoldása direkt integrálási technikával gyorsabb és egyszerűbb. Elsősorban a három- és négyrészecskés ütközések, illetve a kémiai reakciók számolására való alkalmazás kerülhet előtérbe.

4. Az inverz szóráselmélet módszereinek továbbfejlesztése és alkalmazása atom- és magfizikai kölcsönhatások meghatározására

A kvantummechanikai optikai potenciál elmélet[18] lehetőséget nyújt arra, hogy egymáson szóródó összetett kvantummechanikai objektumok (fragmentumok) között ébredő erőt (potenciált) kiszámítsuk az összetevő részecske-kölcsönhatások és a fragmentum-állapotok ismeretében.[3,19] Tudjuk azonban, hogy e program megvalósítása csak elvben lehetséges, mivel a fragmentumokra vonatkozó soktest probléma egzakt megoldása kivitelezhetetlen. Még inkább megvalósíthatatlan az optikai potenciál kiszámítása az atommagok esetében, ahol az összetevő részecskék (nukleonok) közötti primér kölcsönhatást sem ismerjük egészen pontosan. Fokozottabban igaz ez a megállapítás az olyan elemi részecskék között, mint például a pionok, ahol az összetevő részek (kvarkok) szabadon nem tanulmányozhatók. Ezért igen fontosak a kvantummechanikai inverz szóráselméletek,[20] amelyek szórásadatokból képesek a potenciált származtatni – innen az inverz elnevezés.

4.1 Kvantum inverz szóráselmélet fix energia esetén

Az inverz szóráselmélet fix energia mellett jelenleg még nem teljes, ellentétben a fix impulzusmomentum esetén érvényes elmélettel. Ezért tág lehetőség nyílik a továbbfejlesztésre. Az inverz szóráselméletek jelenleg csak gömbszimmetrikus potenciálokat képesek meghatározni a hozzájuk tartozó szórásadatokból, amelyeket a $\delta_l(k)$ fázistolás sorozatok képviselnek.

Kiindulva a

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\,r^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+U(r)-k^2\right)\psi_l(r)=0, \quad l=0,1,...\infty \tag{140}$$

radiális Schrödinger egyenletből, és bevezetve az $x=kr$ dimenziótlan változót, átrendezéssel kapjuk az egyenlet következő formáját,

$$D_q(x)\psi_l(x)=l(l+1)\psi_l(x), \quad l=0,1,...\infty, \tag{141}$$

ahol a $q=U/k^2$ potenciált tartalmazó D_q operátor definíciója:

$$D_q(x)=x^2\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\,x^2}+1-q(x)\right). \tag{142}$$

Zérus potencál esetén (141) helyett a Riccati-Bessel egyenletet kapjuk:

$$D_0(x)j_l(x)=l(l+1)j_l(x), \quad l=0,1,...\infty. \tag{143}$$

Könnyen bizonyítható, hogy a (141) alatti, nem zérus potenciált tartalmazó (sajátérték alakú) egyenlet megoldása és a zérus potenciálhoz tartozó (143) egyenlet megoldásai egymásba áttranszformálhatók a

$$\psi_l(x)=j_l(x)-\int_0^x \mathrm{d}\,t\,t^{-2}K(x,t)j_l(t) \tag{144}$$

integrál transzformációs képlettel, amit szokás a ψ_l megoldás függvény Povzner-Levitan (PL) reprezentációjának is nevezni. A (144)-ben szereplő transzformációs kernel kielégíti a

$$D_0(t)K(x,t)=D_q(x)K(x,t) \tag{145}$$

parciális differenciál egyenletet a

$$K(x,0)=K(0,t)=0 \tag{146}$$

határfeltételekkel, a potenciál pedig a

$$q(x) = -\frac{2}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,x}\frac{K(x,x)}{x} \tag{147}$$

képletből számolható.

Ez utóbbi összefüggés teremt lehetőséget a potenciál szórásadatokból történő meghatározására. Ehhez 'csak' a K magfüggvényre kell egy további, az eddigiektől független egyenletet felírni. Ezt az egyenletet a fix-l inverz probléma esetén a $\psi_l(x;k)$ megoldás függvények k-térbeli teljességének kihasználásával történik. Nincs ilyen teljességi tétel kidolgozva a fix-k inverz módszer esetén az l-térben, azonban *analógia* alapján felírhatunk egy ilyen egyenletet a K magfüggvényre:

$$K(x,t) = g(x,t) - \int_0^x \mathrm{d}\,s\, s^{-2} K(x,s) g(s,t), \quad x > t \tag{148}$$

ahol a $g(x,t) = g(t,x)$ input kernel szimmetrikus és eleget tesz a

$$D_0(t) g(x,t) = D_0(x) g(x,t) \tag{149}$$

parciális differenciál egyenletnek a

$$g(x,0) = g(0,t) = 0 \tag{150}$$

határfeltételek mellett. A Gel'fand-Levitan-Marchenko egyenlethez[20] való hasonlósága alapján a (148) alatti egyenletet GLM egyenletnek fogjuk a továbbiakban nevezni.

A fő különbség a fix-l és a fix-k inverz módszer között az, hogy az előbbi esetén g explicit meghatározott a kötött és szórási spektrum adatok által. A fix-k melletti inverz módszer még jelenleg is kutatás tárgyát képezi és csak részeredmények állnak rendelkezésre. Ezek általában abban különböznek egymástól, hogy milyen feltételezéssel élnek a g magfüggvényre nézve.

A továbbiakban két inverz kvantum szórás módszert fogok ismertetni, és használni abból a célból, hogy kísérleti adatokból határozzak meg kölcsönhatásokat. E két elmélet Newton és Sabatier[20] (NS) illetve Cox és Thompson[21] (CT) nevéhez fűződik. A NS módszert Münchow és Scheid,[22] a CT módszert magam tettem alkalmassá [T3/10] fázistolások invertálására.

4.1.1 Newton-Sabatier módszer

A NS módszer esetén az input g függvényre a feltételezés a következő:

$$g(x,t)=\sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(x) j_l(t). \tag{151}$$

Ez a próbálkozás kielégíti az összes, g-re kirótt feltételt. A $\{c_l\}$ konstansokat spektrál együtthatóknak is szokták nevezni.

Behelyettesítve a (151) alatti kifejtést a (148) alatti GLM integrálegyenletbe, és kihasználva a (144) alatti PL reprezentációt, a K transzformációs magfüggvényre is sorfejtéses alakot kapunk:

$$K(x,t)=\sum_{l=0}^{\infty} c_l \psi_l(x) j_l(t). \tag{152}$$

Ezt a (144) alatti PL reprezentációba helyettesítve, csatolt egyenletet kapunk a különböző l-ekhez tartozó megoldások között:

$$\psi_l(x)=j_l(x)-\sum_{l'=0}^{\infty} c_{l'} L_{ll'}(x)\psi_{l'}(x), \tag{153}$$

ahol

$$L_{ll'}(x)=\int_0^x \mathrm{d}\,t\, t^{-2} j_l(t) j_{l'}(t). \tag{154}$$

A fenti, (153) alatti egyenletet Regge-Newton (RN) egyenletnek is nevezik az irodalomban.

Kihasználva a formulákban szereplő függvények aszimptotikus tulajdonságait,

$$\psi_l(x\to\infty)=A_l\sin(x-l\pi/2+\delta_l), \quad j_l(x\to\infty)=\sin(x-l\pi/2), \tag{155}$$

a következő egyenletrendszert kapjuk (153)-ból:

$$\sin\delta_l=\sum_{l'\neq l} b_{l'} M_{ll'}\cos(\delta_{l'}-\delta_l), \quad l=0,1,...,\infty \tag{156}$$

a

$$b_l\equiv c_l A_l \tag{157}$$

mennyiség fázistolásokból történő meghatározására. A fenti egyenletben szereplő M matrix az $L(x \to \infty)$ matrixból ered, definíciója a következő:

$$M_{ll'} = \begin{cases} 1/[l'(l'+1) - l(l+1)], & l - l' = prtl, \\ 0, & l - l' = prs. \end{cases} \tag{158}$$

A $\{c_l\}$ együttható sorozat ezekkel és az A_l-ekre vonatkozó [szintén (153)-ból kapható]

$$A_l = \cos\delta_l - b_l\pi/(4l+2) - \sum_{l' \neq l} M_{ll'} b_{l'} \sin(\delta_{l'} - \delta_l) \tag{159}$$

egyenlet felhasználásával történik. A c_l-ek ismeretében meghatározható a g-függvény, ebből (148) révén K, majd differenciálással a keresett $q(x)$ inverz potenciál.

A NS módszer hátránya az, hogy véges fázistolás sorozat esetén (a valóságban mindig ilyennel dolgozunk) az inverz potenciál első momentuma eltűnik:[20]

$$\int_0^\infty x q(x) \mathrm{d}\, x = 0, \quad l = 0, 1, ..., l_{max} < \infty. \tag{160}$$

Ez a gyakorlatban azt eredményezi, hogy a potenciál nagy távolságokra oszcillál, ahelyett, hogy eltűnne. Ezenkívül bizonyítható, hogy a (156) alatti egyenletrendszer megoldása nem egyértelmű, az ekvivalens megoldások egy folytonos (az M matrix zérus sajátértékével kapcsolatos) α paraméterrel jellemezhetők.[4] Ezt a két hiányosságot küszöböli ki Münchow és Scheid eljárása,[22] amit módosított NS eljárásnak (mNS) szoktak nevezni az irodalomban.

A mNS módszer esetén a (153) alatti RN egyenletrendszert nem az $x \to \infty$ aszimptotikus tartományban oldjuk meg, hanem feltételezzük, hogy az $U(x/k)$ potenciál ismert egy bizonyos, *véges* x_0 hatótávolságon túli tartományban és ezért a megoldás függvény a

$$\psi_l(x) = A_l(j_l(x) - \tan\delta_l n_l(x)), \quad x > x_0 \tag{161}$$

formában írható (155) helyett. A c_l együttható sorozatot (és az A_l normálási együtthatókat) most a RN egyenleteknek két $x_1, x_2 > x_0$ rádiusznál vett megoldásából határozzuk

[4]Érdemes megjegyezni, hogy α egyértelmű módon megválasztható az adott fázistolásokkal úgy, hogy a NS inverz potenciál egyértelművé és fizikai aszimptotikával rendelkezővé válik [ld. P. Sabatier, J. Math.Phys. 7,1515(1966)]. Azonban még ekkor is megmarad egy, az origóban αr^{-1} szingularitást mutató kellemetlen, nemfizikai tulajdonság, ami végtelen fázistolás sorozatot használva az $x = 0$ tartományra korlátozódik csupán.

meg. Természetesen a kapott potenciálnak függetlennek kell lenni ezen $x_1, x_2 > x_0$ paraméter választására nézve, amit kiegészítő stabilitási vizsgálatnak kell eldöntenie minden egyes konkrét számolás esetén. A mNS módszer vonzó tulajdonsága azonban az, hogy konstrukciójából fakadóan helyes aszimptotikát 'ad' a potenciálra (nevezetesen azt, amit fizikai meggondolásból ismertnek tételezünk föl), másrészt véges elemű $\{\delta_l\}_{l=0}^{l=l_{max}}$ fázistolás sorozattal dolgozhatunk, amit fizikailag szintén a véges $x_0 \sim l_{max}$ hatótávolság létezése biztosít. A módszert tovább javíthatjuk, ha kettőnél több $x_i > x_0$ külső rádiusz paramétert veszünk fel, és a keletkezett túlhatározott RN egyenletrendszert legkisebb négyzetek módszerrel oldjuk meg a c_l együttható sorozatra nézve.

4.1.2 Cox-Thompson módszer

A NS módszer három hiányosságának (origóbeli szingularitás, aszimptotikus oszcillációk, zérus elsőrendű momentum) kiküszöbölését érte el Cox és Thompson[21] az alábbi ansatz bevezetésével:

$$g(x,t) = \sum_{l \in S} \gamma_l \, j_l(x_<) n_l(x_>), \tag{162}$$

ahol S az l impulzusmomentum kvantumszámok egy tetszőleges, N elemű *véges* halmaza és $x_< = \min(x,t), x_> = \max(x,t)$.

Könnyen belátható, hogy ez a választás is eleget tesz g összes megkövetelt (149)-(150) alatti tulajdonságainak.

Célunk most is a (148) alatti GLM egyenlet megoldása K-ra, mivel ebből határozhatjuk meg a q potenciált (147) szerint. Kíséreljük meg $K(x,t)$-t egy N elemű, nemfizikai $L \in T$ $(S \cap T = \oslash)$ 'impulzusmomentum' térhez tartozó, $j_L(t)$ Bessel-Riccati függvények szerint kifejteni:

$$K(x,t) = \sum_{L \in T} B_L(x) j_L(t), \tag{163}$$

ahol a B_L kifejtési együtthatók még az x változótól is függnek.

A (163) alatti kifejtéssel látszólag elbonyolítottuk a problémát, mert most már nemcsak a (162)-ben szereplő γ_l együtthatókat, de a T nemfizikai impulzusmomentum teret is meg kell határoznunk a fázistolásokból, hiszen a K magfüggvényt ezen ismeretlen téren értelmezett Bessel-Riccati függvények szerint fejtettük sorba. Azonban (163) behelyettesítése a (148) alatti GLM egyenletbe, ennek megoldását két, egymástól nem független, de szeparált, tehát egyszerűbb problémára vezeti vissza. Ugyanis, kihasználva a $j_m, m \in S \cup T$ függvények lineáris függetlenségét, a behelyettesítés eredményeképpen kapjuk:

$$\sum_{l \in S} \frac{\gamma_l}{l(l+1) - L(L+1)} = 1, \qquad L \in T \tag{164}$$

és

$$\sum_{L \in T} B_L(x) \frac{W[j_L(x), n_l(x)]}{l(l+1) - L(L+1)} = n_l(x), \qquad l \in S \tag{165}$$

ahol a Wronski determináns szokásos definíciója: $W[a(x), b(x)] \equiv a(x)b'(x) - a'(x)b(x)$.

Látható, hogy az ismeretlen $B_L(x)$ kifejtési együtthatók lineárisan jelennek meg, viszont a szintén ismeretlen, 'eltolt' (nemfizikai) L impulzusmomentumok nagyon is nemlineárisan fordulnak elő! Másrészt a γ_l kifejtési együtthatók formálisan meghatározhatók (164)-ből,

$$\gamma_l = \frac{\prod_{L \in T}[l(l+1) - L(L+1)]}{\prod_{l' \in S, l' \neq l}[l(l+1) - l'(l'+1)]}, \quad l \in S, \tag{166}$$

azonban az L-ek ismeretének hiányában ez nem jelent hasznot a potenciál meghatározása szempontjából. E cél érdekében továbbra is a (165) alatti egyenletet kell vizsgálnunk.

Felhasználhatjuk (165)-öt arra például, hogy meghatározzuk a $B_L(x)$ együtthatók aszimptotikus alakját. Tekintetbe véve a Bessel-Riccati függvények

$$j_l(x \to \infty) = \sin(x - l\pi/2), \qquad n_l(x \to \infty) = -\cos(x - l\pi/2) \tag{167a}$$

aszimptotikus formáit, kapjuk:

$$B_L(x \to \infty) = \sum_{l' \in S} K_{Ll'} \cos(x - l'\pi/2), \quad L \in T \tag{167b}$$

ahol $K \equiv M^{-1}$ az M matrix inverze, melynek elemeit

$$M_{lL} = -\frac{\cos[(l-L)\pi/2]}{l(l+1) - L(L+1)}, \quad l \in S, L \in T \tag{168}$$

[vö. (158)!] definiálja.

Az $\{L\}$ elemek meghatározására szolgáló egyenletet (163)-nak a (144) alatti PL reprezentációba való helyettesítéssel kaphatjuk meg, $x \to \infty$ határesetben. (155) és (167a) figyelembevételével kapjuk:

$$A_l \sin(x - l\pi/2 + \delta_l) = \sin(x - l\pi/2) + \sum_{L\in T} B_L(x\to\infty)\frac{\sin[(l-L)\pi/2]}{L(L+1)-l(l+1)}, \quad l \in S. \tag{169}$$

Ez az egyenlet már tartalmazza a kísérleti mérésekből kinyerhető fázistolásokat és így alapja lehet az inverz potenciál meghatározásának. (167b)-t behelyettesítve és a szereplő sin és cos függvényeket Euler alakba írva, homogén egyenletet kapunk az $\exp(\pm ix)$ lineárisan független függvényekre. Ezek együtthatóinak eltűnéséből a következő két egyenletet nyerjük:

$$e^{ix}: \qquad \frac{A_l}{2i}e^{-il\pi/2}e^{i\delta_l} = \frac{1}{2i}e^{-il\pi/2} + \frac{1}{2}\sum_{L\in T}\frac{\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}\sum_{l'\in S}K_{Ll'}e^{-il'\pi/2}; \tag{170a}$$

$$e^{-ix}: \qquad -\frac{A_l}{2i}e^{il\pi/2}e^{-i\delta_l} = -\frac{1}{2i}e^{il\pi/2} + \frac{1}{2}\sum_{L\in T}\frac{\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}\sum_{l'\in S}K_{Ll'}e^{il'\pi/2}. \tag{170b}$$

Valós potenciál esetén (azaz valós fázistolások és A_l normálási együtthatók esetén) a fenti két egyenlet egymás komplex konjugáltja, amit egyetlen egyenlet formájában is felírhatunk:

$$A_l e^{i(\delta_l - l\pi/2)} = e^{-il\pi/2} + \sum_{L\in T, l'\in S}\frac{\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}K_{Ll'}e^{i(1-l')\pi/2}, \quad l\in S \tag{171}$$

amely valós része,

$$A_l\cos(\delta_l - l\pi/2) = \cos(l\pi/2) + \sum_{L\in T, l'\in S}K_{Ll'}\frac{\sin(l'\pi/2)\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}, \tag{172a}$$

és imaginárius része,

$$A_l\sin(\delta_l - l\pi/2) = -\sin(l\pi/2) + \sum_{L\in T, l'\in S}K_{Ll'}\frac{\cos(l'\pi/2)\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}, \tag{172b}$$

két egyenletből álló csatolt rendszert jelent az L és A_l, $L\in T$, $l\in S$ sorozat meghatározására. Amennyiben a normálási állandó iránt nem érdeklődünk, a fenti két egyenletet eloszthatjuk egymással:

$$\cot(\delta_l - l\pi/2) = \frac{\cos(l\pi/2) + \sum_{L\in T, l'\in S}K_{Ll'}\frac{\sin(l'\pi/2)\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}}{-\sin(l\pi/2) + \sum_{L\in T, l'\in S}K_{Ll'}\frac{\cos(l'\pi/2)\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}}, \tag{173a}$$

vagy

$$\tan(\delta_l - l\pi/2) = \frac{-\sin(l\pi/2) + \sum_{L\in T, l'\in S} K_{Ll'} \frac{\cos(l'\pi/2)\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}}{\cos(l\pi/2) + \sum_{L\in T, l'\in S} K_{Ll'} \frac{\sin(l'\pi/2)\sin[\pi(l-L)/2]}{L(L+1)-l(l+1)}}. \tag{173b}$$

A fenti két egyenlet lehetőséget teremt arra [T3/10], hogy fázistolásokból határozzuk meg az $\{L\} \in T$ nemfizikai impulzusmomentum teret, amelyből (165), (163) és (147) révén megkapjuk az inverz potenciált.

A CT módszer egyik előnye a NS eljáráshoz képest az, hogy az origóban nem szinguláris potenciál családot generál véges fázistolás sorozatokból. A Bessel-Riccati függvények $x \to 0$ esetén érvényes sorfejtését felhasználva az alábbi értéket kapjuk a potenciál origóbeli nagyságára [T3/10]:

$$q(0) = (Q - 2(1-Q) \sum_{L\in T, l\in S} (G^{-1})_{Ll}/(1-2l)), \tag{174}$$

ahol a G matrix elemeit $G_{lL} = 1/(L-l)$ definiálja és

$$Q = \sum_{L\in T} b_l/(L+3/2),$$

ahol

$$b_L = \frac{\prod_{l\in S}(L-l)}{\prod_{L'\neq L\in T}(L-L')}.$$

Hasonló módon kiszámolhatjuk a potenciál első momentumát, ami végesnek adódik [T3/10]:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\, x\, x\, q(x) = \sum_{L\in T} b_L \tag{175}$$

4.1.3 A NS és CT módszer összehasonlítása.

Mivel a CT módszer sok előnyös tulajdonsággal rendelkezik a NS módszerhez képest, érdemes őket összehasonlítani egy pár gyakorlati példán keresztül azon célból, hogy megállapítsuk: versenyképesebb-e ez a módszer a mNS módszerrel szemben. Az összehasonlítást egy egységnyi erősségű és hatótávolságú vonzó Woods-Saxon (WS) és négyszög potenciál esetére végezzük el, atomfizikai egységeket használva. Az energia rögzített értéke $E = 18$ au ($k = 6$ au).

9. táblázat. WS potenciálból származó adatok, illetve a belőlük nyert inverz potenciálokat jellemző mennyiségek. (Magyarázatot ld. a szövegben.)

i	L_i	l_i	γ_i	$\delta_{l_i}^{WS}$	$\delta_{l_i}^{CT}$	$\delta_{l_i}^{NS}$	$\delta_{l_i}^{mNS}$
1	-0.1297	0	0.0779	0.1654	0.1650	0.1365	0.1630
2	0.8904	1	0.2586	0.1602	0.1602	0.1304	0.1523
3	1.9041	2	0.4285	0.1490	0.1490	0.1202	0.1444
4	2.9182	3	0.5557	0.1322	0.1321	0.1014	0.1275
5	3.9343	4	0.6077	0.1094	0.1094	0.0800	0.0997
6	4.9513	5	0.5691	0.0830	0.0829	0.0502	0.0798
7	5.9670	6	0.4627	0.0575	0.0575	0.0269	0.0516
8	6.9794	7	0.3341	0.0369	0.0368	0.0011	0.0239
9	7.9880	8	0.2190	0.0223	0.0222	-0.0111	0.0081
10	8.9934	9	0.1325	0.0129	0.0129	-0.0268	0.0021
11	9.9967	10	0.0738	0.0073	0.0072	-0.0341	0.0004
12	10.9985	11	0.0364	0.0040	0.0040	-0.0409	0.0007
13	11.9995	12	0.0141	0.0022	0.0021	-0.0704	0.0000

4.1.3.1 WS potenciál esete

Tekinsük a

$$V(r) = \frac{-1}{1+\exp((r-1)/0.25)} = k^2 q(x), \quad x = kr \tag{176}$$

potenciált, ahol megadtuk az előző pontbeli dimenziótlan mennyiségekkel való összefüggést is, valamint minden hossz- illetve energia dimenziójú mennyiség (V, r, k) és konstans a megfelelő au egységben értendő.

A 9. táblázatban láthatjuk a számolás eredményét. Az egyes oszlopokban szereplő mennyiségek jelentése a következő: i a futó index (sorrendje tetszőleges), L_i a (173)-ból számított eltolt (nemfizikai) impulzusmomentum 'kvantumszám', amelyek összessége a T teret határozza meg. l_i-k az input fizikai impulzusmomentum kvantumszámok S véges terét alkotják. γ_i-k a (162) alatti CT kifejtés együtthatói, amelyeket T és S ismeretében (166)-ból számolhatunk. Végül a fázistolások következnek: a $\delta_{l_i}^{WS}$ input adatok, és rendre a CT, a NS, illetve a mNS módszerrel kapott inverz potenciálokból visszaszámolt fázistolások, amelyeket mind $\delta_{l_i}^{WS}$-hez kell hasonlítani. (Ez utóbbi eredményt $r_0 = 1.5$

au, $x_1 = 12.90, x_2 = 12.92, x_3 = 12.94, x_4 = 12.96, l_{max} = 9$ technikai paraméterek alkalmazásával értem el.)

Az összehasonlítás a CT módszernek kedvez, de a mNS módszer is elfogadhatónak tűnik.

A NS módszerrel kapott eredmények viszonylagos gyengeségének okát jól megmutatja az 5. ábra, amelyen az általa és a CT módszer által szolgáltatott inverz potenciálokat rajzoltam fel. Jól láthatók a NS módszer korábban említett hiányosságai: az origóbeli szingularitás és az aszimptotikus oszcillációk. Ez utóbbiak felelősek a fázistolások viszonylagosan gyenge reprodukálásáért. Ugyanis, explicit számolással megmutatható (pl. az origó körüli levágással), hogy a hatáskeresztmetszetek (és így a fázistolások is) érzéketlenek a potenciál origóbeli viselkedésre. A CT módszerrel kapott inverz potenciál azonban vonalvastagságon belül megegyezik az eredeti WS potenciállal (kivéve az origó körül, ahol azonban véges értéket szolgáltat).

Abból a célból, hogy a CT módszer és a NS ejárás minőségét jobban össze lehessen hasonlítani, a 6. ábrán az egyes inverz potenciáloknak az input WS potenciáltól való eltérését rajzoltam fel. Ezen ábrázolás módban láthatjuk, hogy a két módszer csaknem hasonló kvalitással rendelkező potenciált szolgáltat: az legjobb belül, érzékeny kis távolságokra az origó körül, valamint nagy távolságokra, ahol a potenciál már igen kis értéket vesz fel. A hasonló kvalitás azonban csak látszólagos, mert nagyságrendi különbséget takar: a CT módszer két nagyságrenddel, azaz százszor pontosabb mint az eredeti NS eljárás!

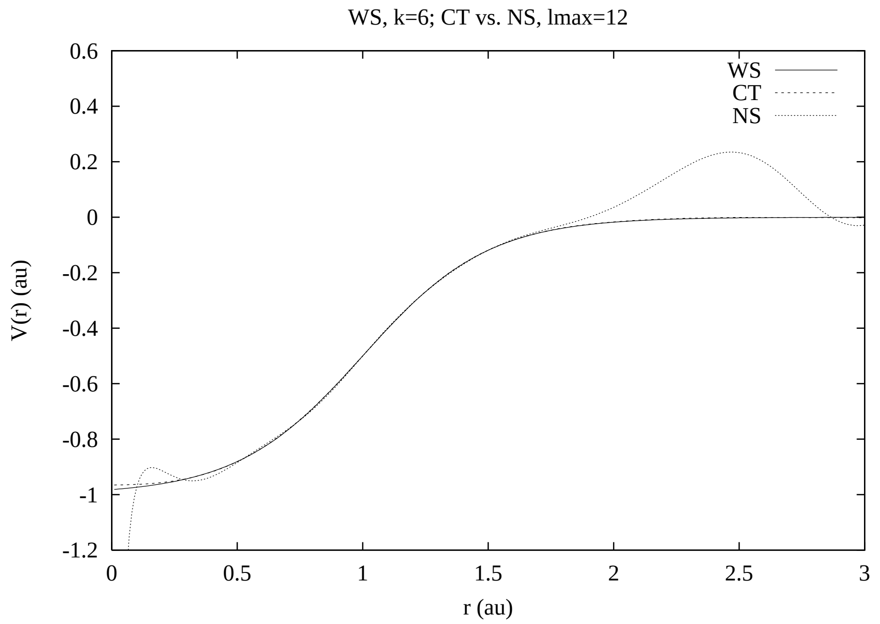
4.1.3.2 Négyszög potenciál esete

Azon célból, hogy a CT inverz módszer teljesítőképességét még jobban felderítsük, megvizsgájuk egy másik modell, a négyszög potenciál modell eredményeinek reprodukálásában nyújtott teljesítményét is. Ez a modell a potenciál hirtelen ugrása miatt nehezebb feladatot jelent, mint a sima viselkedésű WS potenciál (vö. Huck modell, 3.2.2 fejezet).

A használt négyszög potenciál definíciója:

$$V(r) = \begin{cases} -1, & 0 < r < 1 \\ 0, & r > 1 \end{cases} \tag{177}$$

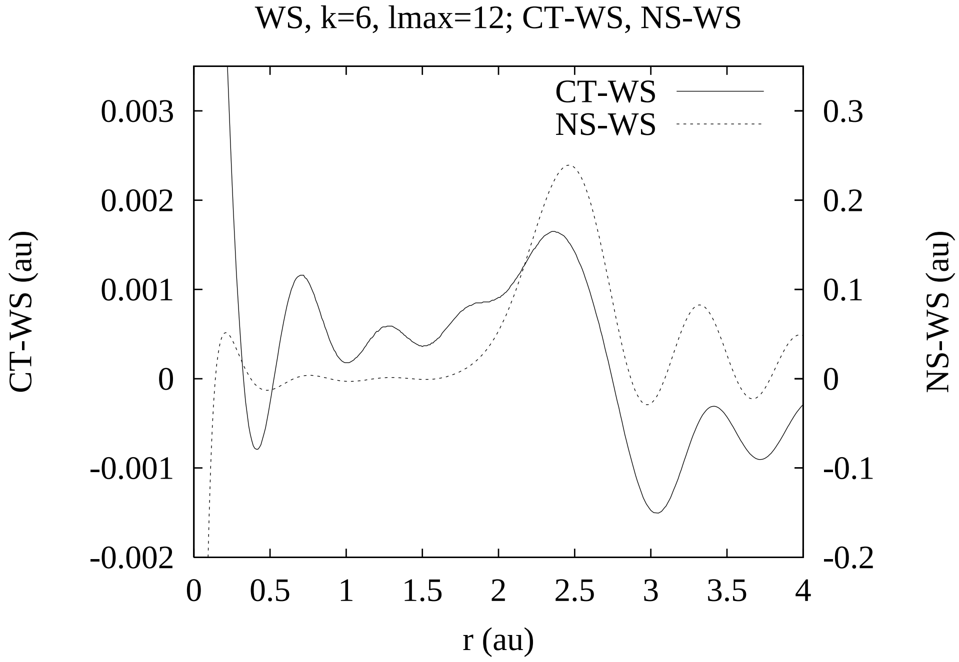
az alkalmazott energia pedig, mint az előbb, $E = 18$ au ($k = 6$ au) lesz.



5. ábra. CT inverz potenciál (rövid-szaggatott vonal), NS inverz potenciál (pontozott vonal), hasonlítva a (176) alatti WS input potenciálhoz (folyamatos vonal) az r radiális távolság függvényeként. A számolás $k = 6$ (au) hullámszám és $l_{max} = 12$ ($N = 13$) esetén lett végrehajtva.

A 10. táblázat tartalmazza az inputként használt $\{\delta_{l_i}^{box}\}$ fázistolás értékeket $l_i = 0, 1, ..., 7 \in S$ fizikai impulzusmomentum értékek esetén, valamint a CT módszerre jellemző, (173) megoldásaként előálló, $L_i \in T$ nemfizikai impulzusmomentum értékeket, amelyekből (165), (163) és (147) használatával megkapjuk az inverz potenciált. Ezt a potenciált láthatjuk a 7. ábrán, pontozott vonallal rajzolva. A 7. ábrán a NS módszerrel számolt potenciál is látható (nagyobb oszcillációt mutató szaggatott vonal), amelyet szintén a 10. táblázat $\{\delta_{l_i}^{box}\}$ adataiból számoltam ki (156-159), (153) és (147) felhasználásával. Végül a numerikus összehasonlítás kedvéért megadom a 10. táblázatban az inverz potenciálokból visszaszámolt $\{\delta_{l_i}^{CT}\}$, $\{\delta_{l_i}^{NS}\}$ és $\{\delta_{l_i}^{mNS}\}$ fázistolásokat is.

Látható mind az ábrából, mind a táblázatból, hogy a CT módszer jobb potenciált ad. Az is észrevehető, hogy a CT potenciál most nagyobb amplitúdóval oszcillál az egzakt



6. ábra. A CT és WS potenciálok közti különbség (folytonos vonal) valamint a NS és WS potenciálok közti eltérés (pontozott vonal). Vegyük észre a két nagyságrendbeli különbséget a jobb és bal oldali ordináta között!

potenciál körül, mint a WS példa esetén. Ezt a tényt a kevesebb (tizenhárom helyett nyolc) adattal magyarázhatjuk. Ugyanakkor azt is megállapíthatjuk a 10. táblázatból, hogy a mNS módszer szintén elfogadható eredményt ad. Ez utóbbi számolást az $r_0 = 1.05$ au, $x_1 = 6.90, x_2 = 6.92, x_3 = 6.94, x_4 = 6.96, x_5 = 6.98, l_{max} = 9$ technikai paraméterek alkalmazásával értem el. Az mNS potenciált nem tüntettem fel a 7. ábrán, az a NS módszer által adotthoz hasonló alakú belül, kisebb oszcillációval rendelkezik kívül, és $r_0 > r$ tartományban definíció szerint zérus.

Az eddigi tapasztalatok a CT módszer használatával kapcsolatban megmutatták, hogy ezen eljárásban nehézséget jelenthet a (173) alatti nemlineáris egyenletrendszer megoldása kísérleti input adatokkal. Mivel a CT módszer eme szűk keresztmetszetének tágítása különböző nemlineáris megoldási technikák (pl. simulating annealing, vagy controlled

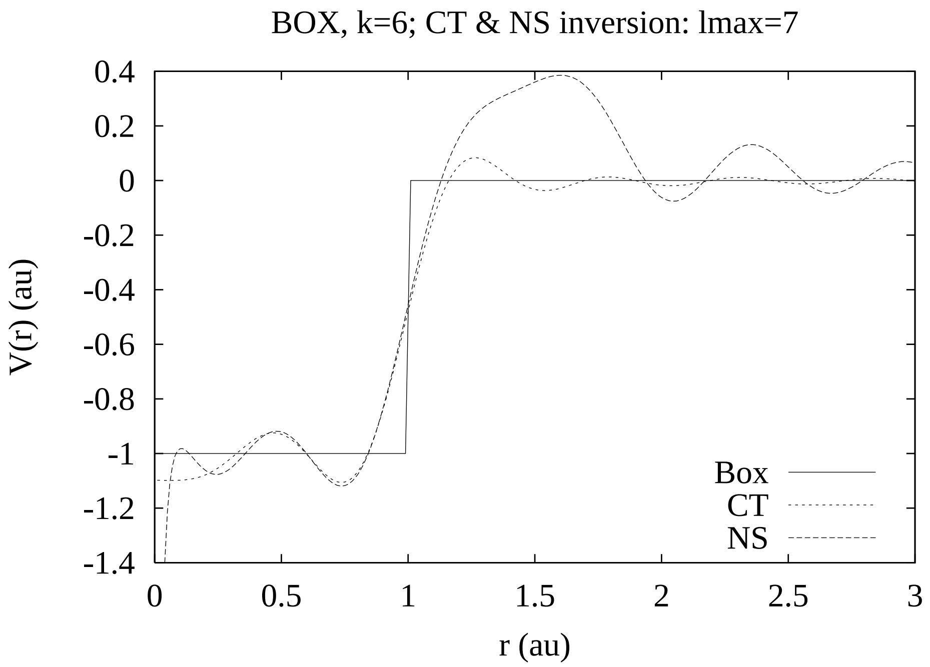
10. táblázat. Négyszög potenciálból származó fázistolás adatok $k = 6$ au esetén, illetve a belőlük nyert inverz potenciálokat jellemző mennyiségek. (Magyarázatot ld. a szövegben.)

i	L_i	l_i	γ_i	$\delta_{l_i}^{box}$	$\delta_{l_i}^{CT}$	$\delta_{l_i}^{NS}$	$\delta_{l_i}^{mNS}$
1	-0.1309	0	0.0807	0.1676	0.1681	0.1263	0.1694
2	0.8904	1	0.2667	0.1611	0.1601	0.1216	0.1554
3	1.9089	2	0.4155	0.1405	0.1413	0.0985	0.1441
4	2.9047	3	0.6744	0.1547	0.1537	0.1116	0.1554
5	3.9373	4	0.6243	0.1085	0.1092	0.0634	0.0997
6	4.9780	5	0.2723	0.0427	0.0420	-0.0093	0.0357
7	5.9963	6	0.0530	0.0107	0.0111	-0.0411	0.0082
8	7.0010	7	-0.0167	0.0019	0.0016	-0.0892	0.0013

random search globális minimum kereső algoritmusok) használatával még feljesztés alatt áll, valamint komplex és Coulomb kölcsönhatások esetére is általánosítani kell a módszert, a továbbiakban a mNS eljárást fogom használni a fizika különböző területein előforduló kölcsönhatások meghatározására.

4.2 A mNS módszerrel elért eredmények

Ebben a fejezetben rögzített E energia mellett mért differenciális hatáskeresztmetszetekből nyert fázistolás adatokból kiindulva, a mNS inverz szórás elmélet segítségével fogok meghatározni szórást okozó potenciálokat. Ehhez kellett építeni egy gyors és pontos inverz szórás kódot[23] (BIC, illetve BICPOL), amely a mNS elmélet alapján működik a következőképpen. A potenciál feltételezett r_0 hatósugarán kívüli tartomány két vagy több r_i pontjában megoldja a (153) alatti Regge-Newton (RN) egyenleteket a $\{c_l\}$ kifejtési együttható sorozatra, a bemenő $\{\delta_l\}$ fázistolás adatok felhasználásával. Ezen együtthatók azután, ugyancsak a RN egyenleten keresztül, meghatározzák a belső tartomány tetszőleges $r < r_0$ pontjában a Schrödinger egyenletet kielégítő $\psi_l(r)$ reguláris függvényeket, amelyekből végül r-szerinti deriválással és $l_{max}-$ig terjedő l-re való összegzéssel nyerjük az l-től független (de E-től még függő) (147) alatti inverz potenciált. Jóllehet az eljárás során mindvégig egyszerű lineáris algebrai egyenleteket kell megoldani, az inverz potenciál számolás mégsem tartozik a jól kondicionált feladatok közé. Ennek oka az, hogy a kulcsfontosságú lépés, a $\{c_l\}$



7. ábra. CT és NS inverz potenciál (pontozott, ill. szaggatott vonal) mint az r távolság függvénye. Ezt az eredményt a négyszög potenciál (folytonos vonal) által $E = 18$ au energián generált fázistolás adatokból nyertem.

együttható sorozat meghatározása érdekében (az eredeti NS eljárás esetén) olyan hermitikus végtelen matrixot kell kezelni, amely szinguláris de *van* inverze. Ez úgy lehetséges, hogy a matrix zérus sajátértékéhez tartozó vektor nem tartozik a matrix teljes rendszeréhez, azaz a zérus sajátérték nem a spektrum része. Mégis, ennek a speciális állapotnak a figyelembevétele (egy α paraméterrel, ld. 4.2 pont) elengedhetetlen a fizikailag helyes aszimptotikát szolgáltató inverz megoldás kiválasztásához. A nemegyértelműség megszűnik a mNS módszer bevezetésével, viszont az inverz feladat rosszul kondicionálttá válik, ami esetenként nem stabil, irreguláris megoldások keletkezésében jelentkezik. A tapasztalat az, hogy ilyen irreguláris, nem stabil megoldások jelentkezése esetén a technikai paramétereket $(l_{max}, r_0, x_1, x_2, ...)$ nem helyesen, az energia és a megsejthető hatótávolság által sugallt fizikának megfelelően választottuk. Általában szükséges az, hogy létezzen a technikai paramétereknek egy tartománya, amelyben gyakorlatilag azonos inverz potenciált generál a program. Az alább bemutatott eredmények mindegyike stabil megoldáshoz tartozik, ami azt jelenti, hogy az előző mondatban megfogalmazott kritérium teljesül az inverz potenciálra.

Mielőtt az eredmények bemutására rátérnék, röviden meg kell említenem a mNS módszer x^{-1} jellegű Coulomb, illetve x^{-4} aszimptotikájú (dipol) polarizációs inverz potenciálok meghatározására szolgáló kiterjesztését. (Az előbbi szerint számol a BIC, az utóbbi szerint pedig a BICPOL[23] kód.) Coulomb aszimptotika tipikusan magfizikai nehézion ütközések esetén fordul elő, míg elektron-atom ütközés esetén találkozhatunk polarizációs kölcsönhatással.

Mindkét potenciált hosszú hatótávolság jellemzi, ami az általuk okozott fázistolások $l-$beli lassú lecsengésében ölt testet. Ezért a mért fázistolásokat korrigálni kell, és a korrekció a jól ismert

$$U(x) = U_N(x) + U_C(x_0), \quad x < x_0 \tag{178a}$$

$$U(x) = U_C(x), \quad x > x_0 \tag{178b}$$

potenciál felbontáshoz tartozó

$$\delta_l^{tot} = \delta_l + \sigma_l \tag{179}$$

fázistolás felbontás szerint megy végbe. A fenti képletekben U_N jelenti a meghatározandó rövidhatótávolságú (nukleáris, vagy atomi) kölcsönhatást, U_C pedig a hosszúhatótávolságú (Coulomb, vagy polarizációs) ismert potenciált, amelyhez tartozó σ_l (Coulomb, vagy polarizációs) fázistolások szintén ismertek analitikusan, vagy számolhatók adott képletekből.

Mármost az is jól ismeretes, hogy hiába adnánk meg a fázistolás analízis eredményeképpen a $\{\delta_l\}$ sorozatot, annak invertálása nem az U_N potenciált adná meg. Ahhoz, hogy U_N-et korrektül kapjuk meg, figyelembe kell vennünk az U_C hosszúhatótávolságú potenciál jelenlétét az inverz eljárásban is, és ezt legegyszerűbben úgy tehetjük meg, hogy a (161) alatti aszimptotikus megoldást (amely $U_C = 0$ esetére érvényes) helyettesítjük a mNS módszer formuláiban a megfelelő

$$\psi_l(x \geq x_0) = A_l[\cos\delta_l \; F_l(x) + \sin\delta_l \; G_l(x)], \tag{180}$$

illetve

$$\psi_l(x \geq x_0) = A_l[\cos\delta_l \; \Phi_l^{(1)}(x; k, f) - \sin\delta_l \; \Phi_l^{(2)}(x; k, f)] \tag{181}$$

aszimptotikus megoldással, ahol F_l és G_l jelenti a reguláris és irreguláris Coulomb függvényt,[24] f^2 az atom dipol polarizálhatóságát, $\Phi_l^{(1)}$ és $\Phi_l^{(2)}$ pedig a reguláris és irreguláris polarizációs függvényeket, amelyek a P_l^i másodfajú Matthieu függvényekkel[25] fejezhetők ki a következő módon:

$$\Phi_l^{(i)} = \sqrt{x} P_l^{(i)}, \quad i = 1, 2. \tag{182}$$

További részletek [T3/5-6]-ban találhatók.

A hosszúhatótávolságú Coulomb és polarizációs potenciálokhoz tartozó reguláris és irreguláris függvények (180)-(181) alatti használata azt eredményezi, hogy sokkal kevesebb adattal (nevezetesen a kevés számú δ_l Coulomb-, illetve polarizációs-korrigált fázistolásokkal) kell dolgozni a (153) alatti RN egyenletekben, ami az aktuális probléma megoldását megkönnyíti.

További egyszerűsödés érhető el egy fázistranszformáció alkalmazásával, ami azt jelenti, hogy aszimptotikusan zérus potenciálra transzformáljuk a meghatározandó potenciált, azaz (178b)-ben $U = U_C(x_0)$ helyettesítést alkalmazunk, a teljes energiát pedig eltoljuk megfelelően:

$$E^B = E - k^2 U(x_0). \tag{183}$$

Az új δ_l^B fázistolásokat a két megoldás, a $\varphi_l^B = \psi_l^B/r$ transzformált és $\varphi_l^U = \psi_l/r$ nem transzformált megoldás logaritmikus deriváltjainak egyenlővé tételéből kapjuk

$$\frac{d}{dr} \ln \varphi_l^B(r)\bigg|_{r=r_0} = \frac{d}{dr} \ln \varphi_l^U(r)\bigg|_{r=r_0}, \tag{184}$$

ahol a

$$\psi_l^B(x \geq x_0) = A_l^B[\cos \delta_l^B j_l(k_B r) - \sin \delta_l^B n_l(k_B r)] \tag{185}$$

transzformált függvények az eltolt probléma megoldás függvényének felel meg a külső tartományban és $k_B = (2\mu E^B)^{1/2}/\hbar$.

Ekkor az mNS módszer RN alapegyenletei a következők lesznek ($\tilde{\rho} = k_B r$):

$$U^B(\tilde{\rho}) = -\frac{2}{\tilde{\rho}} \frac{d}{d\tilde{\rho}} \sum_{l=0}^{l_{max}} c_l^B \psi_l^0(\tilde{\rho}) \psi_l^B(\tilde{\rho})/\tilde{\rho}, \tag{186}$$

$$\psi_l^B(\tilde{\rho}) = \psi_l^0(\tilde{\rho}) - \sum_{l'=0}^{l_{max}} c_{l'}^B L_{ll'}^B(\tilde{\rho}) \psi_{l'}^B(\tilde{\rho}), \tag{187}$$

és

$$L_{ll'}^B(\tilde{\rho}) = \int_0^{\tilde{\rho}} \psi_l^0(\rho) \psi_{l'}^0(\rho) d\rho/\rho^2 \tag{188}$$

ahol $\psi_l^0(\tilde{\rho}) = j_l(\tilde{\rho})$ jelenti az $U_0^B \equiv 0$ eltolt referencia potenciálhoz tartozó reguláris (Riccati-Bessel) megoldást.

Ezzel a fázistranszformációval tehát azt értük el, hogy csak *egy* mNS programot kell építeni (nevezetesen a zérus referencia potenciálhoz tartozót, amely a könnyen és pontosan számolható Bessel és Neumann függvényeket használja), s a bonyolult Coulomb - , illetve Matthieu-függvényeket csak egy alkalommal, a transzformált fázisok kiszámításánál kell használni.

4.2.1 ^{12}C-^{12}C inverz potenciálok

4.2.1.1 Konvencionális inverz eljárás [T3/1]

A 8. ábrán látható két szögeloszlás analízisének eredménye[26] a következő néhány szám:

$$\begin{aligned} S_0 = -0.94903 - i0.20980, S_2 = -0.16455 - i0.03319, S_4 = 0.40499 - i0.32474, \\ S_6 = 0.46180 + 0.20388, S_8 = 0.86983 + 0.33833, S_{10} = 0.80017 - i0.00647, \\ S_{12} = 0.92504 - i0.00986. \quad (E = 9.5\,\mathrm{MeV}) \end{aligned} \tag{189}$$

$$\begin{aligned} S_0 = 0.06274 - i0.09459, S_2 = 0.00900 + 0.52218, S_4 = 0.61422 - i0.28877, \\ S_6 = -0.37978 + 0.15713, S_8 = 0.15269 - i0.19823, S_{10} = 0.47564 - i0.15576, \\ S_{12} = 0.74022 - i0.12912, S_{14} = 0.89550 - i0.04710. \quad (E = 11.38\mathrm{MeV}) \end{aligned} \tag{190}$$

Csak páros S-matrix elemeket látunk a fenti gyűjteményben, ugyanis azonos részecskék ütközése esetén (ha ezek bozonok) a differenciális hatáskeresztmetszetet szimmetrizáni kell:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2, \tag{191}$$

ahol a szórási amplitúdó

$$f(\theta) = f_C(\theta) + f_N(\theta), \tag{192}$$

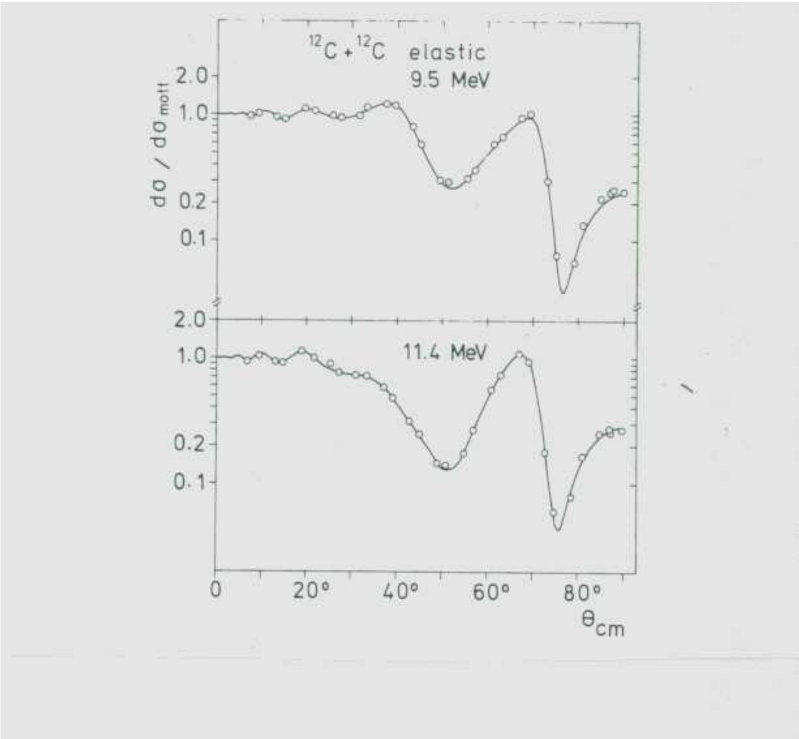
az

$$f_C(\theta) = -\frac{\eta}{2k\sin^2\theta/2}\exp\left\{2i\sigma_0 - 2i\eta\ln\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right\}, \tag{193}$$

Coulomb-szórási, valamint az

$$f_N(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)e^{2i\sigma_l}(S_l - 1)P_l(\cos\theta) \tag{194}$$

nukleáris szórási amplitúdóból áll, és az összegben előforduló páratlan impulzusmomentumokhoz tartozó tagok a Legendre polinom tulajdonsága miatt kiejtik egymást.



8. ábra. Rugalmas ^{12}C-^{12}C ütközés differenciális hatáskeresztmetszet mért értékei 9.50 és 11.38 MeV cm energián a Mott (tiszta Coulomb) hatáskeresztmetszethez viszonyítva (körök). Mérési hiba a körön belül van. Fázistolás analízisből kapott hatáskeresztmetszet görbe (folytonos vonal).

A fenti egyenletekben a szokásos jelöléseket alkalmaztam: $\eta = Z_P Z_T e^2/\hbar v$ a Sommerfeld paraméter, ahol $v = \hbar k$ a Z_P és Z_T töltésű projektil és target relatív sebessége; $\mu = m_P m_T/(m_P + m_T)$ a redukált tömeg és $\sigma_l = \arg\Gamma(l + 1 + i\eta)$ a Coulomb fázis.

A fázistolás analízis eredményeként előálló néhány fenti szám a Coulomb-korrigált (nukleáris) $S-$matrix elem, S_l, amiket szokás kifejezni a δ_l fázistolással is a jól ismert módon:

$$S_l = e^{2i\delta_l}. \tag{195}$$

Mivel az S-matrix elemek komplex számok, a fázistolások is azok:

$$\delta_l = \delta_l^R + i\delta_l^I, \tag{196a}$$

és ezért az S_l elemeket szokás az

$$S_l = \eta_l e^{2i\delta_l^R} \tag{196b}$$

alakban is írni, ahol

$$\eta_l = e^{-2\delta_l^I} \tag{196c}$$

az ún. abszorpciós tényező.

A 8. ábrán a kis körök a mért differenciális hatáskeresztmetszet értékeket jelentik, amelyek hibája kisebb mint a körök átmérője. A folytonos vonal az analízis eredményeképpen kapott (189), ill. (190) alatti értékekből a (191) szerinti képlettel kiszámolt elméleti értéket illusztrálja.

A 11. táblázatban a 9.50 MeV-hez tartozó (189) alatti S_l kísérleti adatoknak a valós fázistolás és abszorpciós tényezős átírását láthatjuk, ahol kihasználtam a fázistolásokban meglévő mod π szabadságot. A páratlan fázistolásokat interpolációval kaptam, kivéve az $l = 7$ parciális hullámban, amelyre nézve mNS eljárással kapott inverz potenciál igen nagyfokú érzékenységet mutatott.

A páratlan parciális hullámhoz tartozó adatok hiányát azon tapasztalat érvényesítésével pótoltam, hogy a nehéz ion ütközésben a potenciál sima függvénye a relatív távolságnak. Az ilyen potenciálok általában olyan fázistolásokat eredményeznek, amelyek simán függnek az impulzusmomentumtól, kivéve rezonanciák közelében. A táblázatban fix, mérésből származó értékeknek számítanak a páros l-ekhez tartozó fázistolások. Feltételezve, hogy a páratlan hullámban távol vagyunk a rezonanciáktól, lineáris interpolációval előállíthatjuk a páratlan l-ekhez tartozó fázistolásokat (és abszorpciós együtthatókat), a párosakhoz tartozókból. Ha sima potenciált kapunk az így kiegészült adatokból, akkor már csak ellenőrizni kell, hogy az inverz potenciál tényleg nem nagyon érzékeny-e az interpolált adatokra. Abban az esetben, ha nem kapunk sima potenciált, a páratlan parciális hullámokban megkeressük az 'érzékeny' l-et, amelyhez tartozó δ_l ill. η_l változtatására érzékenyen reagál az inverziós eljárás. A fenti esetben ez az $l = 7$ parciális hullám volt (a többi érzéketlennek bizonyult), az ehhez tartozó fázistolás, illetve abszorpciós együttható értéket kellett az interpolált értékektől eltérő módon választani (ld. 11. táblázat).

11. táblázat. ^{12}C - ^{12}C rendszer $E_{c.m.}$ = 9.50 MeV energiájú rugalmas szóródásának megfelelő Re δ_l valós fázistolások és η_l abszorpciós együtthatók (második és harmadik oszlop). Az inverz potenciálból visszaszámolt megfelelő értékek (negyedik és ötödik oszlop). A bemenő és visszaszámolt értékek közti különbség (hatodik és hetedik oszlop). A páratlan l-ekhez tartozó értékekkel kapcsolatos leírás a szövegben található.

l	Re δ_l	η_l	Re δ_l	η_l	ΔRe δ_l	$\Delta\eta_l$
0	7.9628	0.9719	8.0025	0.9871	-0.040	-0.015
1	6.3874	0.5699	6.3626	0.5733	-0.025	-0.003
2	4.8119	0.1679	4.9019	0.1550	-0.090	0.013
3	3.8078	0.3435	3.7653	0.3537	-0.043	-0.010
4	2.8037	0.5191	2.8390	0.5211	-0.035	-0.002
5	1.5058	0.5120	1.4808	0.5327	0.025	-0.021
6	0.2079	0.5048	0.2351	0.4715	-0.027	0.033
7	-1.5000	0.2000	-1.4157	0.2274	-0.084	-0.027
8	0.1855	0.9333	0.1686	1.0002	0.017	-0.067
9	0.0907	0.8668	0.0567	0.9858	0.034	-0.119
10	-0.0040	0.8002	0.0214	0.9925	-0.026	-0.192
11	-0.0047	0.8627	0.0079	0.9970	-0.013	-0.134
12	-0.0053	0.9251	0.0027	0.9990	-0.008	-0.074

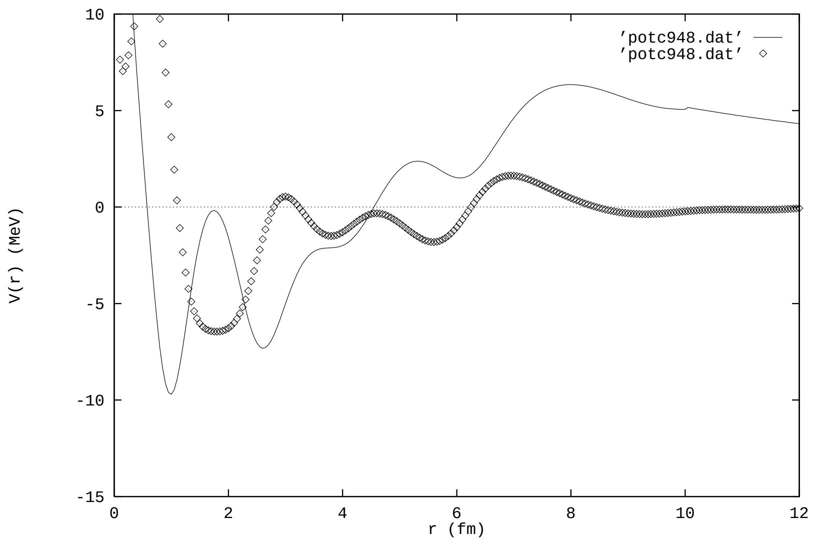
Hasonló eljárással kaptam a 12. táblázatban felsorolt adatokat, amelyek a 11.38 MeV energián mért ütközéshez tartoznak. Itt az $l = 9$-es parciális hullámban tapasztaltam rezonanciára utaló jeleket. Megjegyzendő, hogy ezen az energián a C-C rendszer ismert[27]

$l^\pi = 8^+$-as rezonanciával is rendelkezik. Ez jól tükröződik az $\eta_8 = 0.25$ abszorpciós együttható viszonylagos kis értékében.

12. táblázat. ^{12}C - ^{12}C rendszer $E_{c.m.} = 11.38$ MeV energiájú rugalmas szóródásának megfelelő Re δ_l valós fázistolások és η_l abszorpciós együtthatók valamint a visszaszámolt értékek és ezek inputtól való eltérése (ld. 11. táblázat feliratát).

l	Re δ_l	η_l	Re δ_l	η_l	ΔRe δ_l	$\Delta\eta_l$
0	8.9322	0.1135	8.9313	0.1146	0.001	-0.001
1	7.9961	0.3179	7.9709	0.3175	0.025	0.000
2	7.0600	0.5223	7.0442	0.5190	0.016	0.003
3	5.9961	0.6005	5.9732	0.6004	0.023	0.000
4	4.9321	0.6787	4.9155	0.6724	0.017	0.006
5	3.1534	0.5449	3.1273	0.5471	0.026	-0.002
6	1.3747	0.4110	1.3430	0.4087	0.032	-0.038
7	0.4587	0.3306	0.4485	0.3289	0.010	0.002
8	-0.4572	0.2502	-0.5096	0.2447	0.052	0.006
9	-0.7500	0.1600	-0.7793	0.1803	0.029	-0.020
10	-0.1583	0.5003	-0.1985	0.5400	0.040	-0.040
11	-0.1223	0.6259	-0.1417	0.7053	0.019	-0.079
12	-0.0864	0.7514	-0.0754	0.8270	-0.011	-0.076
13	-0.0563	0.8241	-0.0331	0.9128	-0.023	-0.089
14	-0.0263	0.8967	-0.0124	0.9630	-0.014	-0.066

Az inverz számolás eredményét a 9. és 10. ábrán láthatjuk. [A használt technikai paraméterek a következők: $r_0 = 10$ fm, $x_1 = 19.3, x_2 = 20.8, x_3 = 22.3, l_{max} = 12\,(E = 9.5$ MeV) és $r_0 = 10$ fm, $x_1 = 21, x_2 = 22.35, x_3 = 23.7, l_{max} = 14\,(E = 11.38$ MeV).] Amint várható, mindkét potenciál tiszta Coulomb potenciálként viselkedik az $r_0 = 10$ fm önkényesen választott aszimptotikus távolság környékén. Ez r_0 felett természetesen a mNS módszer lényegéből fakad, de az, hogy $r_0 = 10$ fm alatt is ez a viselkedés, az már a fázistolásokban megbúvó fizika miatt van. Kisebb, $r < 8$ fm távolságokra a magerők kezdenek dominálni és a Coulomb taszítás intenzív vonzásba megy át. A potenciál imaginárius része az abszorpcióért felelős, ami fluxusnak a rugalmas csatornából a rugalmatlanba való kiáramlásaként értelmezhető. Pozitív imaginárius potenciál viszont fluxus visszaáramlást jelent (feed-back), ami szintén észlelhető az ábrákon egyes relatív távolság tartományban.



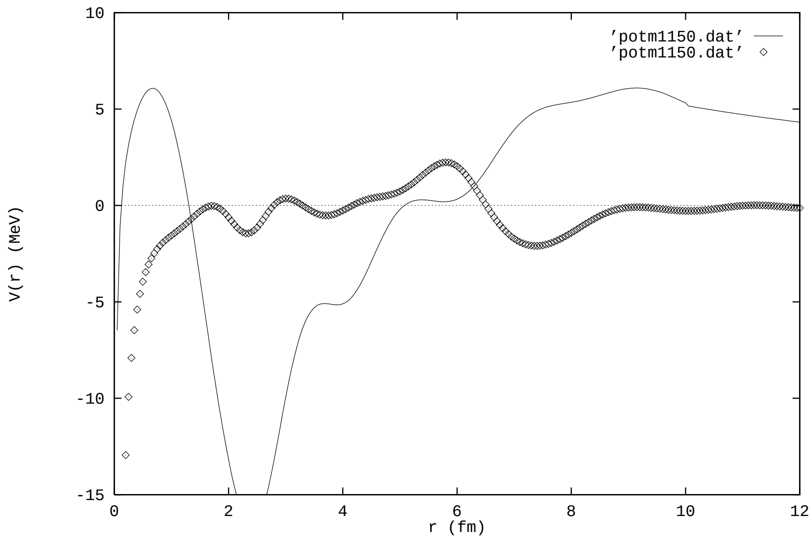
9. ábra Az $E_{c.m.} = 9.50$ MeV energián kapott V inverz potenciál valós része (folytonos vonal) és imaginárius része (pontozott vonal). $r_0 = 10$ fm a külső és belső tartományt elválasztó távolságot jelenti. A számolás egyéb technikai paraméterei: $x_1 = 19.3$, $x_2 = 20.8$, $x_3 = 22.3$, $l_{max} = 12$. A potenciál számolásához szükséges bemenő fázistolás adatokat a 11. táblázat tartalmazza.

4.2.1.2 Fázistolás analízissel egyesített inverz eljárás [T3/2]

Az előbbi számolás olyan adatokon nyugodott, amelyek a

$$\chi_S^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{exp} - d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{cal}}{\Delta d\sigma(\theta_i)/d\Omega}\right)^2, \tag{197a}$$

hiba négyzet kifejezés a (191) alatti $d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{cal}$ elméleti hatáskeresztmetszet képletben előforduló $\{S_l\}$ vagy $\{\delta_l\}$ $(l = 0, 2, 4, \ldots, l_{max})$ elemek szerint történő minimalizálásából



10. ábra Az $E_{c.m.} = 11.38$ MeV energián kapott V inverz potenciál valós része (folytonos vonal) és imaginárius része (pontozott vonal). $r_0 = 10$ fm a külső és belső tartományt elválasztó távolságot jelenti. A számolás egyéb technikai paraméterei: $x_1 = 21$, $x_2 = 22.35$, $x_3 = 23.7$, $l_{max} = 14$. A potenciál számolásához szükséges bemenő fázistolás adatokat a 12. táblázat tartalmazza.

származtak. A fenti hiba négyzet kifejezésben a $d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{exp}$ és $\Delta d\sigma(\theta_i)/d\Omega$ kifejezések az N adat pontból álló kísérleti hatáskeresztmetszetet és ezek abszolút hibáját jelölik. Ezeket az adatokat jelöltem kis körökkel a 8. ábrán.

A (197a) kifejezésnek az a tulajdonsága, hogy a nagy hibával mért adatoknak kis súlyt tulajdonít az összegzésben. Ilyen adatok a kis számértékkel rendelkező hatáskeresztmetszetek, amelyekre a rossz statisztika (kevés becsapódás szám) miatt kapnak nagy hibahatárt. Fizikailag azonban, pl. a kvázi-molekuláris rezonanciák szempontjából éppen a kis hatáskeresztmetszet értékek lehetnek érdekesek, ezért érdemes egy módosított hiba négyzet függvényen alapuló fázistolás analízist is alapul venni az inverz potenciál számolásához szükséges adatok kinyerése céljából, nevezetesen azt, amely definíciója:

$$\chi_S'^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{exp} - d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{cal}}{d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{exp}}\right)^2 . \tag{197b}$$

A továbbiakban e két fázistolás analízisból származó adatokkal végzett inverziós eljárást konvencionális módszernek nevezzük és C1 illetve C'1 szimbólumokkal jelöljük.

A konvencionális fázistolás analízis hátránya, hogy nem szolgáltat eredményt a páratlan parciális hullámokban. Egy kivezető utat ebből a dilemmából éppen a mNS módszer kínál. Írjuk át ugyanis a (187) alatti RN egyenletet a

$$\sum_{l'=0}^{l_{max}} M^B_{ll'}(\tilde\rho)\varphi^B_{l'}(\tilde\rho) = \varphi^0_l(\tilde\rho), \qquad l = 0, 1, \ldots, l_{max} \tag{198}$$

formába, ahol bevezettük az

$$M^B_{ll'}(\tilde\rho) = \delta_{ll'} + L^B_{ll'}(\tilde\rho)c^B_{l'} \tag{199}$$

matrixot.

Megadva a $\{c^B_l\}$ $(l = 0, 1, 2, ..., l_{max})$ együttható sorozatot, az $\mathbf{M}^B$ matrix ismertté válik és kiszámíthatjuk a $\varphi^B_l(\tilde\rho_i)$ függvényeket (198)-ból bármely $\tilde\rho_i = k_B r_i$ pontban. Ha a számolást $N \geq 2$ pontban végezzük el a $\tilde\rho_i > \tilde\rho_0$ tartományban, akkor a kapott $\varphi^B_l(\tilde\rho_i; c^B_0, c^B_1, ..., c^B_{l_{max}})$ értékeket felhasználhatjuk arra, hogy (185)-ből meghatározzuk a δ^B_l $(l = 0, 1, 2, ..., l_{max})$ fázistolásokat. Ezután (vissza)transzformálhatjuk δ^B_l-t [(184) használatával] δ_l-vé és kiszámolhatjuk a $d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{cal}$ hatáskeresztmetszetet [(191) révén], amit arra használunk, hogy minimalizáljuk a (197a), ill. (197b) hiba négyzetes kifejezéseket, amiket most, funkciójuknak megfelelően χ^2_c, ill. χ'^2_c szimbólumokkal jelölünk (az alsó indexbeli 'c'-vel emlékeztetve arra, hogy a minimalizációt a teljes $\{c_l\}$ $(l = 0, 1, \ldots, l_{max})$ spektrál együtthatók szerint végeztük el.)

Kétféle módszert alkalmazhatunk a δ^B_l fázistolásoknak a (185) alatti módosított RN egyenletek felhasználásával történő meghatározására. Az egyik lehetőség, amit M1 módszernek hívunk a továbbiakban, abban áll, hogy a $(\tilde\rho_i \geq \tilde\rho_0)$ tartományban megoldjuk a

$$\tilde\rho_i j_l(\tilde\rho_i)x - \tilde\rho_i n_l(\tilde\rho_i)y = \varphi^B_l(\tilde\rho_i; c^B_0, c^B_1, ..., c^B_{l_{max}}), \quad i = 1, \ldots, N \tag{200a}$$

egyenletet. Ez az egyenlet N egyenletet jelent a két (l=fix)

$$x = A^B_l \cos\delta^B_l, \qquad y = A^B_l \sin\delta^B_l \tag{200b}$$

ismeretlenre, mindegyik $l = 0, 1, ..., l_{max}$ parciális hullámban. A fázistolások ebből $\delta_l^B = \arctan(y/x)$ modulo $n\pi$ alakban adódnak. A másik lehetőség, amit M2 módszernek nevezünk, abban áll, hogy megoldjuk a ($\tilde{\rho}_i \geq \tilde{\rho}_0$) tartományban a következő túlhatározott egyenletrendszert

$$\sum_{l'=0,1,..}^{l_{max}} M_{ll'}^B(\tilde{\rho}_i)\tilde{\rho}_i j_{l'}(\tilde{\rho}_i)x_{l'} - \sum_{l'=0,1,..}^{l_{max}} M_{ll'}^B(\tilde{\rho}_i)\tilde{\rho}_i n_{l'}(\tilde{\rho}_i)y_{l'} = \varphi_l^0(\tilde{\rho}_i),$$

$$i = 1, \ldots, N; \qquad l = 0, 1, \ldots, l_{max} \tag{201a}$$

a $2(l_{max} + 1)$ számú

$$x_l = A_l^B \cos\delta_l^B, \qquad y_l = A_l^B \sin\delta_l^B \qquad l = 0, 1, \ldots, l_{max}, \tag{201b}$$

ismeretlenre, majd a $\delta_l^B = \arctan(y_l/x_l)$ modulo $n\pi$ összefüggésből határozzuk meg a fázistolásokat. A két módszer megegyezik $N = 2$ esetén.

Azon célból, hogy különbséget tehessünk a χ_c^2 és $\chi_c'^2$ hiba négyzet kifejezések minimalizálásával kapott kétféle, M1 és M2 módszer között, az utóbbi (tehát a $\chi_c'^2$ minimalizálásával kapott) eredményeket M$'$1 és M$'$2 szimbólumokkal fogom jelölni.

Minimalizációs eljárásként kétféle módszert fogok használni. Az egyik, az 'ellenőrzött véletlen keresés' (a továbbiakban CRS[28]) eljárás egy n-változós függvény globális minimumát keresi meg. A másik eljárás a minta szerinti keresés (PS[29]) eljárás relatív minimumot szolgáltat. Ez utóbbi módszer erősen függ a keresés induló pontjától, viszont olcsó (gyors). Ezért PS keresést használok az M1 (M'1) és M2 (M'2) egyesített módszerek esetén úgy, hogy a konvencionális módszerek (C1 és C'1) szolgáltatta eredményt (lineáris interpolációval a páratlan l-ekre) választom a kiindulási pontként.

A C1, C'1, M1, M'1, M2, M'2 módszerek alkalmazásával kapott inverz potenciálok jóságát leginkább azzal jellemezhetjük, hogy miként adja vissza a mért szögeloszlást. Ezért bevezetem a χ_V^2 hiba négyzet mértéket, amelyet a (197) alatti definícióból számolhatunk oly módon, hogy $d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{cal}$-t a V inverz potenciállal számolt $d\sigma(\theta_i)/d\Omega|_{pot}$ differenciális hatáskeresztmetszettel helyettesítjük. Ilyen módon bármelyik módszer jóságát egyetlen számmal jellemezhetjük.

4.2.1.3 A ^{12}C+^{12}C *rendszer inverz potenciálja* $E_{c.m.} = 7.998$ *MeV szórási energián*

A fenti sokféle módszerben való eligazodást segítendő, először egyetlen kiválasztott energiához, az $E_{c.m.} = 7.988$ MeV szórási energiához tartozó hatáskeresztmetszetből származó potenciálokat tekintjük át. Ezután fogom bemutatni a 8-12 MeV tartományban mért nyolc szögeloszlásból származtatott inverz (optikai) potenciálokat. Ezeket kiegészítve az előző pontbeli 9.5 és 11.38 MeV-hez tartozó ereményekkel, elegendő információ áll majd rendelkezésünkre általános következtetések levonására a C-C potenciálok alakját illetően.

Legelőször tehát egy konvencionális számolást végzek, amely során a (197) alatti χ_S^2 kifejezés minilizálása a $\{\delta_l\}$ $(l = 0, 2, ..., l_{max})$ fázistolás sorozatot eredményezi. Ezeket a páratlan l-ekhez tartozó fázisokkal kiegészítve (interpolációval, ill. kézzel variálva; sima potenciál követelmény) kapjuk az adatot a konvencionális (C1, C'1) inverz szórás számoláshoz. Egyúttal kiindulási pontot is szolgáltatunk az egyesített módszerek (M1, M'1, M2, M'2) induló $\{c_l\}$ $(l = 0, 1, ..., l_{max})$ spektrál együtthatók kiválasztásához.

A hatáskeresztmetszet fázistolás analízését mind a CRS mind a PS módszerrel elvégeztem, és a $\chi_S^2 = 6.56$ ill. 6.79 értékeket kaptam a végső hiba négyzetre. A PS minimalizációs eljárást páros l-kre $\mathrm{Re}S_l = 1$, $\mathrm{Im}S_l = 0$ kezdeti S-matrix értékekből kiindulva végeztem. A két eljárás praktikusan azonos S-matrix értékeket szolgáltatott még további három energián mért adatokra vonatkozóan is. Ott, ahol eltérés mutatkozott, a PS eljárás nem talált minimumot [nem volt megfelelő az $S_l = 1 + i0$ (l=páros) kiindulási pont], a CRS eljárásból származó fázistolásokat vettem alapul az inverz számolás számára.[5]

A 13. táblázat mutatja be a 7.998 MeV-re végzett konvencionális fázistolás analízis eredményét. A második és harmadik oszlop tartalmazza a C1 módszerrel ($\chi_S^2 = 6.54$ eredménnyel) kapott S_l $(l = 0, 2, ..., l_{max})$ matrix elemeket, a hatodik és hetedik oszlop pedig a C'1 módszerrel nyert (és $\chi_S'^2 = 0.00135$ hiba négyzetet produkáló) S_l elemeket. A negyedik, ötödik, illetve a nyolcadik és kilencedik oszlopban a δ_l^R valós fázistolások és az η_l abszorpciós tényezőket soroltam fel a hozzátartozó interpolált értékekkel együtt. Ez utóbbiak közül egyetlen kivételt látunk, az l =7-es parciális hullámban, Re $\delta_7 = \delta_7^R = -1.5$ és $\eta_7 = 0.2$, amelyek nem interpolált értékek, hanem 'kézzel' lettek választva mindkét esetben úgy, hogy az adatok sima potenciált eredményezzenek (ld. 9.50 MeV-en elvégzett korábbi inverz számolást).

Mejegyzendő, hogy az átlagtól való eltérés szükségessége indokolható lenne az l = 5-ös parciális hullámban is, ugyanis a $7 - 8$ MeV tartományban megfigyeltek egy 4^+-os potenciál

[5] Itt jegyzem meg, hogy rendelkezésre áll a C-C szórásadatok fázistolás analízisének eredménye a 6-14 MeV energia tartományban 0.025 MeV lépés finomsággal.[26] A megfelelő Coulomb-korrigált S_l matrix értékeket PS minimalizációs eljárással kapták[26] úgy, hogy elindulva 6 MeV-ből 0.025 MeV lépésközzel a 14 Mev felé, mindig az előző energiánál megtalált S-matrix érték sorozat szolgált kiindulási pontul. (6 MeV-en gyakorlatilag a Coulomb szórás dominál még.)

rezonanciát.[30] Azonban az l=5-és parciális hullámban végzett variálás, ellentétben az l=7-esben végzettel, nem eredményezett sima inverz potenciált.

13. táblázat. Az $E_{c.m.} = 7.998$ MeV energián szóródó $^{12}C + ^{12}C$ rendszer S_l adatai, amelyet a (197) alatti χ_S^2 és $\chi_S'^2$ hiba négyzetes kifejezés minimalizálásával kaptam a szövegben leírt C1 és C′1 konvencionális fázistolás analízis módszer eredményeként. A δ_l^R valós fázistolásokat és az η_l abszorpciós koefficienseket is felsoroltam, a páros parciális hullámú interpolált értékekkel együtt. A δ_7^R fázist szabad paraméterként kezeltem annak érdekében, hogy sima inverz potenciált kapjak. Amint látható, a C1 módszer esetében az η_7 tényezőt is variálni kellett. A megfelelő inverz potenciálokat a 11. ábrán láthatjuk.

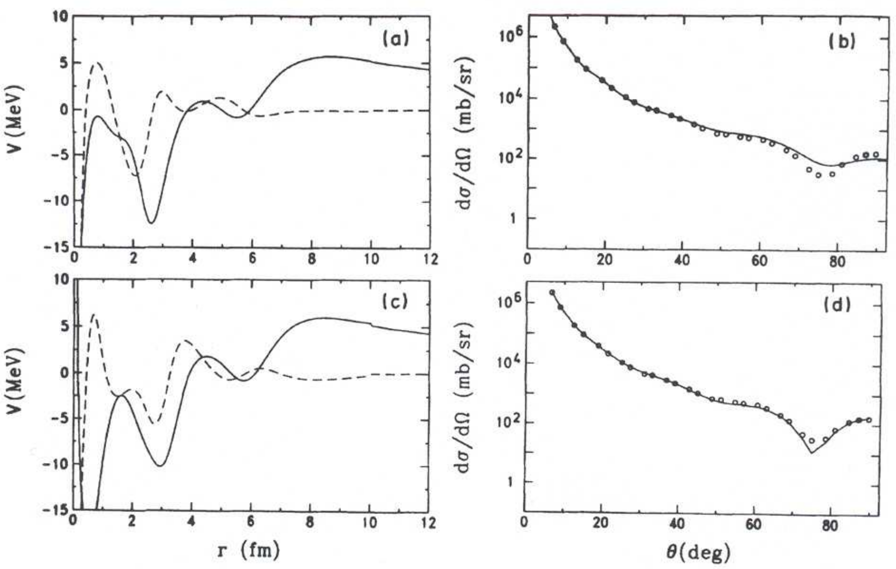
l	$\mathrm{Re}S_l{}^a$	$\mathrm{Im}S_l{}^a$	δ_l^{Ra}	$\eta_l{}^a$	$\mathrm{Re}S_l{}^b$	$\mathrm{Im}S_l{}^b$	δ_l^{Rb}	$\eta_l{}^b$
0	−0.5060	−0.8626	8.3741	1.0000	0.2897	−0.3257	9.0029	0.4359
1			6.9065	0.5809			7.2594	0.5454
2	−0.0190	−0.1607	5.4389	0.1618	0.0237	−0.6545	5.5159	0.6549
3			4.4583	0.4928			4.2545	0.4480
4	0.6446	0.5130	3.4777	0.8239	0.2305	−0.0706	2.9931	0.2410
5			1.7783	0.9053			1.3881	0.4503
6	0.9745	0.1550	0.0789	0.9868	0.5984	−0.2771	−0.2168	0.6595
7			−1.5000	0.2000			−1.5000	0.7348
8	0.8205	0.2877	0.1686	0.8695	0.7825	−0.2094	−0.1308	0.8100
9			0.1021	0.8634			−0.1143	0.9050
10	0.8551	0.0609	0.0356	0.8573	0.9809	−0.1944	−0.0978	1.0000
11			0.0061	0.8891			−0.0620	1.0000
12	0.9200	−0.0431	−0.0234	0.9210	0.9986	−0.0522	−0.0261	1.0000

[a] C1 módszer: χ_S^2 minimalizálása ($\chi_S^2 = 6.54$ eredménnyel; a hozzá tartozó inverz potenciál $\chi_V^2 = 609.8$ hibát ad).
[b] C′1 módszer: $\chi_S'^2$ minimalizálása ($\chi_S'^2 = 0.00135$ eredménnyel; a hozzá tartozó inverz potenciál $\chi_V^2 = 60.8$ hibát ad).

A 11. ábra bemutatja a konvencionális módszerrel kapott inverz potenciálokat, és az ezekből visszaszámolt differenciális hatáskeresztmetszeteket. Eltérést tapasztalunk a 70° és 90° közötti tartományban, így ezek a potenciálok nem tekinthetők az input adatokkal konzisztensnek. Ezt jelzi a nagy $\chi_V^2 = 609.8$ érték is. Az adatok tüzetesebb vizsgálatából megállapíthatjuk, hogy a reprodukció azon szöggtartományokban nem kielégítő, ahol az adatok relatív hibája a legnagyobb. Erre a tényre alapozva vezettük be a (197b) alatti $\chi_S'^2$ hiba kifejezést, amelyben a nagy relatív hibával rendelkező mérési adatok erősebben vannak képviselve. Jóllehet ezen $\chi_S'^2$ kifejezés minimalizációjából származó S-matrix adatok (ld. 13. táblázat 6-7. oszlopa) szinte teljesen eltérnek az előbbiektől (ld. 2-3. oszlop), a 11.c ábrán bemutatott megfelelő potenciál az előzőtől (ld. 11.a ábra) csak kismértékben különbözik, főleg a belső tartományokban, ami nem nagyon járul hozzá a hatáskeresztmetszethez. Azonban ez a kis különbség elegendő a kísérleti adatok jobb reprodukciójához (ld. 11.d ábra), amit a kisebb $\chi_V^2 = 60.8$ hiba négyzet érték is jól mutat. További előnyként említhető, hogy a C'1 módszerrel elvégzett számolásban csak δ_7^R-et kellett variálni, de η_7-et már nem (vö. 13. táblázat, 8-9. oszlop). A technikai paraméterek ugyanazok voltak a két, C1 és C$'$1, módszerrel elvégzett számolás esetén, nevezetesen: $r_0 = 10$ fm, $\tilde{x}_i = 11.5, 12.5, 13.5$ és $l_{max} = 12$.

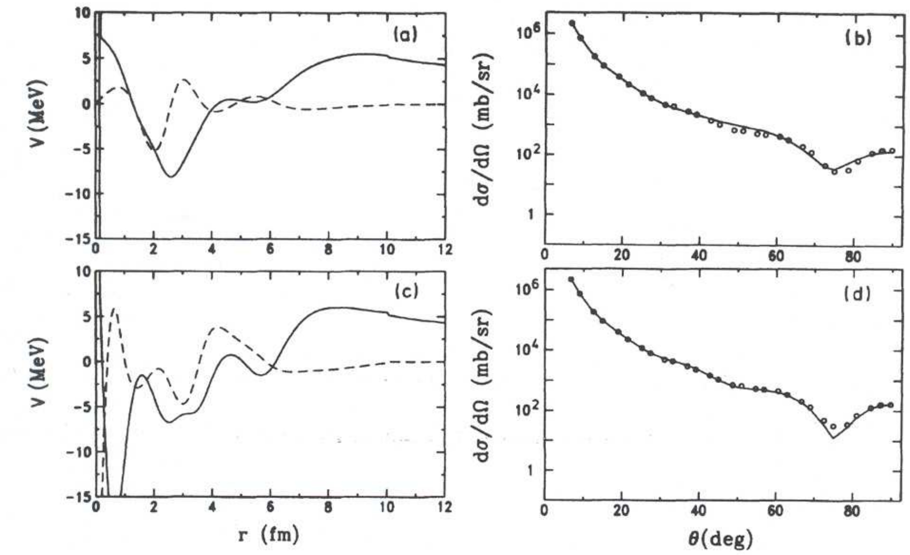
A 12(a), 12(c), és 13(a), 13(c) ábrák az M1, M$'$1, és M2, M$'$2, módszerek alkalmazásával kapott inverz potenciált mutatják be. Ezen potenciálok konzisztenciája a 12(b), 12(d), és 13(b), 13(d) ábrán láthatók, amelyek rendre $\chi_V^2 = 275.0,\ 61.9$ hibákkal rendelkeznek az M1, M$'$1 módszereket illetően, valamint $\chi_V^2 = 597.1,\ 71.6$ hibákkal az M2, M$'$2 módszereket tekintve. Mindegyik esetben a PS módszert használtam a χ_c^2 és $\chi_c'^2$ hiba kifejezések minimalizálására, a konvencionális számolásból adott spektrál koefficienseket tekintve kiinduló adatnak. A technikai paraméterek ugyanazok voltak, mint az előbbi, konvencionális számolásban.

Összességében elmondható, hogy a 12. és 13. ábrán nem tapasztalunk drámai változást a potenciálok alakjában a 11. ábrán feltüntetetthez képest, azaz megállapítható, hogy mind a hat (C1, C$'$1, M1, M$'$1, M2, M$'$2) módszerrel kapott hatféle potenciál hasonló szerkezetet mutat. A valós részt két minimum jellemzi, egy erősebb $r \approx 2.5 - 3.0$ fm-nél és egy gyengébb $r \approx 5.5 - 6.0$ fm környékén. A Coulomb taszításból eredő maximum mind a hat módszer esetén csaknem egységesen $r \approx 8.5$ fm körül mutatkozik, amely kisebb, mint a mNS lényegéhez tartozó külső sugár, amelyet $r_0 = 10$ fm-nél rögzítettem le. Ezen illesztő sugárnál a M1 és M$'$1 módszer kismértékű diszkontinuitást produkált [ld. 12(a) és 12(c) ábra]. A potenciálok imaginárius része is hasonló, amennyiben zérushoz tartanak a külső részeken és néha pozitív értéket vesznek fel belül, a reakció zónában, amely jelenség valószínűségi fluxus áramlásra utal a rugalmatlan csatornából vissza a rugalmasba.



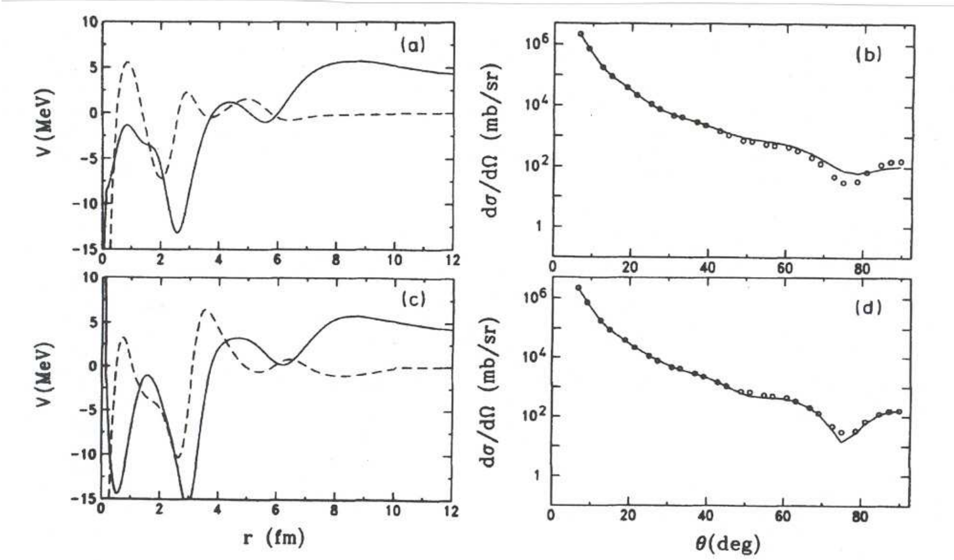
11. ábra. Az $E_{c.m.} = 7.998$ MeV energián a C1 and C′1 módszerekkel elvégzett konvencionális inverz szórás számolás eredményei. (a): C1 módszerrel kapott inverz potenciál valós (———) és imaginárius (- - - - -) része; (b): a kísérleti adatok (o o o) C1 módszerrel kapott inverz potenciállal történő reprodukciója (———), ami χ^2_V=609.8 értéket ad; (c) és (d): ugyanaz mint (a) és (b) azonban C′1 módszerrel, ami χ^2_V=60.3 hiba értékkel rendelkezik. A megfelelő fázistolásokat ld. a 13. táblázatban.

A potenciálokban tapasztalható hasonlóságot avval magyarázhatjuk, hogy a spektrál együtthatók optimalizálása (a PS módszerrel) nem hoz drámai változást a hozzátartozó δ_l $(0, 1, ..., l_{max})$ fázistolásokban (ld. 14. és 15. táblázat). Ez a megállapítás érvényes az $l = 7$-es parciális hullámra, ami érzékenynek bizonyult a sima potenciál elérése érdekében. A 'kézzel' beállított $\delta^R_7 = -1.5$ fázistolást az M1 ill. M′1 módszer -1.44 ill. -1.55 értékűre módosította, míg az M2 ill. M′2 módszerek -1.47 ill. -1.49-re (vö. a 14. és 15. táblázat megfelelő értékeit a 13. táblázatéval). Az abszorpciós együtthatóbeli változás igen kevéssé befolyásolja a valós potenciál alakját.



12. ábra. $E_{c.m.} = 7.998$ MeV energián az M1 and M′1 egyesített módszerekkel végzett inverz szórás számolás. (a): Az M1 módszerrel kapott inverz potenciál valós (———) és imaginárius (- - - - -) része; (b): a kísérleti adatok (o o o) reprodukciója (———) az M1 módszerrel kapott inverz potenciállal, ami χ^2_V=275.0 értéket ad; (c) és (d): ugyanaz mint (a) és (b), azonban M′1 módszerrel, ami χ^2_V=61.9 hiba értékkel rendelkezik. A megfelelő fázistolásokat ld. a 14. táblázatban.

Az eddigiek alapján úgy tűnik tehát, hogy a vizsgált C1,...,M′2 hatféle módszerből nem lehet egyértelműen kiválasztani *a* módszert. Amint a 11.-13. ábrák mutatják, mind a hat módszer kvalitatíve ugyanazt az eredményt adja. Ezért a hat közül a továbbiakban azt a módszert fogom előnyben részesíteni, amely (i) a legkisebb χ^2_V hiba értéket adja és ugyanakkor (ii) sima potenciál alakot is szolgáltat. Az első kritérium az inverz számolás konzisztenciájával kapcsolatos; a másodikat azért követelem meg, mivel az eddigi, különböző (direkt) módszerekkel leszármaztatott nehéz-ion potenciálok mind sima viselkedésűek voltak. Az inverz számolás egyértelműségére való tekintettel[22] azonban megjegyzem, hogy némely esetben kaphatunk kis χ^2_V értékeket erősen oszcilláló potenciál esetén is.



13. ábra. $E_{c.m.} = 7.998$ MeV energián az M2 and M′2 egyesített módszerekkel végzett inverz szórás számolás. (a): Az M2 módszerrel kapott inverz potenciál valós (———) és imaginárius (- - - - -) része; (b): a kísérleti adatok (o o o) reprodukciója (———) az M2 módszerrel kapott inverz potenciállal, ami χ^2_V=597.1 értéket ad; (c) és (d): ugyanaz mint (a) és (b) azonban M′2 módszerrel, ami χ^2_V=71.6 hiba értékkel rendelkezik. A megfelelő fázistolásokat ld. a 15. táblázatban.

4.2.1.4 Az egyesített módszerrel kapott ^{12}C+^{12}C *potenciálok az* $E_{c.m.} \approx 8 - 12$ *MeV tartományban* [T3/2]

A 14. ábra bemutatja a ^{12}C+ ^{12}C rendszerre vonatkozó inverz potenciálokat a $E_{c.m.} \approx 8-12$ MeV szórási energia tartományban. A potenciál Re $V(r)$ valós része az ábra bal oldalán, az Im $V(r)$ imaginárius része, az ábra jobb oldalán látható. A számolást a következő nyolc energia értéken hajtottam végre: 7.988, 8.535, 9.057, 9.48, 10.533, 10.954, 11.503 és 12.077 MeV. Ezen energia értékek, egy tizedes jegyre lekerekítve, a 14. ábra középső részén is fel lettek tüntetve. A potenciálokat függőlegesen egymás alá helyeztem el, fentről lefelé energia szerint növekvő sorrendben. Növekvő energia szerinti csoportosításban a következő módszerekkel történt az inverz számolás (ld. 16. táblázat): C′1, C1, M′1, C1, M2, M2,

14. Táblázat. Az $E_{c.m.} = 7.998$ MeV energián szóródó $^{12}C +^{12} C$ rendszerre vonatkozó, az M1 és M'1 egyesített módszerrel kapott S_l matrix elemek valós és imaginárius részei. A minimalizálás a (197) egyenleteknek megfelelő χ_c^2 és $\chi_c'^2$ hiba négyzet kifejezések szerint történt. Feltüntettem a fázistolások δ_l^R valós részét, valamint az η_l abszzorpciós együtthatókat is. Ezen táblázathoz tartozó inverz potenciálok és hatáskeresztmetszetek a 12. ábrán láthatók.

l	Re$S_l{}^a$	Im$S_l{}^a$	δ_l^{Ra}	$\eta_l{}^a$	Re$S_l{}^b$	Im$S_l{}^b$	δ_l^{Rb}	$\eta_l{}^b$
0	−0.5498	−0.8353	8.3483	1.0000	0.3129	−0.3108	9.0337	0.4410
1	0.2262	0.3045	6.7491	0.3793	−0.2394	0.3547	7.3655	0.4279
2	−0.0136	−0.1863	5.4614	0.1868	0.0749	−0.5876	5.5611	0.5924
3	−0.4646	−0.0092	4.7223	0.4647	−0.4740	0.3819	4.3733	0.6087
4	0.6672	0.4959	3.4612	0.8313	0.1875	−0.0927	2.9120	0.2092
5	−0.8385	−0.2553	1.7186	0.8765	−0.3929	0.0742	1.4775	0.3998
6	0.9556	0.1266	0.0659	0.9639	0.6992	−0.2287	−0.1581	0.7357
7	−0.2206	−0.0587	−1.4408	0.2283	−0.8177	−0.0360	−1.5488	0.8185
8	0.8331	0.2858	0.1652	0.8808	0.7684	−0.2756	−0.1722	0.8164
9	0.8699	0.1583	0.0900	0.8842	0.8790	−0.2232	−0.1243	0.9069
10	0.8640	0.0450	0.0260	0.8652	0.9454	−0.1450	−0.0761	0.9565
11	0.8782	−0.0257	−0.0146	0.8786	0.9826	−0.0792	−0.0402	0.9858
12	0.9124	−0.0482	−0.0264	0.9137	0.9994	−0.0374	−0.0187	1.0000

[a]M1 módszer: χ_c^2 hiba négyzet minimalizálása ($\chi_c^2 = 6.56$ eredménnyel; a hozzátartozó inverz potenciál $\chi_V^2 = 275.0$ értéket ad).
[b]M'1 módszer: $\chi_c'^2$ hiba négyzet minimalizálása ($\chi_c'^2 = 0.00149$ eredménnyel; a hozzátartozó inverz potenciál $\chi_V^2 = 61.9$ értéket ad).

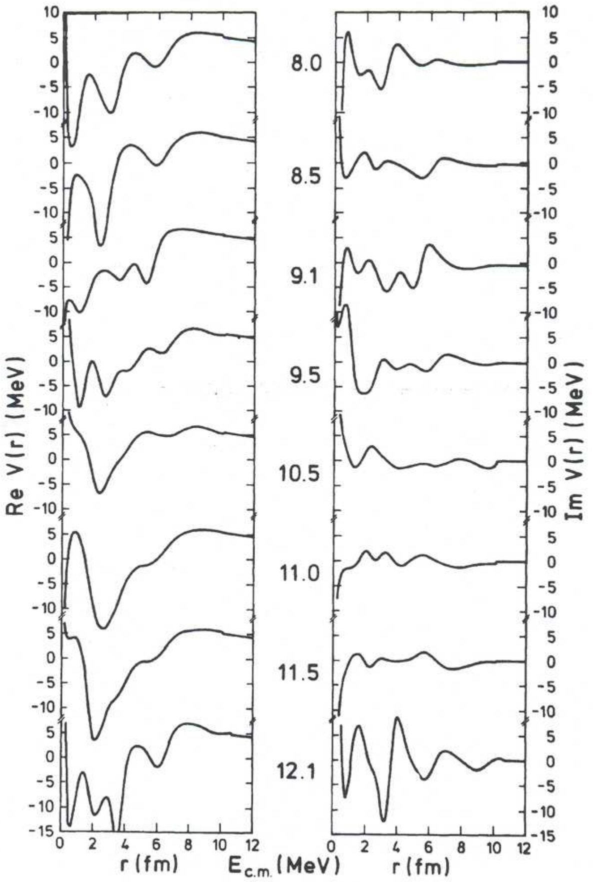
M1, C'1, amelyek jósága rendre a következő χ_V^2 hiba négyzetekkel jellemezhetők (egészre kerekítve; ld. a 16. táblázatot is): 61, 101, 22, 16, 74, 53, 110, és 216. Megjegyzendő még, hogy az előző pontban a 9.50 és 11.38 MeV energián számolt és a 9., illetve 10. ábrán bemutatott inverz potencálok teljesen beleillenek a 14. ábra potenciál alakjai közé.

15. táblázat. Az $E_{c.m.} = 7.998$ MeV energián szóródó $^{12}C +^{12}C$ rendszerre vonatkozó, az M2 és M'2 egyesített módszerrel kapott S_l matrix elemek valós és imaginárius részei. A minimalizálás a (197) egyenleteknek megfelelő χ_c^2 és $\chi_c'^2$ hiba négyzet kifejezések szerint történt. Feltüntettem a fázistolások δ_l^R valós részét, valamint az η_l abszorpciós együtthatókat is. Ezen táblázathoz tartozó inverz potenciálok és hatáskeresztmetszetek a 13. ábrán láthatók.

l	$\mathrm{Re}S_l{}^a$	$\mathrm{Im}S_l{}^a$	δ_l^{Ra}	$\eta_l{}^a$	$\mathrm{Re}S_l{}^b$	$\mathrm{Im}S_l{}^b$	δ_l^{Rb}	$\eta_l{}^b$
0	−0.4935	−0.8697	8.3813	1.0000	0.1292	−0.3426	8.8197	0.3662
1	0.1742	0.6267	6.9330	0.6505	−0.1190	0.1282	7.4427	0.1749
2	−0.0244	−0.1614	5.4228	0.1633	0.0844	−0.6122	5.5663	0.6180
3	−0.4547	0.2432	4.4668	0.5156	−0.7885	0.6148	4.3813	0.9999
4	0.6447	0.5169	3.4795	0.8264	0.2386	−0.0906	2.9602	0.2552
5	−0.8483	−0.3640	1.7735	0.9231	−0.4389	0.1500	1.4062	0.4638
6	0.9727	0.1680	0.0855	0.9871	0.6665	−0.2601	−0.1860	0.7154
7	−0.1904	−0.0398	−1.4677	0.1945	−0.7276	−0.1197	−1.4893	0.7373
8	0.8276	0.2917	0.1695	0.8775	0.7997	−0.2403	−0.1460	0.8350
9	0.8513	0.1703	0.0987	0.8682	0.8493	−0.1826	−0.1059	0.8687
10	0.8489	0.0572	0.0336	0.8508	0.9105	−0.1329	−0.0725	0.9201
11	0.8867	0.0089	0.0050	0.8868	0.8448	−0.1637	−0.0957	0.8605
12	0.9177	−0.0364	−0.0198	0.9184	0.9996	−0.0293	−0.0147	1.0000

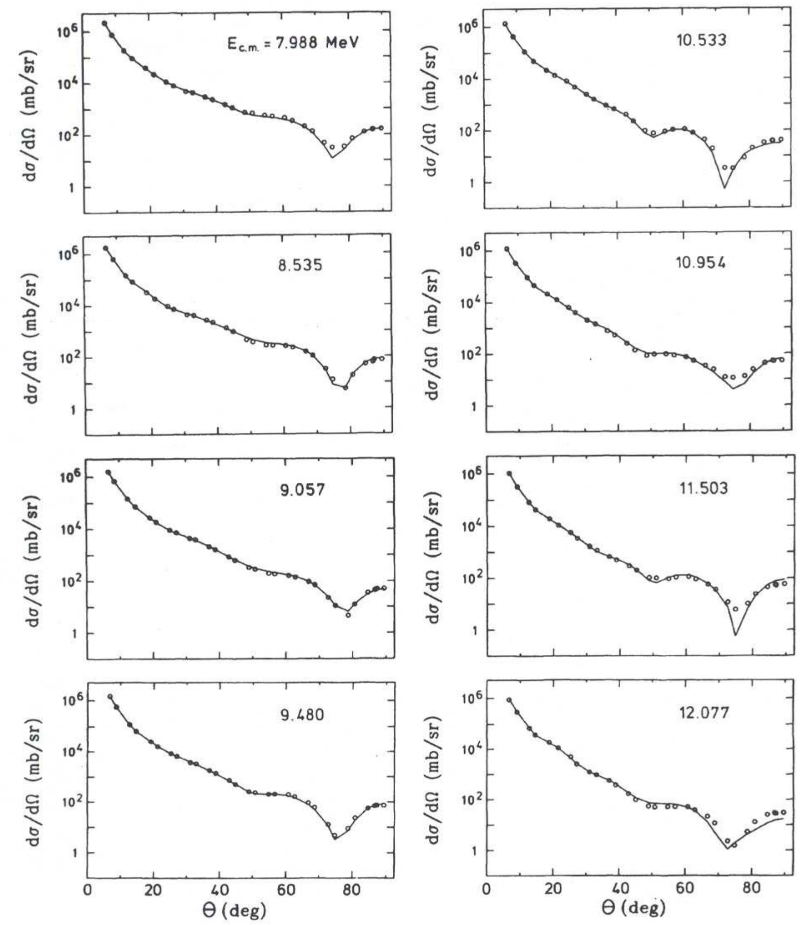
[a]M2 módszer: χ_c^2 hiba négyzet minimalizálása ($\chi_c^2 = 6.33$ eredménnyel; hozzátartozó inverz potenciál $\chi_V^2 = 597.1$ értéket ad).
[b]M'2 módszer: $\chi_c'^2$ hiba négyzet minimalizálása ($\chi_c'^2 = 0.00224$ eredménnyel; hozzátartozó inverz potenciál $\chi_V^2 = 71.6$ értéket ad).

Az ábrákat tanulmányozva megállapítható, hogy a potenciálok alakban különböznek a Woods-Saxon formától. A potenciálok valós része −10 és 9 MeV közötti tartományban változnak, maximális értéküket $r \approx 8 - 8.5$ fm körül érik el. Az imaginárius rész kisebb a valósnál. Az $r \approx 8.4 - 8.8$ fm körül formálódó ≈ 6.2 MeV magasságú Coulomb gát kialakulása megerősíti azt a kezdeti feltevést, hogy a szórási folyamatot tiszta Coulomb



14. ábra. Különböző inverz módszerekkel kapott $^{12}C+^{12}C$ potenciálok valós és imaginárius részei, az ábra közepén jelölt energiák esetén. A potenciálokhoz tartozó input és visszaszámolt szögeloszlásokat a 15. ábrán láthatjuk.

potenciál kormányozza egy bizonyos illesztési rádiusz felett (amelyet 10 fm-nek vettem). Két-három esetben csekély diszkontinuitás látható az illesztési sugárnál; ez eredhet a minden



15. ábra. Voit és társai[26] által mért $^{12}C+^{12}C$ szögeloszlások (o o o) a feltüntetett energiákon. A kísérleti adatok reprodukálása (———) a 14. ábrán bemutatott inverz potenciálokkal.

numerikus számolásban jelen levő pontatlanságból, és/vagy a magasabb parciális hullámok elhanyagolásából.

A potenciálok imaginárius (abszorptív) része ugyanolyan hatótávolsággal rendelkezik, mint a valós rész. Minden esetben van egy sekély abszorbeáló (negatív) rész a külső tartományban. Néhány pozitív maximumot is látunk az imaginárius részen, általában azokon a helyeken, ahol a valós résznek minimuma van. Hasonló jelenséget találtak már C-C rendszerre, Feshbach formalizmust alkalmazva.[31]

A 14. ábrán az $E_{c.m.} = 9$ és 10.5 MeV közötti intervallumban a potenciálok alakjában érdekes változást figyelhetünk meg. A valós potenciálban ez a változás az $r \approx 6.0$ fm körüli külső kisebb minimum fokozatos eltűnésében, illetve az erős, $r \approx 2.4 - 3$ fm körüli minimum újra megjelenésében jelentkezik. Magasabb energiákon ez az $E_{c.m.} = 10.5$ MeV-en újra megjelenő belső minimum marad a valós potenciál domináns része, jóllehet a külső minimum is újra megjelenik. Ezen másodlagos külső minimum léte magyarázatot ad a kettős minimummal rendelkező Woods-Saxon potenciál fittelés[32] sikerére. Ugyancsak ezen sekély minimum értékekkel hozhatók összefüggésbe a ^{12}C kvázi-molekuláris klaszter konfigurációk léte. A 2-3 fm körüli hangsúlyos minimum pedig a szivar alakúra deformált ^{24}Mg maggal hozható kapcsolatba.

A kis távolságokon jelentkező potenciál szingularitások, amelyek véges fázistolás sorozatot használva szükségszerűen fellépnek, a mNS módszer hiányosságából fakadnak (ld. 4.1.1 pont), ezért fizikai magyarázat nem adható megjelenésükre. Szerencsére a potenciál kis távolságú része nem ad érzékelhető járulékot a hatáskeresztmetszethez.

A 14. ábrán bemutatott potenciálokat használhatjuk arra, hogy fázistolásokat számítsunk azon energia környékén, amelyre a potenciál vonatkozik. Ilyen számolással felderíthetjük a $C^{12} + {}^{12}C$ ütköző rendszer rezonancia szerkezetét. A 16. táblázatban felsoroltam azon l_{res} rezonáns parciális hullámokat, amelyekre $\delta^R_{l_{res}}(E \approx E_{c.m.}) = \pi/2$. Ha ezeket összehasonlítjuk azon rezonáns parciális hullámokkal, amelyeket Abbondanno adott meg[30], akkor szinte teljes egyezést kapunk.

4.2.2 Nemlokális n-^{40}Ca potenciál lokalizációja

A 2.5 fejezetben kifejlesztettünk és megvizsgáltunk egy Taylor sorfejtésen alapuló eljárást nemlokális potenciálok lokalizálására. Az inverz szórás módszer egy másik lehetőséget kínál e feladat megvalósítására, hiszen fázistolás sorozatból származtat le lokális kölcsönhatást. Ezért igen érdekes lenne azt megvizsgálni, hogy a 2.6 fejezetben alkalmazási

16. táblázat. Azon paraméterek listája, amelyeket a 14. ábrán feltüntetett inverz potenciálok meghatározására használtam. Első oszlop a c.m. energiát mutatja. A második oszlopban az inverz számoláshoz használt módszert tüntettem fel (ld. szöveg). A potenciál konzisztenciáját jellemző χ_V^2 hiba négyzetet láthatjuk a harmadik oszlopban. A negyedik oszlopban azon l_{res} parciális hullámok vannak felsorolva, amelyekben a valós fázistolások átmennek $\pi/2$-en $E_{c.m.}$ közelében. Az ötödik oszlopban azon l_{res}^{ReV} értékeket sorolom fel, amelyre a valós potenciálok rezonánsak. A maradék oszlopok tartalmazzák a számolásokban alkalmazott l_{max}, r_0, és $\tilde{\rho}_i$ technikai paramétereket.

$E_{c.m.}$(MeV)	módszer	χ_V^2	l_{res}	l_{res}^{ReV}	l_{max}	r_0(fm)	$\tilde{\rho}_1$	$\tilde{\rho}_2$	$\tilde{\rho}_3$	$\tilde{\rho}_4$
7.988	C′1	61	$5,7$	7	12	10.0	11.5	12.5	13.5	
8.535	C1	101	$5,7$	$5,7$	12	10.0	12.5	13.5	14.5	
9.057	M′1	22	7	7	12	10.0	12.75	13.75	14.75	
9.48	C1	16	7	7	14	10.0	13.0	14.0	15.0	16.0
10.533	M2	74	6	6	12	10.0	13.5	14.5	15.5	
10.954	M2	53	$7,9$	$7,9$	14	10.0	15.5	16.5	17.5	
11.503	M1	110	7	7	14	10.0	15.5	16.5	17.5	
12.077	C′1	216	7	–	14	10.5	16.0	17.0	18.0	

példaként bemutatott n-^{40}Ca Frahn-Lemmer nemlokális potenciálra milyen lokális potenciált nyerheünk inverz eljárással, és hogy ez hasonlít-e a Taylor sorfejtéssel kapotthoz.

Azonban mielőtt elvégeznénk az inverziót az 1. táblázatban (részben) megadott fázistolás adatokból, meg kell említeni, hogy az összehasonlítás csak részleges, kvalitatív lehet. Ugyanis, amíg a 2. fejezetben kidolgozott lokalizációs eljárás fix impulzusmomentum (fix-l) esetre származtatott le lokális potenciálokat nemlokálisokból, addig a jelen fejezetben tárgyalt inverz módszerek fix energia (fix-k) esetén 'érvényes' lokális potenciálok leszármaztatására képesek.

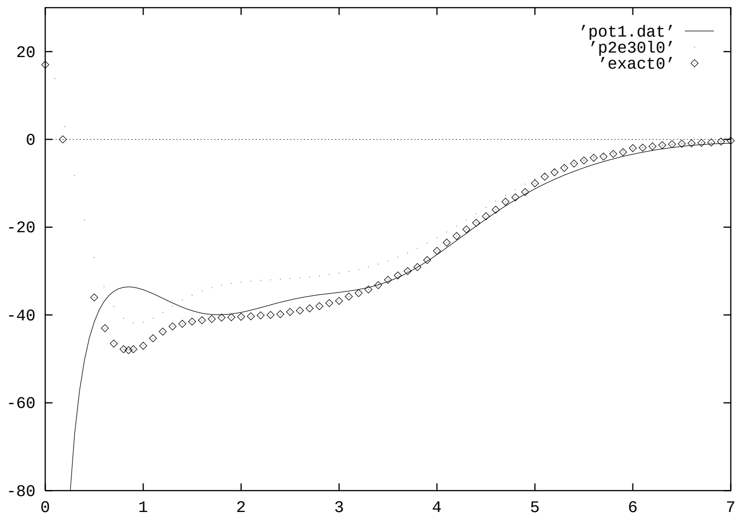
Ennek ellenére instruktívnak tartom az öszehasonlítást, hiszen a különféle módon lokalizált potenciálok mégis csak egyazon (fizikailag jól motivált) nemlokális potenciálból származnak, s ennek lényeges fizikai tulajdonságait tükrözniük kell. Ilyen tulajdonság lehet a hatótávolság, vagy a potenciálerősség.

A 3. illetve 4. ábra kapcsán fizikai diszkussziót nem mellékeltem, ott csak a Taylor sorfejtéses eljárás konvergenciájára koncentráltam. Azonban jól látható a különböző l-ekhez tartozó potenciálok origótól való kiszorulása (mind a nemlokális, 3. ábrán bemutatottak, mind a lokalizált, 4. ábrához tartozók esetén), ami a centrifugális potenciál taszító hatásával magyarázható. Továbbá, a 4. ábrán jól látható a lokalizált potenciálok egyenlő hatótávolsága, valamint az, hogy erősségük is hasonló: a potenciálok általában 0-6 fm között fejtik ki hatásukat, ami -40 és 0 MeV közötti vonzó potenciál erősségben nyilvánul meg. (A rövid távon jelentkező centrifugális taszítás a hullámfüggvényt magasabb l-ekre kiszorítani igyekszik.)

A 16. ábrán a mNS módszerrel elvégzett inverz számolás eredményét láthatjuk (folytonos vonal) a n-^{40}Ca szórás esetére E =30 MeV energián. Összehasonlításul feltüntettem (pontozott vonallal jelölve) a 2. fejezetben kidolgozott Taylor sorfejtésen alapuló eljárásból $l = 0$ parciális hullámra kapott lokalizált potenciált (λ = 2-ad rendben). A 16. ábrán látható harmadik görbe (nagyobb pontozott vonal) az egzakt lokalizációs eljárás[4] $l = 0$-hoz tartozó eredményét mutatja, amelynek csak elméleti jelentősége van, ugyanis az eredeti nemlokális probléma integro-differenciál egyenletletéhez tartozó két lineárisan független megoldásának ismeretére van szükség meghatározására.

Amint látjuk a 16. ábrán, mind a három lokalizált potenciál hasonló fizikai jellemzőkkel rendelkezik: hasonló a hatótávolságuk és az erősségük is. Az origóbeli szingularitás a véges fázistolás sorozat használatából adódott a mNS módszer esetén, de ennek kimutatható numerikus hatása nincs a hatáskeresztmetszetre. (A használt technikai paraméterek a következők voltak: $r_0 = 8$ fm, $x_1 = 11, x_2 = 11.8, l_{max} = 16$. Az input fázistolások az 1. táblázatban vannak részben megadva.)

Így tehát elmondhatjuk, hogy nemcsak a fázistolások konvergenciájával (ld. 1. táblázat), és az egzakt (de csak elméleti jelentőségű) lokalizációs eljárással[4] igazoltuk a 2. fejezetbeli Taylor-sorfejtésen alapuló módszerünket, hanem az inverz szórás módszerrel is.



16. ábra. E=30 MeV energiájú n-^{40}Ca szórást leíró Frahn-Lemmer nemlokális potenciálhoz tartozó fázistolások mNS invertálásából származó lokális potenciál (folytonos vonal). Taylor sorfejtésen alapuló eljárásból nyert lokalizált potenciál ($l = 0$, $\lambda = 3$-ad rend, pontozott vonal). Egzakt lokalizációs eljárás[4] eredménye $l = 0$-ra (nagyobb pontozott vonal).

4.2.3 n-α potenciálok [T3/3]

Az inverz szóráselmélet keretén belül lehetőség van spin-pálya kölcsönhatási potenciálok meghatározására is. Melbourne-i együttműködő partnereimmel elsőként határoztam meg fázistolásokból a nukleon-alfa részecske közti centrális és spin-pálya kölcsönhatást [T3/3]. Ezen rendszer vizsgálata azért is igen érdekes volt, mert az 1 MeV-es szórást egy $p-$hullámú rezonancia uralja és kiderült[33], hogy a fix-l melletti inverzió (amely más elmélet és eljárás, mint a fix-E melletti inverzió) a miénkkel teljesen megegyező potenciált szolgáltatott. Az 1-20 MeV szórási energia tartományban elvégzett vizsgálatunk eredménye az lett, hogy a spin-pálya köcsönhatás lényegesen gyengébb a centrális kölcsönhatásnál és a potenciálok nem hasonlítanak a Woods-Saxon alakhoz. Ezenkívül az 1 MeV-es potenciál gyökeresen eltér a többitől, amire magyarázatot az említett $p-$rezonancia szolgáltat. Mielőtt az eredmények részletes ismertetésére rátérnék, bemutatom a n-α rendszerre kapott globális (spin-flip lehetőségét elhanyagoló) centrális NS-inverz potenciálokat.

4.2.3.1 n-α centrális potenciálok

n-α centrális potenciálokat Lun és társai[34] által leszármaztatott fázistolás sorozatokat alapul véve kaptam a mNS-eljárás segítségével. A 17. táblázatban felsorolt adatokat Lunék az ún. uniter feltétel[35] alkalmazásával kapták, amely segítségével lehetséges az abszolút érték képzés miatt a hatáskeresztmetszet adatokban elvesző általános fázist is visszanyerni küszöbenergia alatt. A választott energia $E = 14.9, 16.4, 20.0, 23.7$ MeV volt. A módszer az 'elveszett' fázisra vonatkozó igen erősen nemlineáris egyenletre vezet, amelynek két megoldását találták. Ezekből származó input fázistolásokat $G1$ és $G2$ sorozatnak nevezve, kétféle inverz potenciál sorozatot kapunk, amiket a 17. ábrán tüntettem fel. A potenciálok jóságát a visszaszámolt fázistolások jellemzik, ezeket szintén felsoroltam a 17. táblázatban. Jól látható a 17. ábrán, hogy a $G1$ fázistolás sorozathoz tartozó inverz potenciálok erősebb energiafüggést mutatnak, mint a $G2$-höz tartozók. Azonban a potenciálokból nem lehet megítélni, hogy melyik sorozat a jobb, ugyanis mindkét potenciál típus visszaadja a bemenő fázistolásokat pár százalékon belül. Ez azért van, mert a két típus közti eltérés az origó körüli szinguláris tartományban jelentkezik csupán, és erre a tartományra a hatáskeresztmetszet (fázistolás) számolás nem érzékeny. Ezért a potenciálok jóságát illető döntés más inverz módszerekre marad. E szempontból a CT módszer jöhet számításba, mivel ez az eljárás véges potenciál értéket szolgáltat az origóban (ld. 4.1.2 fejezet).

4.2.3.2 n-α spin-pálya potenciálok

Mivel a nukleonoknak feles spinjük van, a n-α potenciálok igazából nemcsak centrális részből tevődnek össze, abban spin-pálya tagnak is kell lenni. A nukleon zérus spinű atommaggal történő ütközése során $j = l \pm 1/2$ a megmaradó teljes (parciális) impulzusmomentum. Ezek sajátfüggvényei szerint fejtjük sorba a szórásamplitúdót, amely így két paraméterrel, a $\delta_l^{(+)}$, illetve a $\delta_l^{(-)}$ fázistolással parametrizálható. (Részleteket ld. például a Satchler könyv[36] Függelékében.)

DWBA közelítést használva a fázistolások sorba fejthetők:[37]

$$\delta_l^{(\pm)} = \delta_l^{(0)} + a_l^{(\pm)} C_l^{(1)} + (a_l^{(\pm)})^2 C_l^{(2)} + \dots , \tag{202}$$

ahol

$$a_l^{(\pm)} = \frac{2}{\hbar^2} < \mathbf{sl} >= \begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases}, \quad j = \begin{cases} l + \frac{1}{2} \\ l - \frac{1}{2} \end{cases} . \tag{203}$$

17. táblázat. Az uniter feltétel alapján kapott s- és p-hullámú fázistolás input adatok (*orig*). A 17. ábrán bemutatott inverz potenciálokból visszaszámolt s- és p-hullámú fázistolások (*inv*). A $G1$ és $G2$ jelölés a fázistolás analízisben meglevő, magasabb parciális hullámokat érintő nemegyértelműségből adódó kétfél inverz megoldást különbözteti meg. (Ld. szöveg és eredeti cikk[34].)

E(MeV)	δ_0^{orig}	$\delta_0^{inv}(G1)$	$\delta_0^{inv}(G2)$
14.9	1.824	1.823	1.827
16.4	1.846	1.845	1.844
20.0	1.742	1.739	1.741
23.7	1.733	1.727	1.729
	δ_1^{orig}	$\delta_1^{inv}(G1)$	$\delta_1^{inv}(G2)$
14.9	1.180	1.164	1.158
16.4	1.423	1.404	1.405
20.0	1.360	1.345	1.343
23.7	1.287	1.286	1.274

Definiálva a

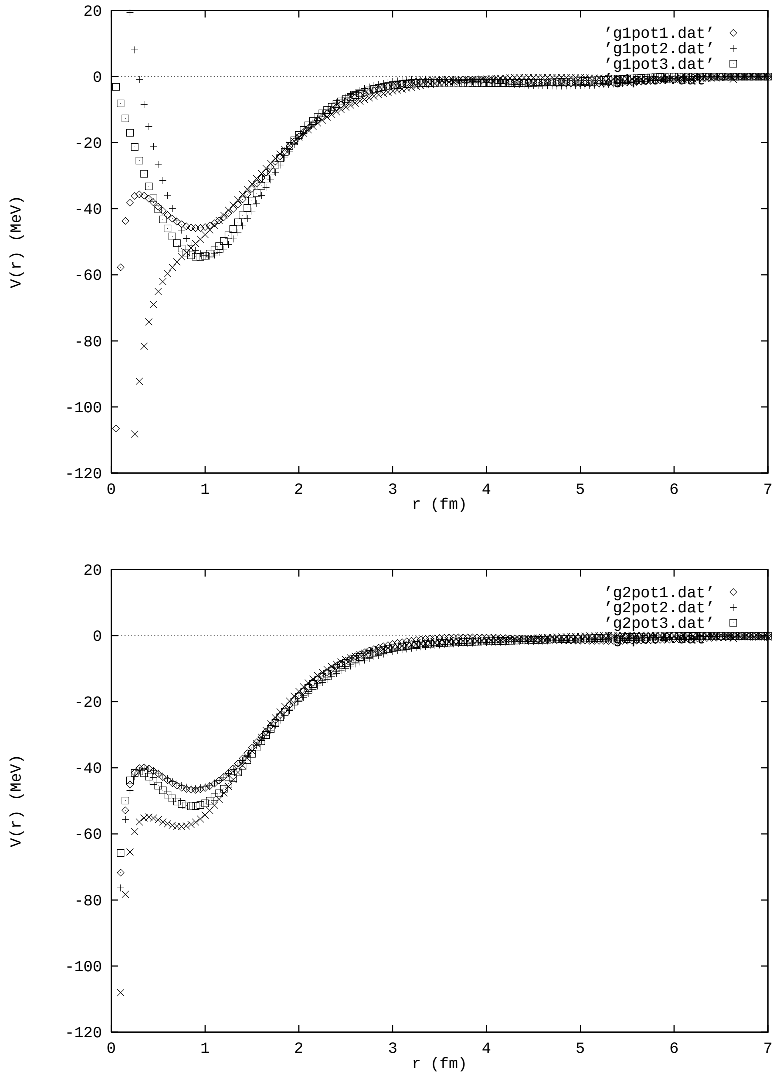
$$\tilde{\delta}_l = \frac{1}{(2l+1)}\{(l+1)\delta_l^{(+)} + l\delta_l^{(-)}\} = \delta_l^{(0)} + l(l+1)C_l^{(2)} + \ldots, \tag{204a}$$

és

$$\hat{\delta}_l = \frac{1}{(2l+1)}\{l\delta_l^{(+)} + (l+1)\delta_l^{(-)}\} = \delta_l^{(0)} - C_l^{(1)} + (l^2+l+1)C_l^{(2)} + \ldots, \tag{204b}$$

kvázi-független fázistolásokat észrevehetjük, hogy ezek az új fázisok első rendben leképezhetők inverzió révén a centrális és spin-pálya potenciálokra a következő megfeleltetéssel:

$$\tilde{\delta}_l \sim \delta_l^{(0)} \leftrightarrow \tilde{V} \sim V_0, \tag{205a}$$



17. ábra. Négy, küszöb alatti energián számolt, n-α szórási potenciál, amely a $G1$ (felső) és $G2$ (alsó) fázistolás sorozatokhoz tartozik. Az input/output fázistolás adatok a 17. táblázatban találhatók.

és
$$\hat{\delta}_l \sim \delta_l^{(0)} - C_l^{(1)} \leftrightarrow \hat{V} \sim V_0 - \frac{1}{2} V_{s.o.}. \tag{205b}$$
Be lehet látni, hogy a fenti leképezés valójában másodrendig egzakt.[37]

Fázistolás analízisből elvben meg lehet kapni a n-α szórásra vonatkozó $\delta_l^{(\pm)}$ adatokat. Mivel ilyen direkt analízist még nem végeztek, az engem érdeklő $\tilde{\delta}$ és $\hat{\delta}$ adatokat egy globális optikai modell analízis[38] eredményéből keletkezett potenciálból származtatom le, hat különböző energia esetén. Ezeket az adatokat a 18. táblázatban tüntettem fel, ahol (zárójelben) megadtam az inverz potenciálból visszaszámolt (hullámos és kalapos) fázistolás értékeket is. (Az $s-$hullámra megadott kétféle szám a $\hat{V}/\tilde{V}$ potenciálokból származó értékek; mint látjuk, ezek közel állnak egymáshoz, s így igazolják a használt Born közelítés jogosságát.)

A mNS inverz módszer alkalmazásával nyert $\tilde{V}$ és $\hat{V}$ potenciál a 18. ábra felső két részén látható. Ezek felelnek meg a globális centrális potenciálnak, és rögtön megállapíthatjuk róluk, hogy nem mutatnak WS alakot. Ehelyett, az 5-18 MeV közötti magasabb energiákra viszonylag energiafüggetlen, rövidhatótávolságú potenciálokat kaptunk, taszító törzzsel. Ezzel ellentétben áll az alacsony energiás (1-2 MeV) inverzió eredménye, amely viszonylag hosszabb hatótávolságú potenciált ad, vonzó origóbeli résszel. Mindezek magyarázhatók az optikai potenciálok jól ismert nem egyértelműségével, valamint a {nukleon+alfa-részecske} rendszerben 1 MeV környékén megfigyelt rezonanciával. (A nem egyértelműség a hamis kötött állapotokkal kapcsolatos.) Megjegyzendő, hogy ha az itt tapaszalt origóbeli viselkedés a NS módszer már említett hiányosságából ered, a hatótávolságban látott különbségnek akkor is meg kell őrződnie más (pl. CT) inverz módszer alkalmazása esetén.

A 18. ábra $\tilde{V}$ és $\hat{V}$ potenciáljaiból a (205) képletek alapján leszármaztatott $V_{s.o.}$ spin-pálya kölcsönhatást láthatjuk a 18. ábra alsó részében. Itt megszűnik az origóbeli kétféle viselkedés, és egyértelműen taszító spin-pálya potenciált regisztrálhatunk inverz számolásunk eredményeképpen kis távolságokra. A kis energiákra mutatott különbözőség pedig a spin-pálya potenciál viszonylag erősebb voltában mutatkozik meg.

Összességében azonban elmondható, hogy a spin-pálya potenciál jóval gyengébb a centrális potenciálnál.

18. táblázat. Az optikai modell számolásból kapott $\tilde{\delta}_l$ és $\hat{\delta}_l$ input fázistolások (ld. szöveg). A 18. ábrán látható megfelelő $\tilde{V}$ és $\hat{V}$ inverz potenciálokból visszaszámolt fázistolás értékeket zárójelben tüntettem fel.

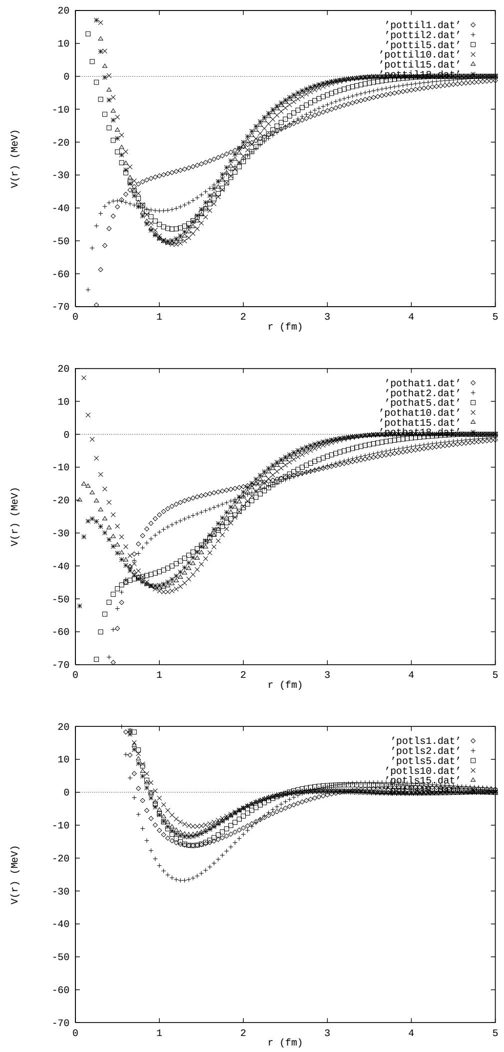
E_n(MeV)	$\hat{\delta}_0 = \tilde{\delta}_0$	$\tilde{\delta}_1$	$\hat{\delta}_1$	$\tilde{\delta}_2$	$\hat{\delta}_2$
1	2.707	0.702	0.386	0.0001	0.001
	(2.696/2.663)	(0.69)	(0.395)	(0.002)	(0.002)
2	2.534	1.475	0.876	0.0011	0.001
	(2.497/2.497)	(1.451)	(0.871)	(0.0043)	(0.007)
5	2.20	1.699	1.28	0.0089	0.0082
	(2.230/2.234)	(1.638)	(1.265)	(0.0067)	(0.018)
10	1.87	1.62	1.34	0.038	0.034
	(1.870/1.874)	(1.6)	(1.33)	(0.034)	(0.032)
15	1.655	1.47	1.22	0.077	0.068
	(1.650/1.653)	(1.45)	(1.2)	(0.082)	(0.065)
18	1.55	1.38	1.14	0.102	0.087
	(1.550/1.549)	(1.36)	(1.13)	(0.103)	(0.086)

4.2.4 $\pi - \pi$ potenciálok [T3/4]

Jelenlegi rács kvantum kromodinamikai (QCD) számolásokból az a következtetés vonható le,[39] hogy az $I = 0$ izo-skalár $\pi - \pi$ rendszer relatív s-állapotban olyan effektív lokális kölcsönhatási potenciállal írható le, amely *néhány* GeV erősségű és hatótávolsága kisebb *egy* ferminél. Ez a potenciál mind a kötött, mind a szórási állapotát jellemzi a $\pi - \pi$ rendszernek.

Fix-l esetén történt már kvantum inverz számolás a $\pi - \pi$ rendszerre nézve, s ez a számolás azt mutatta,[40] hogy az s-hullámhoz tartozó izoskalár $\pi - \pi$ potenciál valóban vonzó jellegű, azonban erőssége néhány *száz* GeV, és a hatótávolsága kisebb *fél* ferminél.

Mivel mindkét fenti számolás közelítéseket és elméleti egyszerűsítéseket tartalmaz,



18. ábra. n-α szóráshoz tartozó $\tilde{V}$ (felső rész), $\hat{V}$ (középső rész) és spin-pálya (alsó rész) inverz potenciálok, amelyeket a 18. táblázatban megadott input fázistolás adatokból kaptam.

érdemes ezen 'elemi', négy-kvark rendszer kölcsönhatásának jellemzőiről (térbeli kiterjedés és erősség) további információt szerezni független forrásból.

Izo-skalár ($I = 0$) $\pi - \pi$ szórási adatokat Protopopescu és társai[41] származtattak le kísérleti $\pi N \to \pi\pi N$ hatáskeresztmetszet adatokból, az ún. Chew-Low formula

$$\sigma_{\pi\pi} = \lim_{t \to m_\pi^2} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{\pi\pi N}}{\partial t \partial \sqrt{s}} \frac{\pi}{\tilde{\alpha} f_\pi^2} \frac{p^2 (t - m_\pi^2)^2}{t\sqrt{s}k} \right] \tag{206}$$

alkalmazásával. Itt a nagyenergiás fizikában szokásos jelöléseket használtam, ahol $c = \hbar = 1$ az egységrendszer, és pl. az energiát az ún. invariáns tömeg ($\sqrt{s} = M_{\pi\pi}$) jelöli, s ennek ismeretében a hullámszám a $k = \sqrt{s/4 - m_\pi^2}$ képletből számolható. (t a rugalmas szórás esetén az impulzustranszfer négyzete, $f_\pi \approx 93$ MeV a pion bomlási állandója, p a bejövő pion négyesimpulzusa, $\tilde{\alpha}$ pedig 1 vagy 2, a szóródó pion és a nukleon töltésállapotától függően.[41])

A számunkra fontos fázistolás adatokat a

$$\sqrt{\sigma_{\pi\pi}} \propto \sum_{\ell=0,2,..} (2\ell + 1) P_\ell \left[\eta_\ell^0 e^{2i\delta_\ell^0} - 1 \right] \tag{207}$$

parciális hullámú sorfejtésből kapták Protopopescuék, ahol látjuk, hogy a rendszer szimmetriája miatt most is csak a páros parciális hullámok adnak járulékot (vö. 4.2.1 fejezet). Mivel viszonylag alacsony energiájú (kaon küszöb környéki) adatokkal foglalkozunk, amelyre az $l = 4$-es parciális hullám már zérus járulékot ad, kevés kísérleti adat áll rendelkezésünkre. Ezért, hogy az adatok számát növeljük, ugyanúgy járunk el, mint a szén-szén ütközés esetén (ld. 4.2.1 fejezet), azaz interpolálunk két páros l-hez tartozó adat között. Az így kiegészített fázistolás ($\delta_l^{I=0}$) és rugalmasság ($\eta_l^{I=0}$) adatokat a 19. táblázat tartalmazza.

A nagyfokú adathiány miatt gondosan kellett eljárni az inverz számolás kivitelezésénél. A számolásban háromféle technikát alkalmaztam, és az eredményeket csak akkor fogadtam el, ha legalább két számolás által szolgáltatott inverz potenciál megegyezett. A három technika a következő volt: (a) az eredeti NS módszer, amely lehetőséget kínált egy folytonos paraméter (ld. α/r szingularitás) megválasztására; (b) a mNS módszer, amelyben lehetőség volt a külső sugár $r_1 > r_0$ (és $r_2 = r_1 + 0.05$ fm) megválasztására; (c) az interpolált fázistolásokkal kiegészített adatok invertálása (NS, ill. mNS módszerrel). Természetesen a stabilitási tesztet (α, ill. r_1 függetlenségét) is mindig szem előtt tartottam, ill. vizsgáltam.

A küszöb alatti öt energia értékre kapott $\pi\pi$ potenciálokat a 19. ábrán láthatjuk. A potenciálok valósak, és Coulomb-szerű vonzást mutatnak a pionok közötti kis távolságokra. A potenciálok erőssége (nagyságrendje) és hatótávolsága teljesen hasonló az $l = 0$ inverz

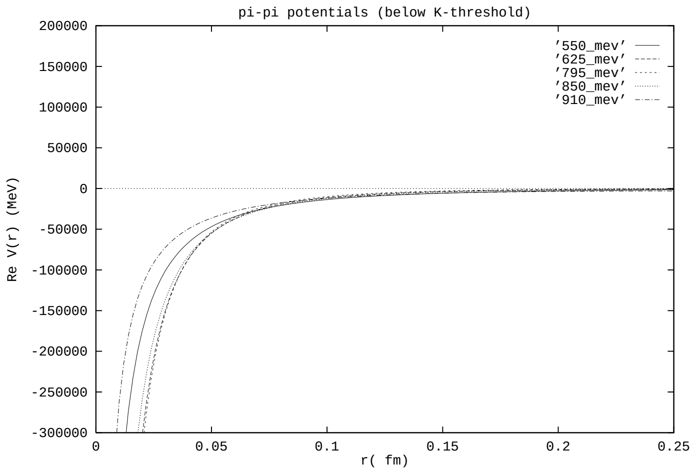
19. táblázat. Izo-skalár $\pi\pi$ szórásra vonatkozó kísérleti[40] fázistolások [δ_ℓ^0 (fok)] és rugalmassági tényezők (η_ℓ^0) néhány invariáns tömeg [$M_{\pi\pi}$ (GeV)] esetén az $l = 0, 2, 4, 6$ parciális hullámokban. Néhány nemfizikai (interpolált) értéket is feltüntettem az $l = 1, 3, 5$ hullámok esetén.

$M_{\pi\pi}$	δ_0^0	δ_1^0	δ_2^0	δ_3^0	δ_4^0	η_0^0	η_1^0	η_2^0	η_3^0	η_4^0
0.55	43	0	0			1	1	1		
0.625	56	0	0			1	1	1		
0.795	81	0	0			1	1	1		
0.85	88		1.6		0	1		1		1
0.91	99		4.4		0	1		1		1
0.965	134		8.9		0	1		0.99		1
1.0	194		12		0	0.39		0.94		1
1.075	215		27		0	0.48		0.78		1
1.150	208	60	44	20	0	0.57	0.35	0.94	1	1

számolás esetén kapotthoz[40] (jóllehet ezek más elméletből származnak, mint tudjuk). Ezen fix-l inverz számolásokban viszont rövid távolságon (soft-core) taszítást kaptak, ami sem nálunk, sem a rács QCD számolások esetén[39] nem jelentkezik.

$K\bar{K}$ küszöb feletti energiákra vonatkozó fázistolások $\sqrt{s} = 0.965$ GeV-nél kezdődnek a 19. táblázatban. Igen érdekes megfigyelni, hogy ezen határ energiára, amely alig valamivel van a $K\bar{K}$ küszöb felett, a fluxusnak a rugalmas csatornából való kiáramlása az $l = 2$ parciális hullámban történik, és nem a centrális ütközést jelentő s-hullámban. A 'rugalmatlanság' mértéke is igen csekély, mindössze egy százalákos.

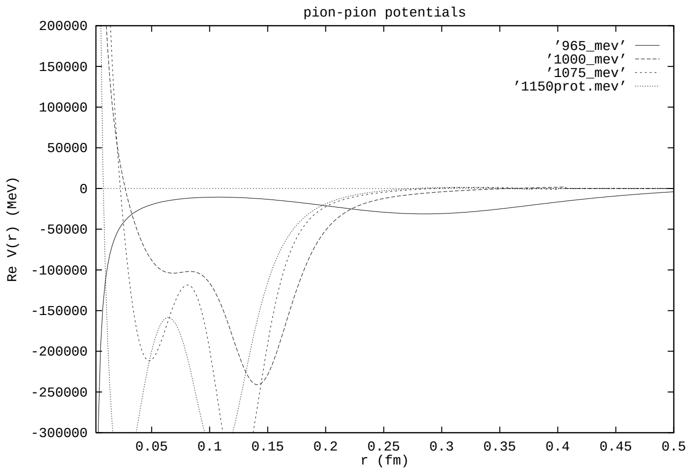
Ennek megfelelően a 20. ábrán feltüntetett $K\bar{K}$ küszöb feletti izo-skalár $\pi - \pi$ potenciálok közül a $\sqrt{s} = 0.965$ GeV-hez tartozó még őrzi a rugalmas csatornabeli potenciálok főbb jellegzetességeit (igen rövid hatótávolság, Coulomb-szerű origóbeli viselkedés), de a magasabb energiához tartozó potenciálok gyökeresen eltérnek ettől. Ezek kis távolságokra általános taszító jelleget mutatnak, míg közepes távolságokon oszcillálnak. A taszító jelleget az $l = 0$ mellett elvégzett fix-l inverz számolásban is megtalálták[40] (ott küszöb alatt is megmaradt, nálunk eltünt). Ugyancsak ezt a következtetést vonták le az adatok fenomenológikus újra-analizálása[42] után is.

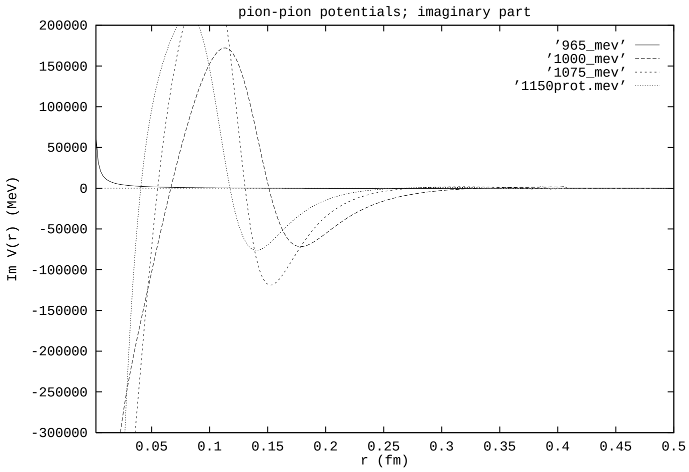


19. ábra. Izo-skalár $\pi\pi$ potenciálok a $K\bar{K}$ küszöb alatti néhány energia értékre.

Jóllehet az oszcilláció eredhet az adathiányból is, mindenesetre az látszik, hogy a küszöb feletti energiákra a pion-pion rendszer sokkal lazább, tágabb, mint a küszöb alattiakra. Természetesen, a bemutatott potenciálok reprodukálják a táblázatban közölt input adatokat. Érdekes, hogy a küszöb alatti, kevesebb adattal végzett inverz számolás stabilabbnak mutatkozott, mint a küszöb feletti, lényegesen több információval végzett számolás. Mindez az r_1 külső sugár technikai paraméter szűkebb tartományban történő választási lehetőségében nyilvánult meg.

Összefoglalásképpen elmondható, hogy a mNS fix-energiás kvantum inverz szórás módszer alkalmazható izo-skalár $\pi\pi$ fázistolás adatokra abból a célból, hogy pion-pion kölcsönhatások természetét tanulmányozzuk a koordináta térben. Az izo-skalár $\pi\pi$ potenciálok erős energia függést mutatnak. $K\bar{K}$ keletkezési küszöbenergia alatt hatótávolságuk igen rövid, kisebb 0.2 fm-nél. Ugyanakkor ebben a kis koordináta tartományban nagyon erős, Coulomb jellegű vonzást gyakorolnak egymásra a pionok, és ez a vonzás néhány száz GeV-nyi potenciálerősségben nyilvánul meg. $K\bar{K}$ küszöb felett a potenciálok komplexszé és kiterjedtebbé válnak, kis távolságon taszítást, közepes távolságon ($0.1 < r < 0.3$ fm között) oszcillációt produkálva.





20. ábra. Izo-skalár $\pi\pi$ potenciálok néhány, $K\bar{K}$ keletkezési küszöb feletti energián.

4.2.5 Elektron-atom potenciálok [T3/5,6]

A módosított NS inverz módszer természetesen alkalmazható atomfizikai ütközések analízisére is. Ebben az alfejezetben elektron-atom szórási potenciálok fázistolás adatokból történő meghatározásával foglalkozunk, valamint, mivel az atomokat a szóródó elektron (töltése folytán) polarizálja, kifejlesztünk egy módszert a hosszúhatótávolságú ($\alpha/2r^4$)

polarizációs potenciálból származó polarizációs fázistolások kezelésére is.

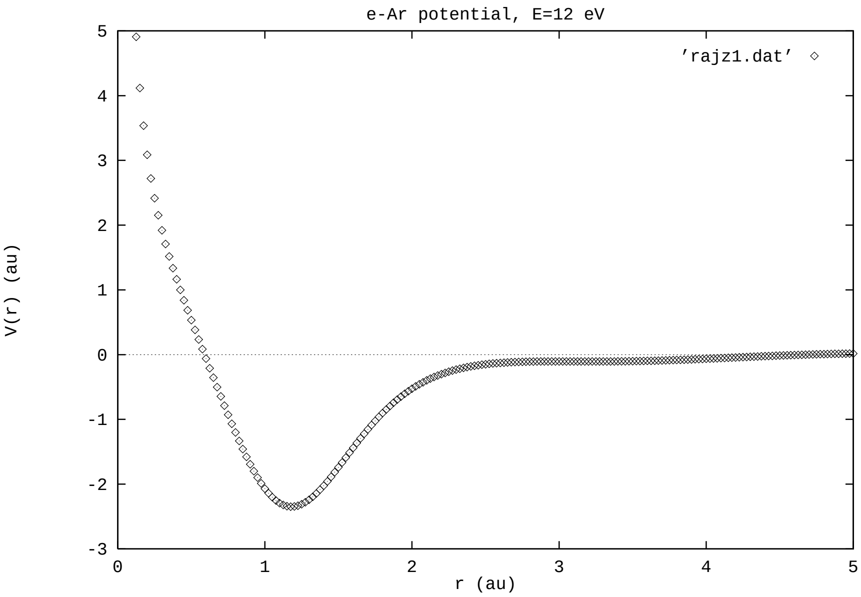
4.2.5.1 e-argon atom potenciál

A 20. táblázat második oszlopában soroltam fel Williams és társai[43] által $E = 12$ eV szórási energián mért e-Ar fázistolás adatokat (δ_l^{exp}). Ezen adatok mNS módszerrel történő invertálásának eredménye a 21. ábrán látható. Az ebből visszaszámolt fázistolások (δ_l^{calc}), valamint ezek eltérése ($\Delta\delta_l$) az eredetiektől a 21. táblázat 3. és 4. oszlopában találhatók.

20. táblázat. Ar atomon szóródó elektronok kísérleti input fázistolásai δ_l^{exp}, amelyeket E =12 eV energián mértek.[43] δ_l^{calc} fázistolások, amelyeket a 20. ábrán látható potenciálból számoltam vissza. Input/output fázistolások közötti különbség, $\Delta\delta_l$.

l	δ_l^{exp}	δ_l^{calc}	$\Delta\ \delta_l$
0	-1.2180	-1.2559	0.0379
1	-0.6260	-0.6677	0.0417
2	1.1910	1.1399	0.0511
3	0.1180	0.1128	0.0052
4	0.0440	-0.0099	0.0539
5	0.0235	-0.0094	0.0339
6	0.0140	-0.0025	0.0165
7	0.0090	-0.0004	0.0094
8	0.0061	-0.0001	0.0062
9	0.0044	0.0000	0.0044
10	0.0032	0.0000	0.0032
11	0.0024	0.0000	0.0024
12	0.0018	0.0000	0.0018

A 21. ábrából megállapíthatjuk, hogy az elektronok argon-atomokon történő szórását olyan modell-független potenciál írja le 12 eV szórási energia esetén, ami kis távolságokon



21. ábra. A 20. táblázatban található kísérleti $e - Ar$ fázistolás adatokból nyert mNS inverz potenciál $E = 12$ eV szórási energián.

taszító törzs jelenlétét mutatja [T3/5]. Ez meglepőnek tűnhet,[44] hiszen a szóródó elektron és a pozitív magtöltés között vonzó Coulomb kölcsönhatásnak kellene mutatkozni.

A pozitív taszító törzs megjelenését a kicserélődési effektussal magyarázhatjuk. Ez ugyanis nemlokális potenciálra vezet, és korábban már láttuk az 2. fejezetben, hogy nemlokális potenciál lokalizációja taszítást eredményezhet kis távolságon (ld. 4. ábra). Azonban, tekintettel a NS módszer origóbeli (hamis) szingularitására, valamint arra, hogy az inverz módszer sokszor instabil numerikusan (azaz, érzékeny a technikai paraméterek választására), meg kell vizsgálni azt is, hogy *i)* képes-e a mNS módszer ismert (árnyékolt) Coulomb vonzó potenciálból származó fázistolásokat felhasználva, helyesen visszaadni a potenciál origóbeli viselkedését; *ii)* a taszító törzs jelenléte az e-Ar potenciálban nem eredhet-e az $l > 12$ fázistolások elhanyagolásából (vö. a 20. táblázatbeli δ_{12}^{exp} viszonylag nagy értékével). Ez utóbbi kérdés tisztázásához ki kell fejleszteni a polarizációsan korrigált fázistolások elméletét, mert ezen elmélet felhasználásával kaphatunk *kevés számú*, polarizációsan korrigált fázistolást, amit már nagyobb biztonsággal invertálhatunk. Az előző kérdés tisztázásához pedig meg kell vizsgálni egy ismert, árnyékolt Coulomb potenciálból származó fázistolások inverziójának az eredményét az origóbeli viselkedésre vonatkozóan.

E két vizsgálatot a következő alfejezetben végezzük el, szintetikus (ismert modell potenciálból származó) adatok felhasználásával.

4.2.5.2 Szintetikus e-atom fázistolások invertálása.

Tekintsük a

$$V^{SR}(r) = -(1+1/r)e^{-2r}/2 - e^{-r}/4 - i(e^{-4r}/8 + e^{-6r}) \tag{208a}$$

rövidhatótávolságú potenciált, amelyet elektron−H-atom ütközés vizsgálatára vezetett be Staszewska.[45] A potenciál első két tagja a sztatikus e-H ütközést írja le (ld. 3.2.1. fejezet), a harmadik egy rövidhatótávolságú korrekciót ad, a két utolsó tag pedig gerjesztési folyamatok bekövetkeztét teszi lehetővé.

A fenti potenciál $E = 13.6$ eV energián szolgáltatott fázistolásai a 21. táblázat második és harmadik oszlopában találhatók (Re δ_l^{in} és $|S_l|^{in}$), az ebből a mNS inverz módszerrel kapott potenciált a 22. ábrán láthatjuk. E potenciál vonalvastagságon belül megegyezik a kiindulási potenciállal, amit a 21. táblázatban feltüntetett, visszaszámolt fázistolások (Re δ_l^{out} , $|S_l|^{out}$) és ezek eredetitől való eltérésének (ΔRe δ_l, $\Delta|S_l|$) csekély volta is igazol.

Amint látjuk, a 22. ábra bizonyítja, hogy a mNS inverz eljárás képes jól reprodukálni a potencálban esetlegesen meglévő r^{-1} vonzó szingularitást. (A fenti számolásban használt technikai paraméterek a következők voltak: $N = 3$, $\rho_i = 10, 11, 12$, $l_{max} = 12$.)

Következő lépésként megvizsgálhatjuk, mennyire érzékeny a mNS eljárás az r^{-4}-es hosszúhatótávolságú potenciálból adódó polarizációs fázistolások elhanyagolására, amit az előző e-Ar inverz potenciál meghatározásánál 'elkövettünk' (ld. a 20. táblázatban a $l_{max} = 12$-es fázistolás viszonylag nagy, 0.0018 értékét). Azaz megvizsgáljuk, hogy ezek elhagyásával, vagy figyelembevételével az origóbeli viselkedésre hasonló, vagy eltérő potenciál-menetet kapunk-e, mint egy ismert, hosszúhatótávolságú aszimptotikával rendelkező modell potenciál.

Tekintsük ezért a

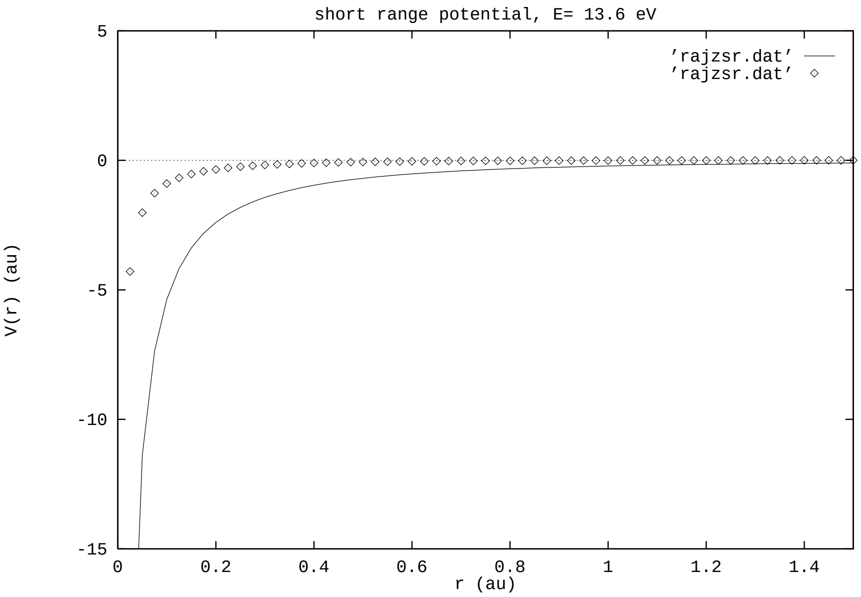
$$V^{LR}(r) = -e^{-2r}/2r - \frac{1/2}{(r^2+0.474)^2} - i(e^{-3r/2} - e^{-2r})/2r \tag{208b}$$

21. táblázat. A (208a) alatti potenciálhoz $E = 13.6$ eV szórási energián tartozó fázistolások valós része, Re δ_l, és az abszorpciós együtthatók $|S_l|$ (input), és ugyanezen adatok, amelyeket a 22. ábrán bemutatott inverz potenciál ad (output). Az input és output mennyiségek közti eltérést az utolsó két oszlop mutatja.

l	Re δ_l^{in}	$\|S_l\|^{in}$	Re δ_l^{out}	$\|S_l\|^{out}$	ΔRe δ_l	$\Delta\|S_l\|$
0	0.5904	0.9134	0.5876	0.9148	0.0028	-0.0014
1	0.1602	0.9967	0.1589	0.9967	0.0013	0.0000
2	0.0553	0.9999	0.0547	0.9987	0.0006	0.0001
3	0.0213	1.0000	0.0206	0.9999	0.0007	0.0001
4	0.0085	1.0000	0.0068	0.9999	0.0017	0.0001
5	0.0035	1.0000	0.0018	1.0000	0.0017	0.0000
6	0.0014	1.0000	0.0004	1.0000	0.0010	0.0000
7	0.0006	1.0000	0.0001	1.0000	0.0005	0.0000

hosszúhatótávolságú kölcsönhatást, amely rendelkezik egy $\alpha = f^2 = 1$ au erősségű (viszonylag gyenge) polarizációs résszel. Megjegyzendő, hogy ez a potenciál (egy kissé módosított alakban) szintén alkalmazást nyert Staszewska munkájában.[45] E potenciál ugyanis az e-atom szórási potenciálok összes jellegzetességével rendelkezik; vonzó, árnyékolt Coulomb része van $0 < r < r_0 \sim 0.5$ au tartományban, rendelkezik hosszúhatótávolságú polarizációs résszel $r > \sqrt{0.5}$ au távolságokra, amely a sztatikus elektromos dipol kölcsönhatást írja le az atom és az elektron között, valamint egy rövidhatótávolságú abszorpciós része is van, amely a rugalmatlan folyamatokat modellezi. [A fenti modell potenciál második tagja, az elektromos dipol kölcsönhatásból származó tag, az ún. Buckingham potenciál[6] és az ebben szereplő $d^2 = 0.474$ (au^2) jellemzi a polarizációs effektus

[6]Megjegyzendő, hogy ezen sztatikus dipol polarizációs potenciál jelenlétével magyarázható az ún. Ramsauer-Townsend jelenség, azaz a nemesgázok kis energiájú elektronokkal történő besugárzásra való átlátszósága.



22. ábra. A (208a) alatti $V^{(SR)}(r)$ rövidhatótávolságú (árnyékolt) Coulomb potenciál által generált fázistolásokból számolt inverz potenciál valós (folyamatos vonal) és imaginárius (pontozott vonal) része.

hatósugarát, ami az atomi hullámfüggvényből meghatározható. A $d = \sqrt{0.474}$ (au) érték éppen az Ar atomra számított érték.]

A (208b) alatti V^{LR} potenciálból kétféle módszerrel fogunk számolni fázistolásokat $E = 4.5$ au $= 122.4$ eV ($k = 3$ au) szórási energia (hullámszám) mellett. Egyik esetben a külső illesztő sugarat $r > r_0$ au távolságra vesszük fel, ahol $V^{LR}(r > r_0) < 5.10^{-5}$ au így alkalmazhatjuk a (161) alatti aszimptotikus megoldást az $\eta_l = \delta_l^{tot}$ teljes fázistolások meghatározására az $l = 0 - 29$ ($\sim kr_0$) parciális hullámokban. Másik esetben az illesztő sugarat a polarizácós tartományhoz közelebb, $r_0 = 2$ au értékűre választjuk, ahol a polarizációs potenciál még érezhető járulékot ad, de a potenciál többi része már relative kicsi. Ekkor a polarizációval korrigált fázistolás eljárás használatával [azaz a (181) alatti aszimptotikus megoldás alkalmazásával] elérhető, hogy sokkal kevesebb fázistolást (példánk esetében csak az $l = 0 - 8 \sim kr_0$ közöttieket) kell majd invertálni, mint korábban. Hátrány abban jelentkezik, hogy némely esetben még valós teljes potenciál esetén is komplex fázisokkal kell dolgoznunk, mert a polarizációs fázisokat a

$$\sin 2\eta_l^p(k,f) = (-1)^{l+1}[\Delta^l(kf) - 1], \tag{209}$$

képletből számolhatjuk, amely csak akkor ad valós $\eta_l^p(k,f)$ polariációs fázistolást, ha $0 < \Delta^l < 2$. (Itt $\Delta^l(kf)$, az ún. Hill determináns, számolása rekurziós relációval történik, ld. [T3/5-6] Appendix.)

Explicit számolással meg lehetett határozni, hogy az η_l^p polarizációs fázis akkor valós, ha az $l = 0, 1, 2, 3, 4...$ parciális hullámokban rendre teljesül a következő egyenlőtlenség: $kf > 0.69$, 1.67, 3.25, 5.76, $9.10, ...$ Alacsony szórási energián (vagy magas parciális hullám esetén) a (209) alatti egyenlet az

$$\eta_l^p \approx \pi(kf)^2/(2l+3)(2l+1)(2l-1) \tag{210}$$

egyszerű képletbe megy át, ami a jól ismert effektív hatótávolság elmélet szolgáltatta eredmény.[46]

Érdekes tény, és jó számolási ellenőrzési lehetőséget kínál az, hogy amennyiben a teljes potenciál valós, de az energia és impulzusmomentum viszonyok olyanok, hogy a polarizációs fázistolás komplex, akkor a polarizációsan korrigált fázistolás és a polarizációs fázistolás imaginárius része között fenn kell álljon az

$$\mathrm{Im}\,\delta_l = -\mathrm{Im}\,\eta_l^p \tag{211}$$

reláció.

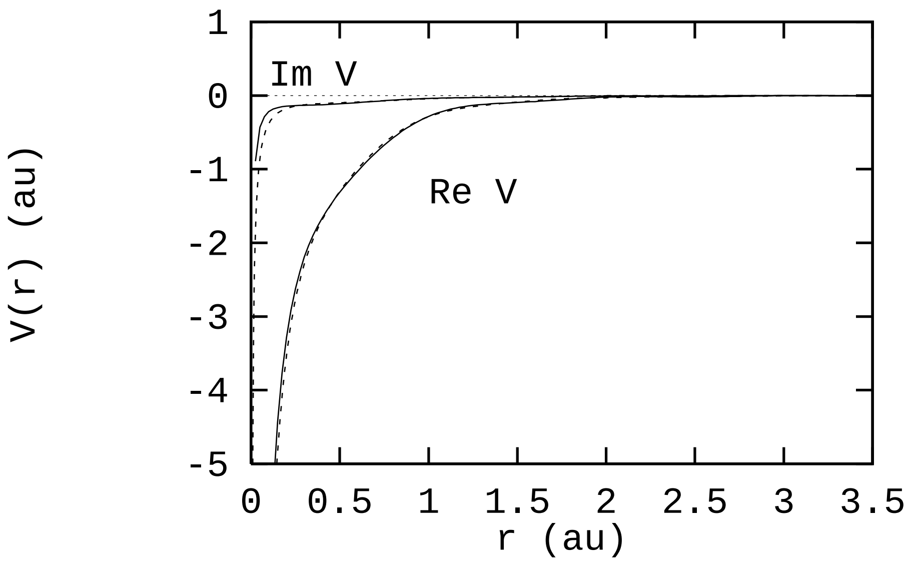
Mivel az η_l^p polarizációs fázistolások egyszerűen számolhatók (210)-ből, a polarizációsan korrigált δ_l fázistolások pedig a a bonyolult polarizációs (Matthieu) függvényeket tartalmazó (181) alatti aszimptotikus alak segítségével határozhatók meg, a (211) alatti feltétel teljesülése jó ellenőrzési lehetőséget kínál a bonyolult polarizációs függvények számolásának helyességét, programozását illetően.[T3/5-6]

Ezek után tekintsük a 22. táblázatot, ahol felsoroltam a δ_l^{tot} teljes és a δ_l^{in} polarizációsan korrigált (input) fázistolásokat, amiket az inverz számoláshoz felhasználtam. Feltüntettem a δ_l^{in} fázisok invertálásából nyert potenciálból visszaszámolt δ_l^{out} (output) fázistolásokat, és ezeknek az eredetitől való eltéréseit is. Láthatjuk, hogy míg δ_l^{tot} használat esetén 30 fázistolást kell invertálnunk, addig a polarizációsan korrigált fázisok ismeretében csak kilencet. (Megjegyzendő, hogy $l = 0, 1$-re η_l^p komplex, mert $kf = 3$.)

22. táblázat. (208b) alatti hosszúhatótávolságú polarizációs potenciál által generált fázisolások E=4.5 au energián. Teljes fázistolások Re δ_l^{tot} és Im δ_l^{tot}. Polarizációsan-korrigált fázistolások, Re δ_l^{in} és Im δ_l^{in}. Mindkét sorozat inverz számolás inputjaként szolgál, és az eredmények a 23. ábrán láthatók. Polarizációsan-korrigált output fázistolások (δ_l^{out}), amik a 23. ábra szaggatott vonallal jelzett potenciáljából lettek visszaszámolva. Δ_l jelenti az input/output fázistolások közti különbséget.

l	Re δ_l^{tot}	Im δ_l^{tot}	Re δ_l^{in}	Im δ_l^{in}	Re δ_l^{out}	Im δ_l^{out}	Re Δ_l	Im Δ_l
0	0.5493	0.0410	1.3522	-1.6500	1.3520	-1.6500	0.0002	0.0000
1	0.2916	0.0348	-0.4494	0.4915	-0.4494	0.4913	0.0000	0.0002
2	0.1364	0.0219	-0.2647	0.0227	-0.2647	0.0226	0.0000	0.0001
3	0.0673	0.0136	0.0072	0.0119	0.0072	0.0118	0.0000	0.0001
4	0.0359	0.0083	0.0539	0.0059	0.0538	0.0056	0.0001	0.0003
5	0.0207	0.0051	0.0285	0.0020	0.0284	0.0018	0.0001	0.0002
6	0.0127	0.0031	0.0094	0.0005	0.0094	0.0004	0.0000	0.0001
7	0.0083	0.0019	0.0027	0.0001	0.0027	0.0001	0.0000	0.0000
8	0.0057	0.0011	0.0008	0.0000	0.0008	0.0000	0.0000	0.0000
9	0.0041	0.0007						
19	0.0005	0.0000						
29	0.0001	0.0000						

A 23. ábra folytonos görbéi mutatják annak az inverz számolásnak az eredményét, amelyet a 30 db teljes fázistolással kaptam. A szaggatott vonallal jelzett, inverz potenciálokat pedig a 22. táblázatban felsorolt 9 db polarizációs fázistolás felhasználásával kaptam. Mint látható, a kétféle számolás gyakorlatilag azonos eredményt szolgáltatott, amint annak lennie is kellett, holott számértékre teljesen más fázistolásokon alapultak. (A technikai paraméterek is mások: $l_{max} = 29$, $r_0 = 10$ au, $\rho_i = 35, 36, 37$ a teljes fázistolás használata esetén, és $l_{max} = 8$, $r_0 = 2$ au, $\rho_i = 7, 7.5, 8.$) Az új módszerrel kapott potenciálból nyert fázistolások szintén csaknem azonosak az inverzióhoz felhasználtakkal, amint az a 22. táblázat utolsó két oszlopában látható.



23. ábra. Hosszúhatótávolságú polarizációs potenciál E=4.5 au energán leszármaztatott adatokból. Folytonos vonal jelöli a 22. táblázatban található 2×30 fázistolásból számolt inverz potenciált, szaggatott a 2×9 δ_l^{in} polarizációsan korrigáltból nyert potenciált.

Ez az eredmény bátorítást adhat a polarizációsan korrigált fázistolások más tetületen (pl. fázistolás analízis) való felhasználásához. Mindenesetre érdemesnek látszik korábbi e-Ar számolásunkat megismételni polarizációs fázistolások használatával is. Így ugyanis meggyőződhetünk arról, hogy az ott tapasztalt taszító törzs nem valamilyen, az inverz számolásban megbúvó mesterséges (numerikus) termék (vö. mNS módszer origóbeli szingularitása).

4.2.5.3 e-argon atom potenciál polarizációs fázisok figyelembevételével

Ezek után elvégezzük az e-Ar korábbi inverzióját polarizáltan korrigált fázistolásokkal is. A mNS módszert fogjuk alkalmazni az előző fejezetben kipróbált eljárással. Az argon atom polarizálhatósága $f^2 = \alpha = 11.07$ au. Ezt a paramétert használjuk arra, hogy kiszámítsuk az η_l^p polarizációs fázistolásokat, (209)-ből az $l \leq 3$, (210)-ből az $l \geq 4$ parciális hullámokra.

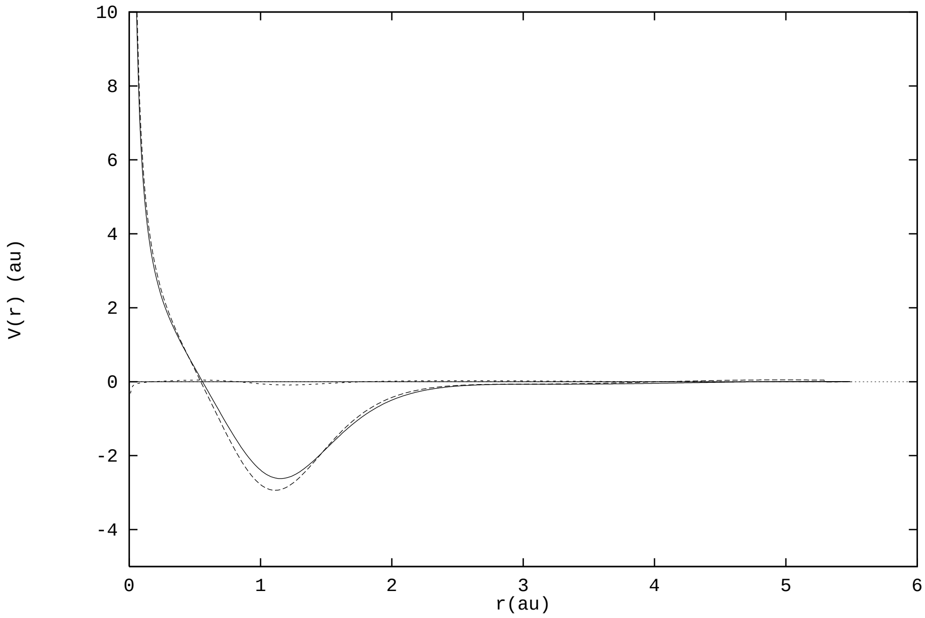
23. táblázat. Elektron Ar-atom szórási leszármaztatott kísérleti teljes fázistolások, δ_l^{exp}, E =12 eV energián.[44] A megfelelő polarizáció fázistolások η_l^p, és input polarizációsan korrigált fázistolások $\delta_l^{in} = \delta_l^{exp} - \eta_l^p$. A 24. ábrán bemutatott inverz potenciálból (szaggatott vonal) visszaszámolt δ_l^{out} fázistolások az utolsó két oszlopban találhatók.

l	δ_l^{exp}	$\mathrm{Re}\,\eta_l^p$	$\mathrm{Im}\,\eta_l^p$	$\mathrm{Re}\,\delta_l^{in}$	$\mathrm{Im}\,\delta_l^{in}$	$\mathrm{Re}\,\delta_l^{out}$	$\mathrm{Im}\,\delta_l^{out}$
0	-1.2180	-0.7854	1.7350	-0.4326	-1.7350	-0.4047	-1.7427
1	-0.6260	0.7854	-0.6757	-1.4114	0.6757	-1.3956	0.6618
2	1.1910	0.5578	0.0000	0.6332	0.0000	0.6288	0.0035
3	0.1180	0.1081	0.0000	-0.0099	0.0000	0.0722	-0.0005
4	0.0441	0.0453	0.0000	-0.0012	0.0000	0.0316	0.0028
5	0.0237	0.0248	0.0000	-0.0003	0.0000	0.0158	0.0009
10	0.0032	0.0032	0.0000				
20	0.0004	0.0004	0.0000				
30	0.0001	0.0001	0.0000				

A 23. táblázat második oszlopa tartalmazza a Williams és társai által mért[43] teljes δ_l^{exp} fázistolásokat, a következő két oszlopban tüntettem fel a számított η_l^p polarizációs fázisokat, amelyekből az első két parciális hullámra komplex érték adódott (mert $kf = 0.94 \times 3.3 = 3.1$). A következő két oszlopban az inverz számoláshoz inputként felhasznált polarizációsan korrigált $\delta_l^{in} = \delta_l^{exp} - \eta_l^p$ (komplex) fázisok vannak felsorolva, míg a 24. ábrán látható inverz potenciálból (szaggatott vonal) visszaszámolt fázistolásokat tartalmazza az utolsó két oszlop (δ_l^{out}).

A 24. ábra mutatja a kétféle módszerrel számolt és az E=12 eV szórási energiához tartozó e-Ar inverz potenciált. A folytonos vonal a 22. ábrán már bemutatott eredmény, a szaggatott vonal a polarizációsan korrigált fázistolásokkal végzett számolás eredménye. A kétféle potenciál elég jól egyezik, különösen a kis és nagy távolságokra. A számolás megbízhatóságát megerősíti az inverz potenciál zérusnak *számolt* imaginárius része, jóllehet komplex bemenő fázisokat használtam az inverz eljárásban. Ennek így is kell lennie, mivel a teljes fázistolások valósak, hiszen E=12 eV esetén az argon gerjesztési küszöb alatti energián vagyunk. (Az elhanyagolható mértékű Im V jelenléte a polarizációs függvények számolásában jelentkező numerikus instabilitásból ered.)

A 24. ábrán bemutatott e-Ar potenciálnak van egy vonzó része, amely $r \approx 1.2$ au távolságon körülbelül -2.8 au minimum értékkel rendelkezik. Kisebb távolságra a potenciál taszító jellegűvé válik, ami a Pauli-elv manifesztációjaként interpretálható. Ez a struktúra igen stabil a potenciálban, érzéketlen a technikai paraméterek változtatásával szemben, amik jelen esetben a következők voltak: $r_0 = 5.3$ au, $\rho_i = 5.5, 6.2, 6.9, 7.6$, $l_{max} = 5$ (szaggatott vonal), és $r_0 = 10$ au, $\rho_i = 25, 26, 27$, $l_{max} = 21$ (folytonos vonal).



24. ábra. e-Ar inverz potenciálok 12 eV szórási energián.

A korábbi és a mostani számolásból tehát megállapíthatjuk, hogy a taszító törzs jelenléte a szórást okozó potenciálban megerősítést nyert. Ez a struktúra tehát nem a polarizációs függvények nem kellőképpen való tárgyalásának mesterséges következménye, hanem valóban jelen van az e-Ar atom köcsönhatásban E=12 eV szórási energián, mint a kicserélődési kölcsönhatás meglepő megnyilvánulása. Megjegyzendő még, hogy eredményünket felfoghatjuk úgy is, mint direkt kísérleti (modell-független) megerősítése egy pszeudopotenciálos elméletnek,[47] amellyel nagyon hasonló potenciált kaptak $s-, p-, d-$hullámú elektron-atom szórásra vonatkozólag.

4.2.6 Csatolt csatornás mNS inverz módszer fejlesztése [T3/7-9]

A fix energiás inverz szóráselmélet alapvetően egy-csatornás potenciál szórásra lett kifejlesztve. Ez, mint az eddigiekben láttuk, lehetővé teszi például *modell-független* komplex effektív optikai potenciál meghatározását, amelyre direkt módszerek alkalmazásával gondolni sem lehetett. Ugyanakkor tudjuk azt, hogy a valódi potenciálok hermitikusak. Rugalmatlan szórási, vagy reakció küszöb feletti energiákra ezen potenciálok meghatározásához csatolt csatornás inverz módszerre lenne szükség. Fix energiás inverzió esetén azonban az elmélet sok-csatornás kiterjesztése nem triviális feladat. Ennek oka az, hogy az elmélet a jelenlegi megfogalmazásban csak impulzusmomentumtól független potenciálok leszármaztatására képes. Gerjesztéseket, vagy átrendeződéses reakciókat okozó potenciálok azonban általában függenek a különböző impulzusmomentum kvantumszámoktól, így például a csatorna-spintől, a relatív és teljes impulzusmomentum kvantumszám különböző kombinációitól, valamint a potenciál multipol kifejtéséből származó impulzusmomentum kvantumszámtól.

Ebben a fejezetben első lépésként ezért az egy-csatornás elmélet olyan több-csatornás változatának adom meg a formalizmusát [T3/7], amelyben a sok-csatornás potenciál monopol átmeneteket indukálhat töltött részecskék szóródása esetén. Később az elméletet kiterjesztem transzfer reakciók esetére [T3/8], valamint dipol és kvadrupol átmenetekre [T3/9] is. Ez utóbbi elméletek működését modell példákon tesztelem, mivel valós alkalmazás a kísérleti adatok hiányos volta miatt egyelőre várat magára.

4.2.6.1 Csatolt csatornás mNS formalizmus monopol átmentre töltetlen és töltött részecskék esetén

Tekintsük a

$$H = T(\mathbf{r}) + h(\xi) + W(r,\xi) \tag{212}$$

Hamilton operátort, ahol T a relatív kinetikus energia operátort és h a szóródó partner-részecskék belső Hamilton operátora. A W kölcsönhatási operátor az r relatív radiális koordinátától és a ξ belső koordinátáktól függ. Ezzel a Hamilton operátorral csak monopol átmenetek írhatók le. Ekkor a rendszer hullámfüggvénye faktorizálható:

$$\Psi_{\ell m} = \left(\sum_{\alpha=1}^{N} R^{\ell}_{\alpha}(r)\chi_{\alpha}(\xi) \right) Y_{\ell m}(\theta,\phi), \tag{213}$$

ahol $R^{\ell}_{\alpha}(r)$ a radiális hullámfüggvény, $Y_{\ell m}$ a pálya mozgást írja le és $\chi_{\alpha}(\xi)$ a belső mozgást leíró sajátfüggvény:

$$h(\xi)\chi_{\alpha}(\xi) = \varepsilon_{\alpha}\chi_{\alpha}(\xi), \tag{214}$$

amelyhez az ε_{α} belső gerjesztési sajátenergia tartozik.

A $H\Psi = E\Psi$ Schrödinger egyenletet és a $V_{\alpha\beta} =< \chi_{\alpha}|W|\chi_{\beta} >$ potenciál mátrix jelölést használva, kapjuk az alábbi csatolt egyenletrendszert (vö. a (10) és (59) alatti egyenletekkel):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \varepsilon_{\alpha} - E \right] R^{\ell}_{\alpha n}(r) + \sum_{\beta=1}^{N} V_{\alpha\beta}(r)R^{\ell}_{\beta n}(r) = 0 \tag{215}$$

a radiális hullámfüggvényre. A csatornák teljes számát N-nel jelöltem, és a μ redukált tömeg független az α csatorna indextől mivel egyelőre nem tekintünk transzfer reakciókat. A W kölcsönhatás speciális választása miatt a V potenciál matrix nem függ az ℓ pályamozgás kvantumszámtól, ami azt jelenti, hogy nem csatolja össze a pálya mozgást a belső mozgással.

Mivel a (215) egyenlet N lineáris homogén egyenletet jelent az $R^{\ell}_{\alpha n}$ radiális függvényre, amelyeket N komponensű vektorként írhatunk fel:

$$\Psi_n(r) = \left(R^{\ell}_{1n}(r), R^{\ell}_{2n}(r), ..., R^{\ell}_{Nn}(r) \right)^T, \quad n = 1, 2, ...N, \tag{216}$$

ezek a megoldások az E teljes energiára nézve elfajultak: minden egyes α csatornához N lineárisan független megoldás tartozik. Ezért vezettük be az elfajultságot jelző n indexet (vö. (59) egyenletbeli jelöléssel).

Ezen jelölések bevezetése után most már megfogalmazható az inverz szórás probléma fix energiára. Ez nem jelent mást mint a $V_{\alpha\beta}(r)$ potenciál matrixnak a radiális megoldások aszimptotikájából történő meghatározását. Ahhoz, hogy megállapíthassuk hogy ez az aszimptotika a kísérletekből meghatározható *teljes* S-matrix $S^{\ell}_{\alpha\beta}$ $(\alpha, \beta = 1, 2, ..., N)$ elemeitől miképpen függ, első lépésként néhány korábbi jelölésünket általánosítjuk:

$$\rho = kr = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}r, \quad \psi^{\ell}_{\alpha n}(\rho) = \rho R^{\ell}_{\alpha n}(r), \quad U_{\alpha\beta}(\rho) = \frac{V_{\alpha\beta}(r)}{E}. \tag{217}$$

Ekkor átírhatjuk a (215) alatti egyenletünket a

$$\sum_{\beta=1}^{N} D^{U}_{\alpha\beta}(\rho)\psi^{\ell}_{\beta n}(\rho) = \ell(\ell+1)\psi^{\ell}_{\alpha n}(\rho) \tag{218}$$

formába, ahol bevezettük a

$$D^{U}_{\alpha\beta}(\rho) = \rho^2 \left\{ \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{E_\alpha}{E} \right] \delta_{\alpha\beta} - U_{\alpha\beta}(\rho) \right\}, \tag{219}$$

differenciál operátor matrixot és az α csatorna energiáját jellemző $E_\alpha = E - \varepsilon_\alpha$ csatorna energiát.

Az inverz szórás probléma megoldásának első lépése az, hogy választunk egy ismert, referencia potenciál matrixot, amely szimmetrikus: $U^0_{\alpha\beta}(\rho) = U^0_{\beta\alpha}(\rho)$. Az ehhez tartozó $\psi^{0\ell}_{\alpha n}(\rho)$ reguláris megoldásokat szintén ismerjük a

$$\sum_{\beta=1}^{N} D^{U_0}_{\alpha\beta}(\rho)\psi^{0\ell}_{\beta n}(\rho) = \ell(\ell+1)\psi^{0\ell}_{\alpha n}(\rho) \tag{220}$$

referencia Schrödinger egyenlet megoldásaként, ahol

$$D^{U_0}_{\alpha\beta}(\rho) = \rho^2 \left\{ \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{E_\alpha}{E} \right] \delta_{\alpha\beta} - U^0_{\alpha\beta}(\rho) \right\} \tag{221}$$

a referencia differenciál operátor matrixot jelenti.

Ezek után, a következő definícióval bevezetjük a $\mathbf{K}^{UU^0}$ transzformációs matrixot

$$\psi^{\ell}_{\alpha n}(\rho) = \psi^{0\ell}_{\alpha n}(\rho) - \sum_{\beta=1}^{N} \int_0^{\rho} \frac{d\rho'}{\rho'^2} K^{UU_0}_{\alpha\beta}(\rho, \rho')\psi^{0\ell}_{\beta n}(\rho'), \tag{222}$$

amely az ismert referencia megoldásokból állítja elő az ismeretlen potenciál matrixhoz tartozó reguláris megoldást. A fenti definíció a (144) alatti PL reprezentáció csatolt csatornás általánosításának fogható fel.

Könnyen megmutatható, hogy a (222) alatti függvény akkor lesz (218) reguláris megoldása, ha teljesülnek a

$$\sum_{\beta=1}^{N} D^{U}_{\alpha\beta}(\rho) K^{UU_0}_{\beta\gamma}(\rho,\rho') = \sum_{\beta=1}^{N} D^{U_0}_{\gamma\beta}(\rho') K^{UU_0}_{\alpha\beta}(\rho,\rho') \tag{223a}$$

parciális differenciál egyenletek a

$$K^{UU_0}_{\alpha\beta}(\rho=0,\rho') = 0, \quad K^{UU_0}_{\alpha\beta}(\rho,\rho'=0) = 0, \tag{223b}$$

határfeltételekkel, valamint, ha a potenciál matrix a következő összefüggésben áll a transzformációs kernellel:

$$U_{\alpha\beta}(\rho) = U^{0}_{\alpha\beta}(\rho) - \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}\frac{K^{UU_0}_{\alpha\beta}(\rho,\rho)}{\rho}. \tag{224}$$

A NS-féle (151) alatti ansatz csatolt csatornákra történő általánosítása [T3/7] a transzformációs kernelre a (152)-höz hasonló alakot szolgáltatja:

$$K^{UU_0}_{\alpha\beta}(\rho,\rho') = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{n,n'=1}^{N} c^{\ell}_{nn'} \psi^{\ell}_{\alpha n}(\rho) \psi^{0\ell}_{\beta n'}(\rho'), \tag{225}$$

ahol a $c^{\ell}_{nn'}$ elemek egyenlőre még ismeretlen együtthatókat jelentenek. Visszahelyettesítve (225)-öt (222)-be, egyenletrendszert kapunk a $c^{\ell}_{nn'}$ együttható matrix meghatározására, ha ismerjük a $\psi^{\ell}_{\alpha n}$ hullámfüggvényeket. Feltételezve, hogy az $U_{\alpha\beta}$ potenciál matrix ismert valamilyen $\rho > \rho_0$ távolságon túl, a $\psi^{\ell}_{\alpha n}$ hullámfüggvény kifejezhető a mérésekkel (hatáskeresztmetszetekkel) összefüggő S-matrix elemekkel.

Töltetlen részecskék szóródása esetén feltehetjük, hogy a potenciál matrix egy bizonyos távolságon túl zérus: $U_{\alpha\beta}(\rho > \rho_0) = 0$. Ekkor az U^0 referencia matrixra a legegyszerűbb választás a zérus: $U^{0}_{\alpha\beta}(\rho) = 0$. Ekkor a reguláris referencia megoldások a következők:

$$\psi^{0\ell}_{\alpha n}(\rho) = \rho T^{0\ell}_{\alpha n}(\rho) := \rho j_{\ell}(k_{\alpha}\rho)\delta_{\alpha n} \tag{226}$$

ahol $k^2_{\alpha} = E_{\alpha}/E$ és j_{ℓ} a szférikus Bessel-függvény.

A ψ hullámfüggvény a $T^{\ell}_{\alpha n}(\rho)$ degenerált megoldások szuperpozíciójaként áll elő az α-adik csatornában:

$$\psi^{\ell}_{\alpha n}(\rho) = \sum_{n'=1}^{N} \rho T^{\ell}_{\alpha n'}(\rho) A^{\ell}_{n'n}, \tag{227}$$

ahol az $A^{\ell}_{n'n}$ keveredési (normálási) együtthatók egyelőre ismeretlenek.

A $T^{\ell}_{\alpha n}(\rho)$ degenerált megoldásokat aszimptotikusan az S-matrix határozza meg:

$$T^{\ell}_{\alpha n}(\rho > \rho_0) = \sqrt{k_\alpha}(\delta_{\alpha n} h^{-}_{\ell}(k_\alpha \rho) - S^{\ell}_{\alpha n} h^{+}_{\ell}(k_\alpha \rho)), \tag{228}$$

ahol $h^{\pm}_{\ell}$ a szférikus Hankel függvényeket jelöli.

(222)-ből, (227), (228) és (225) használatával kapjuk a csatolt csatornás problémára általánosított RN egyenleteket:

$$\sum_{n'=1}^{N} \left(T^{\ell}_{\alpha n'}(\rho) A^{\ell}_{n'n} + \sum_{\ell'=0}^{\ell_{\max}} T^{\ell'}_{\alpha n'}(\rho) b^{\ell'}_{n'n} L^{\ell'\ell}_{n}(\rho) \right) = T^{0\ell}_{\alpha n}(\rho), \tag{229}$$

ahol

$$L^{\ell'\ell}_{n}(\rho) = \int_0^{\rho} j_\ell(k_n \rho') j_{\ell'}(k_n \rho') d\rho', \quad b^{\ell}_{nn'} = \sum_{n''=1}^{N} A^{\ell}_{nn''} c^{\ell}_{n''n'} \tag{230}$$

és $\ell_{\max}$ egy energiától függő határ impulzusmomentum kvantumszám, ami megszabja a használt matrixok méretét.

A (229) alatti egyenletben a $T^{0\ell}$ referencia megoldás és az L matrix ismert. A T^{ℓ} megoldásokat (228) szerint csak az aszimptotikus tartományban ismerjük, de ez elegendő az A és b konstansok meghatározására (ld. 4.1.1 fejezet). Ezek ismeretében viszont T^{ℓ} bármely ρ pontban kiszámolható (229) ismételt használatával, s ezen megoldásokból φ, $\mathbf{K}$, és végül U képezhető a megfelelő, (227), (225) és (224) alatti összefüggésekből.

Töltött részecskék ütközése esetén (228) helyett

$$T^{\ell}_{\alpha n}(\rho > \rho_0) = \sqrt{k_\alpha}(H^{-}_{\ell}(k_\alpha \rho)\delta_{\alpha n} - S^{\ell}_{\alpha n} H^{+}_{\ell}(k_\alpha \rho)) \tag{231}$$

használandó, ahol

$$H^{\pm}_{\ell}(k_\alpha \rho) = \frac{e^{i\sigma^{\ell}_{\alpha}}}{k_\alpha \rho}(G_\ell(k_\alpha \rho) \pm i F_\ell(k_\alpha \rho)) \tag{232}$$

kifejezhető a G_ℓ irreguláris és F_ℓ reguláris Coulomb függvénnyel és a

$$\sigma_\alpha^\ell = arg\Gamma(\ell + 1 + i\eta_\alpha), \quad \eta_\alpha = \frac{Z_p Z_t e^2 \mu}{\hbar^2 k k_\alpha} \tag{233}$$

Coulomb fázissal,[36] ahol $Z_p e$ és $Z_t e$ a projektil ill. a target töltését jelenti.

4.2.6.2 Csatolt csatornás mNS eredmények monopol átmenetre töltetlen és töltött részecskék esetén

Az egyszerűség kedvéért két csatolt négyszög potenciál esetére végzem el a fenti elmélet tesztjét, annál is inkább, mert erre a problémára az S-matrix analitikusan ismert.[48]

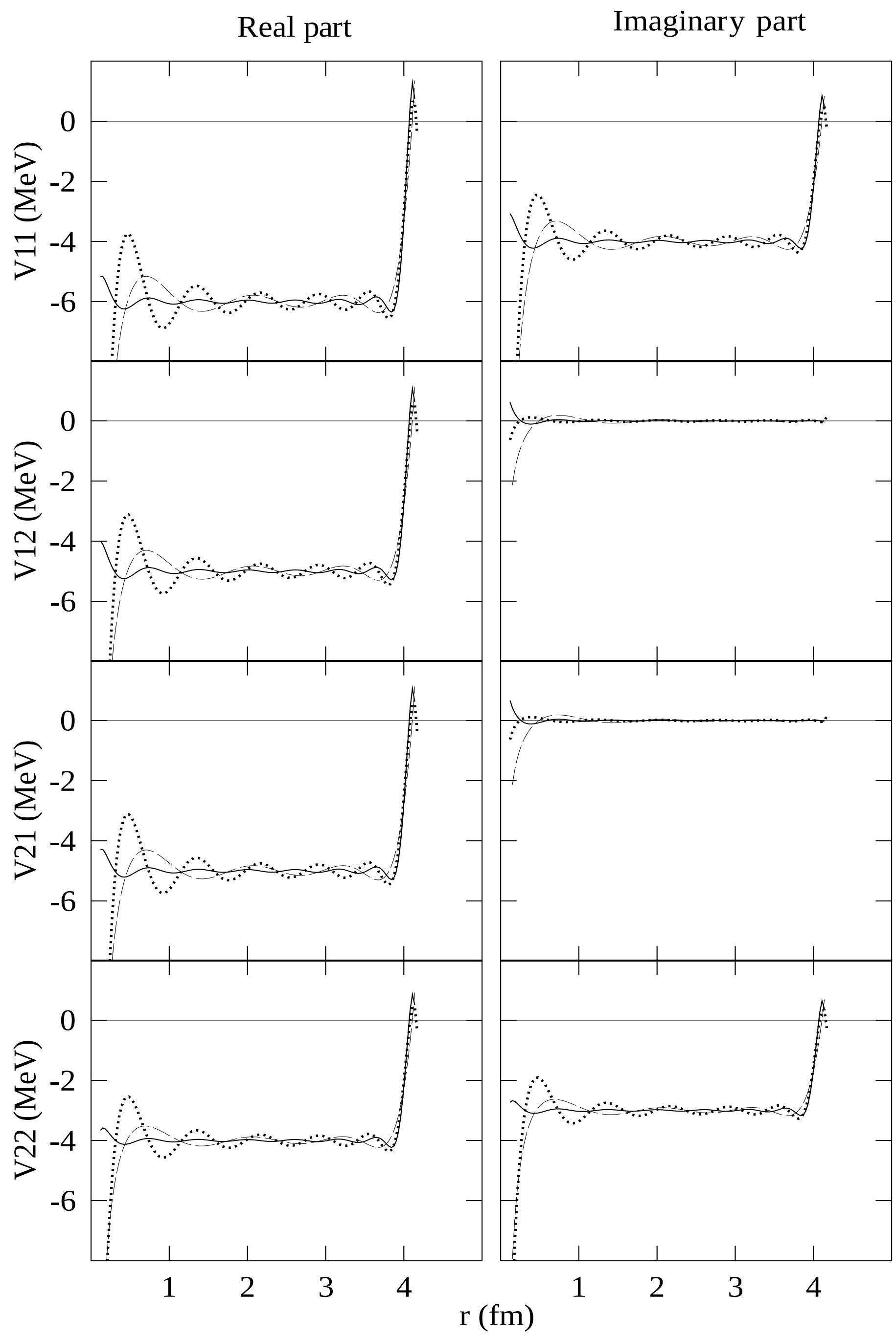
Tekintsük ezért tehát a

$$\mathbf{V}(r) = \begin{cases} \begin{pmatrix} -6-4i & -5 \\ -5 & -4-3i \end{pmatrix} \text{MeV} & , \quad r \leq 4\,\text{fm}, \\ \\ 0 \quad \text{MeV} & , \quad r > 4\,\text{fm}. \end{cases} \tag{234}$$

potenciál matrixot. Legyen az első csatornában a gerjesztési energia zérus: $\varepsilon_1 = 0$ MeV, a másodikban pedig $\varepsilon_2 = 5$ MeV. A redukált tömeget úgy választjuk, hogy az megfeleljen egy neutron–^{12}C-mag ütközésnek: $\mu = 859.85 \text{MeV}/c^2$. A (229)-ben szereplő A and b spektrális együtthatók kiszámolásához az $r_1 = 4.1$ fm és $r_2 = 4.2$ fm technikai paramétereket választjuk.

A 25. ábra három fix energia esetén számolt inverz potenciál matrixot mutat be. Az energiák a következők: $E = 250, 150$ és 50 MeV, s az ezeknek megfelelő $\ell_{\max}$ technikai paraméter: $15, 12, 7$. A 25. ábrán a diagonális elemek, V_{11} és V_{22}, fent és alul látszanak, míg a V_{12} és V_{21} csatoló potenciáloknak a két középső diagramm felel meg.

Az ábrákból leszűrhetjük azt a következtetést, hogy a több adatot tartalmazó (nagyobb energia mellett elvégzett) inverz számolás jobban reprodukálja a potenciált, mint a kevés bemenő adatot tartalmazó alacsony energiás számolás. Ez a következtetés egybevág az eredeti mNS eljárás tesztelésekor kapott megállapítással.[22] Ugyancsak tanulmányozható a 25. ábrán a mNS módszer jellegzetessége, amely véges matrixok használata esetén (hamis) szingularitást eredményez az origóban. Az is látható, hogy legnehezebben a potenciálbeli diszkontinuitást reprodukálja az eljárás. Megjegyzésre érdemes még a csatoló potenciálok imaginárius részének *számolt* zérus értéke, valamint az, hogy jóllehet az eljárásban a



25. ábra. Inverz potenciál matrix semleges részecskék ütközésére. $E = 250$ MeV (—), $E = 150$ MeV (- - -), $E = 50$ MeV ($\cdots$).

potenciál $U_{\alpha\beta} = U_{\beta\alpha}$ szimmetriája nincs kihasználva, a numerikus eljárás nagy pontossággal reprodukálta azt.

Teszt számolásunk második esete töltött részecskék csatolt csatornás ütközésére vonatkozik. A potenciál matrix diagonális része 5 fm távolságon felül olyan tiszta Coulomb köcsönhatásnak felel meg, amely szén-alfa részecske ütközés esetén fordul elő:

$$\mathbf{V}(r) = \begin{cases} \begin{pmatrix} -6-4i & -5 \\ -5 & -4-3i \end{pmatrix} \text{MeV} & , \quad r \leq 5\,\text{fm}, \\ \dfrac{12e^2}{r} \quad \text{MeV} & , \quad r > 5\,\text{fm}. \end{cases} \tag{235}$$

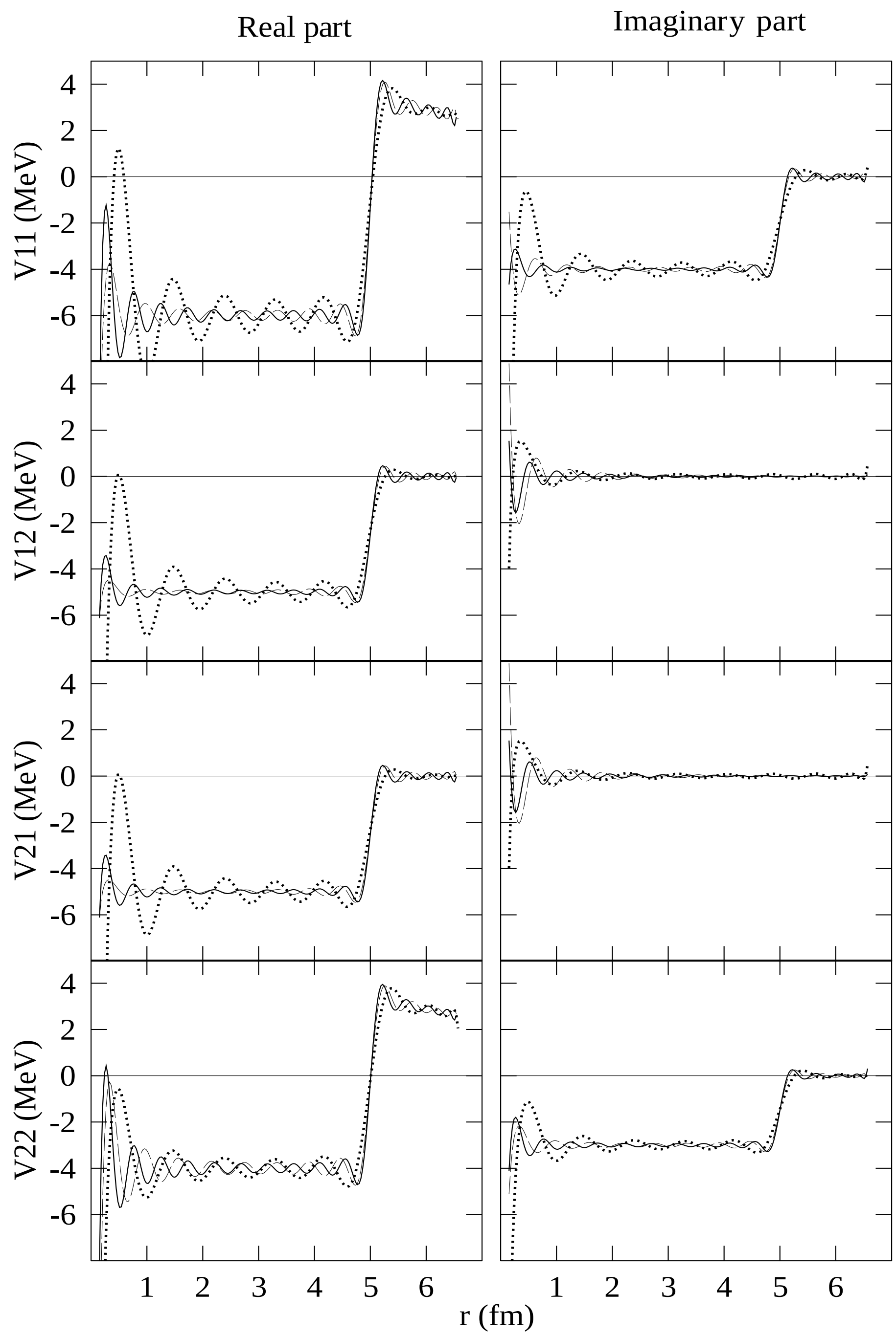
A megfelelő redukált tömeg most $\mu = 2794.50\text{MeV}/c^2$, a gerjesztési energiák pedig vátozatlanul $\varepsilon_1 = 0$ MeV és $\varepsilon_2 = 5$ MeV értékűek maradnak.

A fenti, Coulomb aszimptotikájú potenciálra számolt S-matrixot először egy konstans aszimptotikával rendelkező potenciálnak megfelelő S-matrixra transzformáltam $r_B = 6.5$ fm transzformációs rádiusznál (ld. a (184)-es egyenletet). Az A és b spektrál együtthatók számolását az $r_1 = 6.5$ fm és $r_2 = 6.6$ fm külső sugaraknál hajtottam végre.

A 26. ábra mutatja a csatolt csatornás inverz számolás eredményét töltött részecskék ütközése esetén. A számolást ugyanarra a három teljes energia értékre végeztem el, mint az előző példában, az $\ell_{\max}$ technikai paramétert azonban az előző eset értékeinek kb. duplájára kellett választani ahhoz, hogy reprodukciót érjek el ($\ell_{\max} = 30, 25, 16$, rendre az $E = 250, 150, 50$ MeV energiák esetén). A 26. ábrát tanulmányozva megállapíthatjuk, hogy a csatolt csatornás inverz számolás töltött részecskék esetén is végrehajtható, ha ismerjük az S-matrix sorozatokat. Minőségét tekintve pedig az előző példához hasonló a számolás eredménye: a reprodukció ott a legpontosabb, ahol több adat áll rendelkezésre.

4.2.6.3 Csatolt csatornás mNS eredmények transzfer reakciókra [T3/8]

Az előző fejezetekben kidolgozott és tesztelt csatolt csatornás inverz módszer minden további nélkül alkalmazható zérus spinű magok transzfer reakciójának analízisére is. Tekintsük például a $^{16}\text{O}(\alpha,{}^{8}\text{Be})^{12}\text{C}$ endotermikus transzfer reakciót, amelynek reakcióhője $Q = -7.162$ MeV. Alapállapotú transzfer esetén differenciális hatáskeresztmetszetet E_{cm}=52 MeV-en Wozniak és társai mértek[49] erre a reakcióra. Mivel csak $N_{\text{exp}} = 18$ szórási szög értékre adtak meg mérési értéket a 17–75° közötti tartományban, s ezekből csak maximum négy S-matrix érték extrahálható fázistolás analízis révén ($4I_{\max} + 3 \leq N_{\text{exp}}$, ld. Marty[50]), ezért egy olyan lokális, valós, transzfer reakció potenciált választunk, amely jól fitteli a mért



26. ábra. Az inverz potenciál matrix töltött részecskék esetén. $E = 250$ MeV (—), $E = 150$ MeV (- - -), $E = 50$ MeV ($\cdots$).

szögeloszlást. A mérési adatok elégtelensége miatt a transzfer potenciált tehát egy ($V_0 = 51$ MeV, $R_V = 3.0$ fm, $a_V = 0.333$ fm paraméterekkel rendelkező) WS potenciállal közelítjük, amelyet a fordított irányú (egyébként mérhetetlen!), ^{12}C(^{8}Be,α)^{16}O transzfer reakcióra is érvényesnek vehetünk az időtükrözési szimmetria alapján ($V_{12} = V_{21}$). Ezekből nyerjük aztán az inverz számoláshoz szükséges [ld. (228), ill. (231) alatti egyenleteket] $S^{\ell}_{12} = S^{\ell}_{21}$ adatokat.

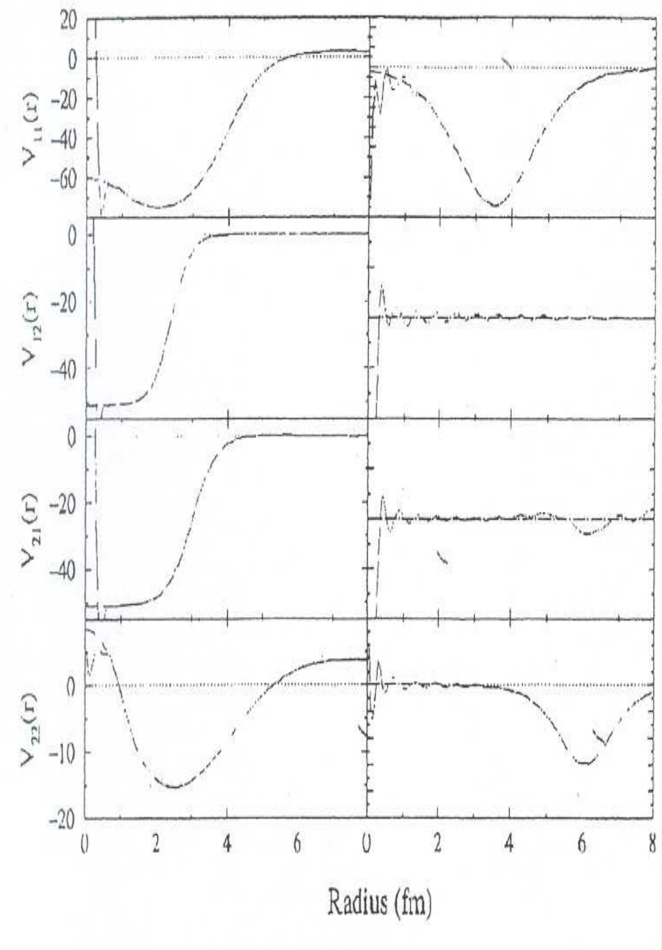
Az inverz számolás kivitelezéséhez természetesen a rugalmas csatorna adatokra is szükség van. A két, ^{16}O(α,α)^{16}O és ^{12}C(^{8}Be,^{8}Be)^{12}C, rugalmas csatorna közül az utóbbi szintén nem mérhető kísérletileg a ^{8}Be mag alapállapoti instabilitás miatt. Wozniak és társai azonban[49] a 'hasonló' ^{12}C(^{9}Be,^{9}Be)^{12}C szórást is mérték, és az erre, valamint a ^{16}O(α,α)^{16}O rugalmas szórásra vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszetekhez fittelt optikai potenciál paramétereket[49] fogjuk használni az S-matrix előálításához.

A 27. ábrán ezek a mérési adatokból leszármaztatott rugalmas és transzfer potenciálok láthatók, folytonos vonallal jelölve. Az input S-matrixot a (215) alatti egyenlet numerikus integrálásával kaptam, 0.01 fm integrációs lépésközt használva, $E = 104$ MeV c.m. energián számolva ($\varepsilon_1 = 0, \varepsilon_2 = -7.162$ MeV). Ezt az S-matrixot az inverz számolásban $\ell_{\max}$=50 maximális parciális hullámig felhasználva, 408 darab (229) alatti csatolt lineáris egyenletet kellett szimultán megoldani ahhoz, hogy az inverz potenciálok számolásához szükséges $\mathbf{A}$ és $\mathbf{b}$ spektrális együtthatókat meghatározhassuk, $r_i = 10.1$ és 10.2 fm külső rádiuszt használva. Ezen együtthatókból aztán (229) ismételt használatával, (230) és (225)-(227) figyelembevételével, kapjuk az inverz potenciálokat (224)-ből.

A 27. ábrán ezeket az inverz számolásból származó potenciálokat is felrajzoltam, szaggatott vonallal. Eltekintve a már többször diszkutált origóbeli (hamis) szingularitástól, az egyezés kiváló. Így reményünk lehet arra nézve, hogy megfelelő mérési adatok rendelkezésre állása esetén a csatolt csatornás inverz formalizmussal képesek lehetünk leszármaztatni modell-független csatoló potenciálokat, amelyek zérus spinű magok transzfer reakcióit okozzák.

4.2.6.4 Csatolt csatornás mNS eredmények dipol átmentre [T3/9]

A 4.2.6.1 fejezetben bemutatott csatolt csatornás inverz eljárás olyan speciális Hamilton operátorra lett kifejlesztve, amelyben nincs csatolás a relatív mozgás és a magok belső dinamikája között, a kölcsönhatási energia $W(r, \xi)$ csupán a relatív távolság abszolút



27. ábra. Az inverz potenciál matrix (hosszú szaggatott vonal) összehasonlítása az analitikus potenciál matrixszal (rövid szaggatott vonal) $E = 104$ MeV teljes szórási energia esetén. Bal oldalon a potenciálok valós, jobb oldalon az imaginárius részei láthatók. Az ábrán felülről lefelé, a következő folyamatoknak felelnek meg az egyes potenciálok: ^{16}O(α,α)^{16}O, ^{16}O(α,^{8}Be)^{12}C, ^{12}C(^{8}Be,α)^{16}O és ^{12}C(^{8}Be,^{8}Be)^{12}C.

értékétől függ. Általános esetben a kölcsönhatási operátor függ a relatív távolság irányától is, s ezért multipol sorba fejthető

$$W(\mathbf{r},\xi)=\sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}}\sum_{\nu}Q_{\lambda\nu}(r,\xi)Y^{*}_{\lambda\nu}(\hat{r}) \tag{236}$$

az $\hat{r}=\mathbf{r}/r$ irányszögektől függő impulzusmomentum sajátfüggvények szerint [vö. 2.3 fejezet, (22) egyenlet]. Az itt megjelent $Q_{\lambda\nu}$ multipolus momentumok írják le a relatív és belső magmozgás közötti csatolást.

Mindez azt eredményezi, hogy a $V_{\alpha\beta}$ csatoló potenciálok függni fognak az I megmaradó teljes impulzusmomentumtól, azaz (215) második tagjában $V^{I}_{\alpha\beta}$ írandó, és a radiális hullámfüggvény is az I-től függ, nem egyszerűen a pályamomentumtól. A $\mathbf{V}^{I}$ potenciál matrix faktorizálható egy impulzusmomentum függő és attól független részre:

$$V^{I}_{\alpha\beta}=\sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}}C^{I\lambda}_{\alpha\beta}v^{\lambda}_{\alpha\beta}(r), \tag{237}$$

ahol

$$C^{I\lambda}_{\alpha\beta}=\frac{i^{\ell_\beta-\ell_\alpha}}{\sqrt{4\pi}}(-1)^{I+J_\alpha+\lambda}\left\{\begin{matrix}\ell_\alpha & \lambda & \ell_\beta\\ J_\beta & I & J_\alpha\end{matrix}\right\}\begin{pmatrix}\ell_\alpha & \lambda & \ell_\beta\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\sqrt{2\ell_\alpha+1}\sqrt{2\ell_\beta+1}\sqrt{2\lambda+1} \tag{238}$$

és

$$v^{\lambda}_{\alpha\beta}(r)=<\chi_\alpha||Q_\lambda(r,\xi)||\chi_\beta>\,. \tag{239}$$

Itt az utóbbi kifejezés, a Q_λ multipolus redukált matrix eleme függ a λ multipol rendtől, de nem függ az I,ℓ_α és ℓ_β impulzusmomentum kvantumszámoktól.

A potenciál matrix impulzusmomentumtól való függése azt eredményezi, hogy a (225) alatti transzformációs kernel is függ tőle:

$$K^{UU_0I}_{\alpha\beta}(\rho,\rho')=\sum_{n,n'=1}^{N}c^{I}_{nn'}\psi^{I}_{\alpha n}(\rho)\psi^{0I}_{\beta n'}(\rho'), \tag{240}$$

és emiatt az impulzusmomentumra való összegzés elesik. Más szóval azt kaptuk, hogy a kernelt, amiből pedig a potenciált számoljuk (224) alapján, igen csak korlátozott függvénytéren fejthetjük sorba. Numerikus számolás is azt bizonyítja, hogy a fenti ansatz-cal elvégzett számolás nem kellőképpen (re)produkálja az inverz potenciál matrixot, még nagy N csatorna szám esetén sem.

A problémából a kivezető utat a kernel $\rho = \rho'$ diagonális részének vizsgálata kínálja, amely szerint $K^{UU_0I}_{\alpha\beta}(\rho,\rho)$ (237)-hez hasonlóan felbomlik egy impulzusmomentumtól függő és attól nem függő szorzat összegére. Ezért ansatzként próbálkozhatunk a

$$K^{UU_0I}_{\alpha\beta}(\rho,\rho') = \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} Q^{I\lambda}_{\alpha\beta}\mathcal{K}^{\lambda}_{\alpha\beta}(\rho,\rho'), \tag{241}$$

ahol az új $\mathcal{K}^{\lambda}_{\alpha\beta}$ kernel matrix elemek függetlenek az I,ℓ_α,ℓ_β impulzusmomentum kvantumszámoktól, és a $Q^{I\lambda}_{\alpha\beta}$ együtthatókat a

$$Q^{I\lambda}_{\alpha\beta} = \begin{cases} C^{I\lambda}_{\alpha\beta}/C^{I\to\infty\lambda}_{\alpha\beta} & \text{ha } C^{I\to\infty\lambda}_{\alpha\beta} \neq 0 \\ 1 & \text{különben} \end{cases} \tag{242}$$

kifejezés definiálja. Mivel a $C^{I\lambda}_{\alpha\beta}(\neq 0)$ együtthatók gyorsan közelítenek $C^{I\to\infty\lambda}_{\alpha\beta}$ aszimptotikus értékükhöz, nagy I (kis λ) esetén a $Q^{I\lambda}_{\alpha\beta}$ együtthatók egységgé válnak.

Másrészt, mivel az új $\mathcal{K}^{\lambda}_{\alpha\beta}$ kernel matrix elemek függetlenek az I,ℓ_α,ℓ_β impulzusmomentum kvantumszámoktól, ezek már nagyobb bázison fejthetők sorba, mint ami (240)-ben használatos, és így a következő ansatz-ot nyerjük:

$$\mathcal{K}^{\lambda}_{\alpha\beta}(\rho,\rho') = \sum_{I=0}^{I_{\max}} \sum_{n,n'=1}^{N} c^{I\lambda}_{nn'}\psi^{I}_{\alpha n}(\rho)\psi^{0I}_{\beta n'}(\rho'). \tag{243}$$

Ezt behelyettesítve (241)-be, kapjuk a kernel elemekre a végső formulát:

$$K^{UU_0I}_{\alpha\beta}(\rho,\rho') = \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} Q^{I\lambda}_{\alpha\beta} \sum_{I'=0}^{I_{\max}} \sum_{n,n'=1}^{N} c^{I'\lambda}_{nn'}\psi^{I'}_{\alpha n}(\rho)\psi^{0I'}_{\beta n'}(\rho'). \tag{244}$$

Az I' szerinti összegzés elvben végtelenig megy, de feltesszük, hogy létezik egy $I_{\max}$ maximális impulzusmomentum, amely felett már nincs lényeges járulék az összeghez.

A fenti formalizmust olyan hipotetikus alfa részecske és szén atommag $E_{\mathrm{cm}} = 80$ MeV energiájú ütközésre alkalmazom, amelyben az ütközés során a 0 MeV-es $J_\alpha = 0$ alapállapot a 3 MeV-es J_α=1-es gerjesztett állapotba mehet át a dipol ($\lambda = 1$) kölcsönhatás révén. Ezt a $v^1_{\alpha\beta}$ (WS alakú) dipol kölcsönhatást kiegészítem egy, csak r-től függő optikai potenciállal a diagonális csatornákban. Így az S-matrixot a

$$V^I_{\alpha\beta}(r) = \delta_{\alpha\beta}(V_\alpha(r) + iW_\alpha(r)) + C^{I1}_{\alpha\beta}v^1_{\alpha\beta}(r) \tag{245}$$

szerkezetű potenciálból számolom, ahol az optikai potenciál valós részét térfogati, az imaginárius részét felületi WS potenciál írja le [T3/9].

Az említettek értelmében négy csatorna lehetséges:

$$\begin{array}{llll} \alpha = 1 & \ell_\alpha = I & J_\alpha = 0 & \varepsilon_\alpha = 0MeV, \\ \alpha = 2 & \ell_\alpha = I & J_\alpha = 1 & \varepsilon_\alpha = 3MeV, \\ \alpha = 3 & \ell_\alpha = I+1 & J_\alpha = 1 & \varepsilon_\alpha = 3MeV, \\ \alpha = 4 & \ell_\alpha = I-1 & J_\alpha = 1 & \varepsilon_\alpha = 3MeV, \end{array}$$

és az $\alpha = 4$-es csatorna nyilván csak $I \geq 1$ esetén létezik.

Az S-matrixot $I = 0, 1, ..., 30$ impulzusmomentumig számolva, (244)-et (222)-ben felhasználva és (227)-et figyelembe véve, (229)-hez hasonló egyenletből kaphatjuk az $\mathbf{A}$ és $\mathbf{b}$ együttható matrixot, amelyek segítségével az előző fejezetben ismertetett módon előáll az inverz potenciál.

A 28. ábrán folytonos vonal jelöli a kiinduló potenciál matrixot, amely az input S-matrixot szolgáltatta. Szaggatott (diagonális potenciálok) és pontozott (dipol potenciálok) vonal jelenti az inverz számolás eredményeképpen kapott $I = 1$-hez tartozó inverz potenciált, amelyből az összes más I-jű potenciál matrix megkapható a megfelelő $C^{I1}_{\alpha\beta}/C^{I=11}_{\alpha\beta}$ faktorral való szorzással.

A 28. ábra bal oldalán levő négy potenciál rajz a következő potenciálokat tartalmazza felülről lefelé sorrendben:

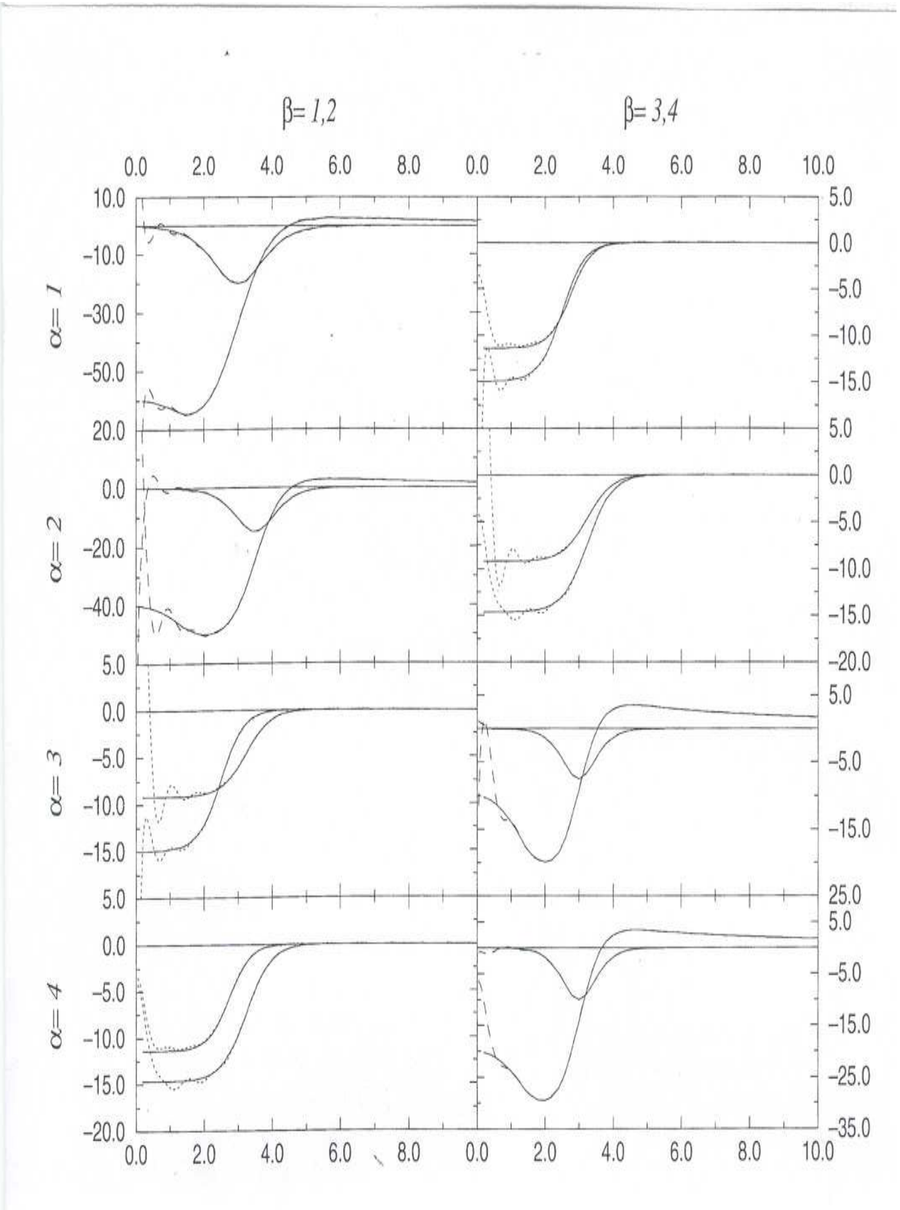
$$V_{11}; V_{22}; V_{32}, V_{31}; V_{41}, V_{42}.$$

A jobb oldali rajzok potenciáljai pedig, szintén fentről lefelé sorolva:

$$V_{14}, V_{13}; V_{23}, V_{24}; V_{33}; V_{44}.$$

Érdekességképpen megemlíthető, hogy $I_{\max} = 30$ és négy csatorna esetén 978 csatolt egyenletet kellett szimultán megoldani az $\mathbf{A}$ és $\mathbf{b}$ együttható matrix kiszámításához. Ezek ismeretében minden egyes intervallum ponthoz 123 csatolt egyenletet kellett megoldani a $T^I_{\alpha n}(r)$ hullámfüggvény meghatározásához az $\alpha = 1, 2, 3$ csatornákban és 120-at az $\alpha = 4$ csatorna esetén.

A 28. ábrát tanulmányozva megállapíthatjuk, hogy a közelítő módszer elég nagy pontossággal visszaadja az input potenciált, eltekintve az origó környékétől. Ez azonban nem érzékeny része a szórás számolásnak, mivel az inverz potenciálokból visszaszámolt S-matrix nagy pontossággal reprodukálja az input S-matrix elemeket [T3/9].



28. ábra. Az inverz potenciál matrix (szaggatott és pontozott vonal) összehasonlítása $I = 1$-re az analitikus dipol potenciál matrixszal (folytonos vonal) $E = 80$ MeV teljes szórási energia esetén. A potenciálok MeV egységben, az r radiális távolság fm-ben van mérve.

4.3 Záró megjegyzések

A fejezet lezárásaként megállapíthajuk, hogy az alfejezetekben kidolgozott és numerikusan tesztelt formalizmus által elvi lehetőséget teremtettünk csatolt csatornás kölcsönhatások fix energiás kísérleti eredményekből történő modell-független meghatározására. A módszer hasonló a fix impulzusmomentum esetére vonatkozó csatolt csatornás inverz problémához, amelynek elméletét Cox fejlesztette ki,[51] és ezt sikerrel alkalmazta társaival együtt Geramb,[52] többek közt nukleon kölcsönhatások fázistolásokból történő meghatározására. Amíg a fix$-l$ módszer esetén a csatorna S-matrix elemeket az összes energiára (a zérustól végtelenig terjedő tartományban) kellene ismerni s ez nyilvánvalóan képtelenség, addig a fix$-E$ eljárásban egyetlen energián a *teljes* S-matrixot kellene ismerni. Ez kísérletileg egyelőre szintén megvalósíthatatlan, mivel az ütközésekben a részecskék alapállapotban vannak kezdetben. Így mindkét esetben fizikailag jól megalapozott feltételezések segítségével kiegészítjük a hiányzó kísérleti információt ahhoz, hogy az inverz számolás végrehajtható legyen. Erre egy példát az előző fejezetben láttunk, ahol a potenciál matrix szimmetriáját használva kaptuk meg a hiányzó kísérleti S-matrix elemet. Hasonló lehetőség az S-matrix unitaritásának kihasználása.

Az eddigiekből láthatjuk, hogy az inverz szórás témakör egyáltalában nem lezárt terület. Sok fejlesztési és alkalmazási lehetőségre nyílik még mód, kezdve az elmélet szívét jelentő LGM egyenletbeli input kernel különböző ansatzok szerinti meghatározásától (ld. például CT módszer, 4.1.2 fejezet), egészen a csatolt csatornás alkalmazások további általánosításáig. Jóllehet a fix energiás inverz szórás témakör önmagában is vonzó kutatások végzésére ad módot, nem szabad figyelmen kívül hagyni azt sem, hogy az elmélet potenciális alkalmazási területét a nemlineáris parciális evolúciós egyenletekkel leírható fizika jelentheti a jövőben.

Köszönetnyilvánítás

Hálás szívvel emlékezem tanáromra, Marx György professzorra, aki lebilincselő előadásaival ráirányította figyelmemet a kvantummechanikára, valamint Teller Ede professzorra, akinek a kilencvenes évek elején tartott emlékezetes előadásainak kvantummechanikát érintő része megvilágította számomra ezt a diszciplinát. Nekik köszönhető, hogy egyetemi munkám során az oktatásban, és a kutatásban főként a kvantummechanika csodálatos világával foglalkoztam.

Ugyancsak szeretnék köszönetet mondani Ladányi Károly és Werner Scheid professzoroknak, akiktől a kutató munka szépségét és a fizika egységét tanultam el számos közös munkánk során.

Köszönet illeti Ken Amos, és Heinz von Geramb professzor urakat, amiért nagy tudásuk és tájékozottságuk révén az inverz módszerek világába bevezettek és főként szemléletük átadásával segítettek az 'inverz' gondolkodásmód elsajátításában.

Végül köszönöm tanítványaimnak és munkatársaimnak, nevezetesen dr. Lévay Péter, dr. Endrédi Gábor, dr. Matthias Eberspächer, dr. Harman Zoltán, dr. Barna Imre, dr. Schumayer Dániel, Báthory Barnabás, és Oliver Melchert uraknak az együttműködést, a számtalan diszkussziót, és a rengeteg munkát, amellyel közös cikkeinkhez hozzájárultak.

Jelen dolgozat elkészítéséhez a Széchenyi István Ösztöndíj nyújtott anyagi segítségét, amit szintén hálásan köszönök.

Tézisek

1. Általánosított multipol sorfejtési eljárást fejlesztettem ki a magreakciók csatolt csatornás elméletében fellépő potenciál matrixelemek analitikus számolására [T1/1].
2. Taylor-sorfejtésen alapuló lokalizációs eljárást javasoltam nemlokális potenciálok vizsgálatára [T1/2,3].
3. Reakciók leírására szolgáló csatolt integro-differenciál egyenletek megoldására legkisebb négyzetek variációs módszert javasoltam. Egy-, két-, és három-csatornás esetekre explicit számolásokkal megmutattam, hogy a javasolt módszer az addig használatos módszerekhez viszonyítva számos előnnyel rendelkezik [T2/1,2].
4. Kimutattam, hogy az irodalomban anomáliamentesnek vélt Schwinger és Newton variációs módszer hamis rezonanciákat produkál a fizikailag releváns energia és skála paraméter tartományban és rámutattam a nemfizikai rezonanciák eredetének okára. Javaslatot tettem a hamis szingularitások kiküszöbölésének módjára [T2/3,4].
5. Szén atommagok rugalmas ütközéséből származó mérési adatokból határoztam meg a szórást okozó lehetséges potenciálok egy családját [T3/1,2].
6. Nukleon-alfa részecske centrális és spin-pálya potenciálokat határoztam meg kísérleti adatokat reprodukáló fázistolások felhasználásával az 1-20 MeV közötti energia tartományban, a módosított Newton-Sabatier eljárás segítségével [T3/3].
7. Mért adatok felhasználásával izo-skalár $\pi - \pi$ szórási potenciálokat származtattam le, amelyek kaon küszöb alatti és feletti energiájú pion-pion kölcsönhatásról adnak térbeli információt. Megállapítottam, hogy a küszöb alatti potenciálok valósak, a pionok Coulomb-szerű kölcsönhatást gyakorolnak egymásra 0.2 fm-nél kisebb tartományban, több száz GeV erősséggel vonzva egymást. A küszöb feletti potenciálok komplexek és sokkal kiterjedtebb térbeli folyamatokra utalnak [T3/4].
8. Elektron-argonatom szórási potenciálokat határoztam meg kísérleti adatok felhasználásával a gerjesztési küszöb alatti energiákra a mNS eljárás segítségével, és a potenciál r^{-4}-es

hosszúhatótávolságát figyelembevéve az általam generált Mathieu-függvények segítségével [T3/5,6].

9. A fix energiás módosított Newton-Sabatier (mNS) inverz szóráselmélet olyan sok-csatornás változatát adtam meg, amelyben monopol átmenetek indukálják a reakciót. Az elméletet először csatolt négyszög potenciálokra teszteltem, majd megadtam a Coulomb szórásra, a multipol és transzfer átmenetre való általánosítást is [T3/7-9].

10. Nemlineáris egyenletrendszert állítottam fel a Cox-Thompson (CT) inverz potenciál véges számú fázistolás adatokból történő meghatározására [T3/10]. A CT módszert általánosítottam és alkalmaztam komplex potenciáloknak S-matrix elemekből történő meghatározására [publikálás alatt (2005)].

A tézisekhez tartozó dolgozatok jegyzéke

[T1/1] Apagyi Barnabás and Scheid Werner:
Taylor expansion for the localization of non-local coupling potentials,
J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 9 (1983) 73–84

[T1/2] Apagyi Barnabás and Scheid Werner:
Application of the Dini-expansion methods to the evaluation of non-local coupling potentials,
J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 10 (1984) 791–804

[T1/3] Barna I, Apagyi B, and Scheid W:
Localisation of nonlocal heavy-ion potentials
J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 26 (2000) 323–31

[T2/1] Apagyi Barnabás and Ladányi Károly:
Least-squares method in scattering theory,
Phys. Rev. A 33 (1986) 182 -190

[T2/2] Apagyi B, Ladányi K and Lévay P:
Application of the multichannel LVM–ST to the modified Huck problem,
Suppl. to Research Report of Laboratory of Nuclear Science, Tohoku University, 19 (1986) 164–165

[T2/3] Apagyi Barnabás, Lévay Péter and Ladányi Károly:
Anomalies of the Schwinger phase shifts in the static exchange approximation,
Phys. Rev. A 37 (1988) 4577–4581

[T2/4] Apagyi Barnabás, Lévay Péter and Ladányi Károly:
Spurious singularities in the generalized Newton variational method,
Phys. Rev. A 44 (1991) 7170–8

[T3/1] Apagyi Barnabás, Ostrowski Alexander, Scheid Werner, and Voit Helmut:
Phase shift analysis and inversion to a potential for $^{12}C+^{12}C$ elastic scattering at $E_{c.m.}$=9.50 and 11.38 MeV,
J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 18 (1992) 195–204

[T3/2] Apagyi Barnabás, Schmidt Alexander, Scheid Werner, and Voit Helmut:
$^{12}C+^{12}C$ elastic scattering potentials obtained by unifying phase shift analysis with the modified Newton-Sabatier inversion method,
Phys. Rev. C. 49 (1994) 2608–17

[T3/3] Alexander N, Amos K, Apagyi B, and Lun D R:
Nucleon-alpha particle interactions from inversion of scattering phase shifts,
Phys. Rev. C. 53 (1996) 88–95

[T3/4] Báthori B, Harman Z, and Apagyi B:
Pion-pion potentials by inversion of phase shifts at fixed energy,
in Hadrons, Nuclei and Applications (A. Zichichi ed, World Scientific, 2000), pp. 140–145

[T3/5] Apagyi Barnabás and Lévay Péter:
Electron-atom scattering potentials obtained by inversion at fixed energy,
Lecture Notes in Physics 427 (1993) 252–265

[T3/6] Apagyi B, Lévay P, and Scheid W:
Fixed-energy inversion of polarisation corrected electron-atom scattering phase-shifts,
Lecture Notes in Physics 488 (1997) 156–168

[T3/7] Eberspächer M, Apagyi B, and Scheid W:
Solution of coupled channel inverse scattering problem at fixed energy by a modified Newton-Sabatier method,
Phys. Rev. Letters 77 (1996) 1921–1924

[T3/8] Eberspächer M, Amos K, and Apagyi B:
Inverse scattering method for transfer reactions,
Phys. Rev. C. 62 (2000) 064610

[T3/9] Eberspächer M, Amos K, Scheid W, and Apagyi B:
An approximation method for the solution of the coupled channels inverse scattering problem at fixed energy,
J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 26 (2000) 1065–1077

[T3/10] Apagyi B, Harman Z, and Scheid W:
Solution of the Cox-Thompson inverse scattering problem using finite set of phase shifts,
J. Phys. A 36 (2003) 4815–4826

Általános irodalom

[1] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton, NJ, University Press, 1960)

[2] G. N. Watson, *A treatise on the theory of Bessel functions* (Cambridge, University Press, 1966).

[3] K. Amos, P. J. Dortmans, H. V. von Geramb, S. Karataglidis, and J. Raynal: *Nucleon-nucleus scattering: a microscopic nonrelativistic approach* (Springer Series in Nuclear and Particle Physics, (2000), Ch. 11.)

[4] W. Bauhoff, H. V. von Geramb, and G. Pálla, Phys. Rev. C. 27, 2466 (1983); C. A. Bertulani, L. F. Canto, and M. S. Hussein, Phys. Repts. 226, 281 (1993).

[5] H. Fiedeldey and S. Sofianos,Z. Phys. A311, 339 (1983).

[6] Barnabás Apagyi, Karl-Ernst May, Thomas Häuser, and Werner Scheid, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 16, 451 (1990).

[7] K. Ladányi and T. Szondy, Nuovo Cimento B 5, 70 (1971).

[8] T. L. John, Proc. Phys. Soc. London 76,532 (1960).

[9] B. L. Moiseiwitsch, J. Phys. B 16, 4015 (1983).

[10] J. Horacek and T. Sasakawa, Phys. Rev. A 30,2274 (1984).

[11] K. Smith, W.F. Miller, and A. J. P. Mumford, Proc. Phys. Soc. London 76, 599 (1960).

[12] R. R. Lucchese, Phys. Rev. A33, 1626 (1986).

[13] R. K. Nesbet, *Variational Methods in Electron-Atom Scattering Theory* (Plenum, 1984).

[14] V. McKoy személyes közlése.

[15] J. Z. H. Zhang, S. -I. Chu, and W. H. Miller, J. Chem. Phys. 88, 6233 (1988).

[16] R. R. Lucchese, Phys. Rev. A 40, 6879 (1989).

[17] S. K. Adhikari, Chem. Phys. Letters 181,435 (1991); ibid 189, 340 (1992).

[18] J. R. Taylor, *Scattering Theory* (Wiley, 1972).

[19] H. V. von Geramb, *Microscopic Optical Potentials*, LNP 89 (Springer, 1979).

[20] R.G. Newton, J. Math. Phys. 3, 75 (1962); P.C. Sabatier, J. Math. Phys. **7**, 1515 (1966); K. Chadan, P. Sabatier, *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*, Text and Monographs in Physics (Springer, 1977).

[21] J. R. Cox and K. W. Thompson, J. Math. Phys. 11, 805 (1970); ibid. 11, 815 (1970).

[22] M. Münchow and W. Scheid, Phys. Rev. Lett. 44, 1299 (1980).

[23] B. Apagyi and G. Endrédi, Budapest Inversion Codes (BIC, BICPOL), unpublished (1994, 1996).

[24] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York 1972).

[25] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953) p. 556; J. Meixner and F. W. Schäfke, *Mathieusche Funktionen und Sphäroidfunktionen* (Springer-Verlag, Berlin, 1954).

[26] H. Voit, privát közés; H. Voit et al, Phys. Letters 67 B, 399 (1977).
[27] J. A. Kuehner et al, Phys. Letters 4, 332 (1965).
[28] W. L. Price, The Computer Journal 20, 367 (1977).
[29] R. Hooke und T. A. Jeeves, JACM 8, 212 (1961).
[30] D. R. James, N. R. Fletcher, Phys. Rev. C 17, 2248 (1978); U. Abbondanno, *A collection of data on resonances in heavy-ion reactions* (INFN/BE–91/11, Dec. 16, 1991) unpublished.
[31] R. Wolf and U. Mosel, Z. Phys. A 305, 179 (1982).
[32] C. E. Ordonez, R. J. Ledoux, and E. R. Cosman, Phys. Lett. B 173, 39 (1986).
[33] H. Becker, Diplomarbeit im Fachbereich Physik der Universität Hamburg, June 1995.
[34] D.R. Lun, L.J. Allen, and K. Amos, Phys.Rev. A 50, 4000 (1994).
[35] R.G. Newton, J. Math. Phys. 9, 2050 (1968).
[36] G. R. Satchler, Nuclear Reactions, *Direct Nuclear Reactions* (Clarendon, Oxford, 1983).
[37] H. Leeb, H. Huber, and H. Fiedeldey, Phys. Lett. B **344**, 18 (1995).
[38] G. R. Satchler, L.W. Owen, A. J. Elwyn, G.L. Morgan, and R. L. Watson, Nucl. Phys. **A112**, 1 (1968).
[39] H. R. Fiebig, H. Markum, A. Mihály, and R. M. Woloshyn, *Nucl. Phys.* B. (Proc. Suppl.) **63** A-C, 188 (1998); H. R. Fiebig, H. Markum, A. Mihály, and K. Rabitsch, *Nucl. Phys.* B. (Proc. Suppl.) **53**, 884 (1997); H. R. Fiebig, O. Linsuain, H. Markum, and K. Rabitsch, *Nucl. Phys.* B. (Proc. Suppl.) **473**, 695 (1996).
[40] M. Sander and H.V. von Geramb, *Phys. Rev.* C **56**, 1218 (1997).
[41] S. D. Protopopescu, M. Alston-Garnjost, A. Barbaro-Galtieri, S. M. Flatté, J. H. Friedman, T. A. Lasinski, G. R. Lynch, M. S. Rabin, and F. T. Solmitz, *Phys. Rev.* D **7**, 1279 (1973).
[42] S. Ishida, M. Ishida, T. Ishida, K. Takamatsu, and T. Tsuru, *Progr. of Theor. Physics,* **98**, 621 (1997).
[43] J. F. Williams, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **12**, 265 (1979).
[44] K. Amos, személyes közlés.
[45] G. Staszewska, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **22**, 913 (1989).
[46] T. F. O'Maley, L. Spruch, and L. Rosenberg, J. Math. Phys. **2**, 491 (1961); N. A. W. Holzwarth, J. Math. Phys. **14**, 191 (1973).
[47] G. B. Bachelet, D. R. Hamann, and M. Schlüter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982); B. Plenkiewicz, P. Plenkiewicz, P. Baillargeon, and J.-P. Jay-Gerin, Phys. Rev. A **36**, 2002 (1987).
[48] R.G. Lovas, Atomki Közlemények 14, 3, 161 (1972).
[49] G. J. Wozniak, D. P. Stahel, J. Cerny, and N. A. Jelly, Phys. Rev. C **14**, 815 (1976).
[50] C. Marty, in *Resonances in Heavy Ion Reactions,* LNP **156** ed. K. A. Eberhard (Springer, 1982), p. 216.
[51] J. R. Cox, J. Math. Phys. **5**, 1065 (1964); ibid **8**, 2327 (1967);**16**, 1410 (1975).
[52] H. Kohlhoff, M. Kükker, H. Freitag, and H. V. von Geramb, Phys. Scr. **48** 238 (1993).