

Forgó molekulák áthaladása apertúrán

Egy egyszerű kvantummechanikai modell

Dömötör Piroska

SZTE-TTIK Elméleti Fizikai Tanszék

Tanszéki szeminárium, Szeged, 2015. február 26.

・ロト ・ 日 ・ ・ 日 ・ ・ 日 ・ ・ つ へ ()

Bevezetés

A vizsgálandó kérdés

Belső struktúra hatása a szórásra?

A legenda

Hosszú gerendákat szállítanak a városba a Münster építéséhez.

A kocsikon keresztben fekvő faanyag nem fér át a városkapun ...

Szélesítsük a kaput?

vagy

Tanuljunk a fészeképítő verébtől?

Ulmer Spatz



Ulm városának jelképe.

Bevezetés	Klasszikus rotor	Kvantumos rotor	Analitikus	Green	Eredmények	Összegzés
Tartalo	m					

◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ □ ○ ○○○



- 2 Klasszikus rotor
- 3 Kvantumos rotor
- 4 Analitikus közelítés
- 5 A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel
- 6 Numerikusan egzakt eredmények

Øsszegzés



- Szimmetrikus 2D forgó molekula.
- Merev de irányítható belső struktúra.

Jellmezők: $M, \mathcal{M} := M \times (\kappa a)^2$.

• A tömegközéppont csak az apertúra szimmetriatengelye mentén mozoghat

$$\Rightarrow$$
 Két szabadsági fok: x és φ

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{p_\varphi^2}{2\mathcal{M}}$$



うして ふぼう ふほう ふほう しょう

Jellemző paraméterek:

 κ tömeg eloszlás a rotor mentén, c:=b/a apertúra méret per rotorhossz arány

Klasszikus rotor

Kényszerek



Geometriai kapcsolat a tömegközéppont x helye és a megengedett forgási szögek között, három jellemző esetben.

Honnan érződik az apertúra hatása?

Kritikus távolság
$$x_c:=\sqrt{a^2-b^2},~$$
és szög
$$\alpha_c:=\arctan\frac{b}{x_c}=\arctan\frac{b}{\sqrt{a^2-b^2}}$$



Az áthaladás és visszaverődés során elérhető szög

$$\begin{split} |\varphi| &\leq \alpha^{(t)}(x), \text{ ahol } \alpha^{(t)}(x) := \arctan \frac{b}{|x|}.\\ \frac{\pi}{2} - \varphi \Big| &\leq \alpha^{(r)}(x), \text{ ahol } \alpha^{(r)}(x) := \arcsin \frac{|x|}{a}. \end{split}$$







ð

500

tási régióban (c = 0.5 és $\kappa = 1$)



A kritikus szög
$$c := b/a$$
-val kifejezve:
 $\alpha_c = \arctan \frac{b}{\sqrt{a^2 - b^2}} = \arctan \frac{c}{\sqrt{1 - c^2}}.$



A klasszikus (geometriai) átmeneti valószínűség

Nem forgó rotorok egyenletes szögeloszlású sokaságát föltételezve

$$T^{\rm cl} = \frac{{\rm transzmissziót\ megengedő\ rotor\ hajlásszögek}}{{\rm \ddot{o}sszes\ lehetséges\ rotor\ hajlásszög}}$$

$$T^{\rm cl} = \frac{2\alpha_c}{\pi} = \frac{2}{\pi} \arctan\left[\frac{c}{\sqrt{1^2 - c^2}}\right]$$

Bevezetés	Klasszikus rotor	Kvantumos rotor	Analitikus	Green	Eredmények	Összegzés
Kvantu	imos rotor					

A rendszer $|\Psi_E
angle$ energiasajátállapotát a

$$\hat{H} \left| \Psi_E \right\rangle = E \left| \Psi_E \right\rangle$$

egyenlet határozza meg, amely koordináta reprezentációban

$$\left[\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + E\right]\Psi_E(x,\varphi) = 0.$$

Dimenziótlan változókat és mennyiségeket bevezetve:

$$s := \frac{x}{\kappa a}, \quad \varepsilon := E \left(\frac{\hbar^2}{2M(\kappa a)^2}\right)^{-1}$$

Energia sajátérték egyenlet

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right] \Psi_{\varepsilon}(s,\varphi) = \varepsilon \ \Psi_{\varepsilon}(s,\varphi). \quad + \text{ Peremfeltételek}$$

・ロッ ・雪 ・ ・ ヨ ・ ・ ヨ ・

200

э

Klasszikus forgási kényszerek mint kvantumos peremfeltételek



A $-s_c \le s \le s_c$ kölcsönhatási régióban a hullámfüggvénynek el kell tűnnie a geometriailag megengedett régió határán.

$$\Psi_{\varepsilon}^{(t)}(s,\varphi=\pm\alpha^{(t)}(s))=0, \quad \text{illetve} \quad \Psi_{\varepsilon}^{(r)}(s,\tilde{\varphi}=\pm\alpha^{(r)}(s))=0.$$

うして ふぼう ふほう ふほう しょう

A transzlációs és a rotációs szabadsági fokok a peremföltételek miatt összefonódnak.

Ansatz

а

A megoldást az alábbi alakban keressük

$$\Psi_{\varepsilon}(s,\varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(s) \ \chi_n\left[\varphi,\alpha(s)\right],$$

hol $\chi_n\left[\varphi,\alpha(s)\right] := \frac{1}{\sqrt{\alpha(s)}} \sin\left[\frac{n\pi\left(\varphi + \alpha(s)\right)}{2\alpha(s)}\right] \ (n = 1, 2, \cdots)$

Tehát a forgást leíró $\chi_n \left[\varphi, \alpha(s) \right]$ dobozba zárt részecske hullámfüggvények követik a doboz méretének $\alpha(s)$ -el jellemzett változását.

Behelyettesítünk az energia-sajátérték egyenletbe

Kvantumos rotor

Általános egyenlet a módusokra

$$\sum_{m=1}^{\infty} \left[\delta_{nm} \left(\frac{d^2}{ds^2} + \varepsilon - \left(\frac{n\pi}{2\alpha(s)} \right)^2 \right) + 2A_{nm} \left(\frac{\alpha'(s)}{\alpha(s)} \right) \frac{d}{ds} - B_{nm} \left(\frac{\alpha'(s)}{\alpha(s)} \right)^2 + A_{nm} \left(\frac{\alpha''(s)}{\alpha(s)} \right) \right] \psi_m(s) = 0.$$

$$\begin{split} A_{nm} &:= \begin{cases} 0 & \text{ha} \quad n = m, \\ \left[1 + (-1)^{n+m} \right] \frac{nm}{(n^2 - m^2)} & \text{ha} \quad n \neq m. \end{cases} \\ B_{nm} &:= \begin{cases} \left(\frac{1}{4} + \frac{\pi^2 n^2}{12} \right) & \text{ha} \quad n = m, \\ \left[1 + (-1)^{n+m} \right] \frac{nm \left(3n^2 + m^2 \right)}{(n^2 - m^2)^2} & \text{ha} \quad n \neq m. \end{cases} \end{split}$$

▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ▲□ ● ● ●

A módusokat szétcsatoló közelítés

Nem túl gyorsan változó $\alpha(s)$ függvényre elhanyagolhatjuk az $\alpha(s)$ deriváltjait is tartalmazó tagokat, így megszüntetjük a csatolást.

A függetlenül terjedő transzlációs módusokra vonatkozó egyenlet:

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \varepsilon - n^2 v^{(j)}(s)\right] \psi_n^{(j)}(s) = 0, \qquad j = t, r; \quad n = 1, 2, \cdots$$

Effektív potenciál a visszaverődő és az áthaladó részecskékre:

$$v^{(r)}(s) := \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 [\alpha^{(r)}(s)]^{-2} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 [\arcsin|\kappa s|]^{-2},$$
$$v^{(t)}(s) := \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 [\alpha^{(t)}(s)]^{-2} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left[\arctan\left(\frac{c}{\kappa|s|}\right)\right]^{-2}.$$

▲□▶ ▲圖▶ ▲臣▶ ▲臣▶ 三臣 - のへの

Az effektív potenciálok jellemzése



▲ロト ▲園ト ▲画ト ▲画ト 三直 - のへで

Oszcillátor potenciál illesztése

Az apertúra közepétől távolabb lineárisan közelítjük az $\arctan f$ üggvényt:

$$v^{(t)}(s) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left[\arctan\left(\frac{c}{\kappa|s|}\right)\right]^{-2} \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(\frac{\kappa}{c}\right)^2 s^2$$



A $v^{(t)}(s)$ effektív potenciál (szaggatott piros) és az őt közelítő $v_{osc}(s)$ oszcillátor potenciál (folytonos kék) (c = 0.5 és $\kappa = 1$)

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □



Transzverzális módusok

$$\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{i2m\varphi}$$

$$\varepsilon = k_m^2 + 4m^2$$

Szabad régió: nem forgó bemenet

$$\begin{split} \Psi_{\varepsilon}^{(I)}(s,\varphi) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{0m} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m s} + \mathbf{r_m} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_m s} \right] \phi_m(\varphi). \\ \Psi_{\varepsilon}^{(III)}(s,\varphi) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\mathbf{t_m} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m s} \right] \phi_m(\varphi). \end{split}$$

596





Kölcsönhatási régió

$$\Psi_{\varepsilon}^{(II)}(s,\varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n f_n(s) + b_n g_n(s) \right] \ \chi_n[\varphi,\alpha(s)].$$

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \varepsilon - n^2 v_{\rm osc}(s)\right] \psi_n(s) = 0 \implies 2 \text{ lin független mo. } f_n(s) \text{ és } g_n(s)$$



Haladó módusok száma:
$$2m_0+1$$

$$m_0 := \lfloor \sqrt{\varepsilon}/2 \rfloor$$

Transzmisszió és reflexió

$$T(\varepsilon) = \frac{1}{k_0} \sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |\mathbf{t_m}|^2, \quad R(\varepsilon) = \frac{1}{k_0} \sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |\mathbf{r_m}|^2.$$

A megoldások $s = \pm s_c$ határokon való illesztéséből t_m és r_m meghatározható (lineáris egyenlet rendszer).

reen Eredr

Összegzés

Analitikus közelítés

Az effektív oszcillátor potenciál és a transzmisszió kapcsolata

$$v_{\rm osc}(s) = v_0 + (v_c - v_0) \left(\frac{s}{s_c}\right)^2 \equiv 1 + \frac{1}{2}\omega_{osc}^2 s^2$$

A fiktív oszcillátor sajátenergiái:

$$\varepsilon_n = v_0 + \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_{osc}$$



 $\begin{array}{c} (c=0.4) \\ (\kappa=1) \end{array}$

bac





A transzmisszió energiafüggése nagyobb energia tartományt nézve, különböző c apertúra méret per rotorhossz arány esetén. ($\kappa = 1$)

A szaggatott görbe az alább bemutatandó egzakt számolás eredménye.

Bevezetés Klasszikus rotor Kvantumos rotor Analitikus Green Eredmények Összegzés A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel



A kölcsönhatási régiótól távol

$$\begin{split} \Psi_{\varepsilon}^{L}(s,\varphi) &= \sum_{m=-m_{0}}^{m_{0}} \left[c_{m} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{m}s} + \mathbf{r_{m}} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_{m}s} \right] \phi_{m}(\varphi). \\ \Psi_{\varepsilon}^{R}(s,\varphi) &= \sum_{m=-m_{0}}^{m_{0}} \left[\mathbf{t_{m}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{m}s} \right] \phi_{m}(\varphi). \end{split}$$

200

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

S mátrix

A szórási probléma megoldása tetszőleges bejövő hullámra. A lineáris kapcsolat meghatározása a c_m bejövő és az r_m ill. t_m kimenő amplitúdók között.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r_m} &= \sum_{n=-m_0}^{m_0} S_{mn}^{LL} \, \boldsymbol{c_n}, \quad \text{ és } \quad \boldsymbol{t_m} = \sum_{n=-m_0}^{m_0} S_{mn}^{RL} \, \boldsymbol{c_n}. \\ & \left[\begin{array}{c} \mathbf{S}^{LL} & \mathbf{S}^{LR} \\ \hline \mathbf{S}^{RL} & \mathbf{S}^{RR} \end{array} \right] \, \left[\begin{array}{c} \mathbf{c} \\ \hline \mathbf{0} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \mathbf{r} \\ \mathbf{t} \end{array} \right], \end{aligned}$$

Transzmisszió és reflexió

$$T(\varepsilon) = \frac{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |t_m|^2}{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |c_m|^2}; \qquad R(\varepsilon) = \frac{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |r_m|^2}{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |c_m|^2}$$

ヘロト ヘヨト ヘヨト

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

Az S mátrixot a Green-függvény segítségével határozzuk meg.

Green-függvény definíciója

Green függvény koordináta reprezentációban:

$$\left[\varepsilon + \mathrm{i}\eta + \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right] G_{\varepsilon}(s,\varphi;s',\varphi') = \delta(s-s')\delta(\varphi-\varphi').$$

Absztrakt operátor egyenlet

$$\left[(\varepsilon + i\eta)\mathbf{1} - \mathbf{H}\right]\mathbf{G}(\varepsilon) = \mathbf{1}$$

Ahol, az infinitezimális $\eta \longrightarrow 0^+$ biztosítja, hogy a retardált Greenfüggvényeket kapjuk.

Diszkrét rács reprezentációban tehát a $[(\varepsilon+{\rm i}\eta){\bf 1}-{\bf H}]$ végtelen mátrix inverzét kellene kiszámolnunk.







H. Feshbach, "Unified theory of nuclear reactions," Annals of Physics, vol. 5, no. 4, pp. 357 - 390, 1958.

H. Feshbach, "A unified theory of nuclear reactions. ii," Annals of Physics, vol. 19, no. 2, pp. 287 - 313, 1962.

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

Green-függvényből hullámfüggvény és S mátrix

A hullámfüggvény a ${\cal B}$ Dobozban a probléma Green-függvényének ismeretében egzaktul kiszámítható:

$$\langle s, \phi_n \mid \Psi \rangle = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \langle s, \phi_n \mid \mathbf{G}(\varepsilon) \mid \mathcal{B}_L, \phi_m \rangle \ \text{2i}k_m \ c_m, \quad \text{abol } s \in \mathcal{B}.$$

Innen adódik az S mátrix és $\mathbf{G}(\varepsilon)$ kapcsolatát leíró un. Fisher-Lee reláció:

$$S_{nm}^{qp} = -\delta_{qp}\delta_{nm} + i2k_m \left\langle \mathcal{B}_q, \phi_n \right| \mathbf{G}(\varepsilon) \left| \mathcal{B}_p, \phi_m \right\rangle \,, \quad p, q \in \{L, R\}.$$

Következmény:

Csak a Dobozban kell meghatároznunk ${f G}(arepsilon)$ -t

De nem az izolált Doboz Green-függvénye kell, hanem az egész probléma Green-függvényéből a Dobozra vonatkozó rész.

・ロト ・ ア・ ・ マト・ ママト・ マ

200

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

Green-függvényből hullámfüggvény és S mátrix

A hullámfüggvény a ${\cal B}$ Dobozban a probléma Green-függvényének ismeretében egzaktul kiszámítható:

$$\langle s, \phi_n \mid \Psi \rangle = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \langle s, \phi_n \mid \mathbf{G}(\varepsilon) \mid \mathcal{B}_L, \phi_m \rangle \ \text{2i}k_m \ c_m, \quad \text{abol } s \in \mathcal{B}.$$

Innen adódik az S mátrix és $\mathbf{G}(\varepsilon)$ kapcsolatát leíró un. Fisher-Lee reláció:

$$S_{nm}^{qp} = -\delta_{qp}\delta_{nm} + i2k_m \left\langle \mathcal{B}_q, \phi_n \right| \mathbf{G}(\varepsilon) \left| \mathcal{B}_p, \phi_m \right\rangle \,, \quad p, q \in \{L, R\}.$$

Következmény:

Csak a Dobozban kell meghatároznunk $\mathbf{G}(arepsilon)$ -t

De nem az izolált Doboz Green-függvénye kell, hanem <mark>az egész probléma</mark> Green-függvényéből a Dobozra vonatkozó rész.

Bevezetés Klasszikus rotor Kvantumos rotor Analitikus Green Eredmények Összegzés A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

Az operátorok "Bal drót + Doboz + Jobb drót" particionálása:

$$[(\varepsilon + i\eta)\mathbf{1} - \mathbf{H}] = \begin{bmatrix} (\varepsilon + i\eta)\mathbf{1} - \mathbf{H}^{LL} & (\boldsymbol{\tau}^{L})^{\dagger} & \mathbf{0} \\ \hline \boldsymbol{\tau}^{L} & \varepsilon\mathbf{1} - \mathbf{H}^{BB} & \boldsymbol{\tau}^{R} \\ \hline \mathbf{0} & (\boldsymbol{\tau}^{R})^{\dagger} & (\varepsilon + i\eta)\mathbf{1} - \mathbf{H}^{RR} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{LL} & \mathbf{G}^{LB} & \mathbf{G}^{LR} \\ \hline \mathbf{G}^{BL} & \mathbf{G}^{BB} & \mathbf{G}^{BR} \\ \hline \mathbf{G}^{RL} & \mathbf{G}^{RB} & \mathbf{G}^{RR} \end{bmatrix}$$

 $[(\varepsilon + i\eta)\mathbf{1} - \mathbf{H}] \mathbf{G}(\varepsilon) = \mathbf{1} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{G}^{BB}$ formálisan kifejezhető

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

A dobozra megszorított Green-függvény

"Bal drót + Doboz + Jobb drót" módon particionálva a Dobozra megszorított Green-függvény:

$$\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon) = \left[\varepsilon \mathbf{1} - \mathbf{H}^{BB} - \mathbf{\Sigma}(\varepsilon)\right]^{-1}$$

A félvégtelen drótok hatását a ${f \Sigma}(arepsilon)$ nem-hermitikus korrekció tartalmazza.

Az $\mathbf{\Sigma} := \mathbf{\Sigma}^L + \mathbf{\Sigma}^R$ korrekció diszkrét rácson kiszámítható:

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\mathcal{D}} := \boldsymbol{\tau}^{\mathcal{D}} \ \mathbf{g}^{\mathcal{D}} \ (\boldsymbol{\tau}^{\mathcal{D}})^{\dagger}, \qquad \mathcal{D} \in \{L, R\},$$

ahol $\tau^{\mathcal{D}}$ tartalmazza a drótok és a Doboz csatolását, $\mathbf{g}^{\mathcal{D}}$ pedig a félvégtelen drótok analitikusan kiszámítható Green-függvénye.

🍉 S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems.

Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering, Cambridge: Cambridge University Press, 1995.

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

Diszkrét rácson

"Bal drót + Doboz + Jobb drót" módon particionálva



"Első szomszéd" csatolás a félvégtelen drótok és a Doboz közt:

$$\boldsymbol{\tau}^{L} = \frac{1}{\Delta s^{2}} \sum_{i \in L} |B_{Li}\rangle \langle p_{Li}|, \qquad \boldsymbol{\tau}^{R} = \frac{1}{\Delta s^{2}} \sum_{i \in R} |B_{Ri}\rangle \langle p_{Ri}|.$$

A korrekció nem eltűnő mátrixelemei: $\mathcal{D} \in \{L, R\}$

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\mathcal{D}}[B_{\mathcal{D}i}, B_{\mathcal{D}j}] = \frac{1}{\Delta s^4} g^{\mathcal{D}}[p_{\mathcal{D}i}, p_{\mathcal{D}j}]$$

A releváns fizikai tulajdonságok és a Green-függvény

Élettartam

A Doboz formális sajátértékproblémája:

$$\left[\mathbf{H}^{BB} + \boldsymbol{\Sigma}(\varepsilon)\right] \left| \Psi^B_{\mu} \right\rangle = \varepsilon_{\mu} \left| \Psi^B_{\mu} \right\rangle$$



A releváns fizikai tulajdonságok és a Green-függvény

Spektrális függvény

$$\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) \equiv \mathbf{i}[\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon) - (\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon))^{\dagger}] = -2 \operatorname{Im} \left[\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon)\right].$$

A Green-függvény sajátfüggvények szerinti formális kifejtése alapján

$$\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) = \sum_{\mu} \left| \Psi^{B}_{\mu} \right\rangle \! \left\langle \Psi^{B}_{\mu} \right| \frac{\gamma_{\mu}}{\left(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_{\mu}\right)^{2} + \left(\gamma_{\mu}/2\right)^{2}}$$

Állapotsűrűség (DOS)

A rendszer energia spektrumát jellemző mennyiség

$$\mathcal{N}(\varepsilon) \equiv \frac{1}{2\pi} \operatorname{Tr} \left[\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) \right] = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{B}} d\mathbf{r} \, \left\langle \mathbf{r} \right| \mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) \left| \mathbf{r} \right\rangle.$$

 $\mathcal{N}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \sum_{\mu} \frac{\gamma_{\mu}/2}{\left(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_{\mu}\right)^2 + \left(\gamma_{\mu}/2\right)^2} \xrightarrow[\gamma_{\mu} \to 0]{} \sum_{\mu} \delta\left(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_{\mu}\right).$

Green

Eredmények

Összegzés

Numerikusan egzakt eredmények

A DOS elemzése, hamis rezonancia lehetőségek kiszűrése.

Mely energiákon számíthatunk rezonanciára?

Nagy élettartamú állapotok?

A Kölcsönhatási régióra jellemző rezonanciákat kiszűrhetjük a Doboz arrébb csúsztatásával



イロト スポト イヨト イヨト

э

200

Green

Eredmények

Összegzés

Numerikusan egzakt eredmények

A transzmisszió energiafüggése "nem forgó" bejövő hullám esetén

A DOS $(\mathcal{N}(\varepsilon))$ mutatja meg, hogy mely energiákon számíthatunk rezonanciára.





A transzmisszió energiafüggése $\Psi_0^{\text{even}}(s,\varphi) = e^{ik_0s}\phi_0(\varphi)$, "nem forgó" bejövő hullám esetén, összevetve az analitikus közelítésből számolt eredménnyel. (c = 0, 5)

Green

Eredmények

Összegzés

Numerikusan egzakt eredmények

A transzmisszió energiafüggése "nem forgó" bejövő hullám esetén

dobozban kialaku-Α ló hullámfüggvény rezonáns energiákon





Green

Eredmények

Összegzés

Numerikusan egzakt eredmények

A transzmisszió energiafüggése "ellentétesen forgó" bemenet esetén

A DOS $(\mathcal{N}(\varepsilon))$ mutatja meg, hogy mely energiákon számíthatunk rezonanciára.

$$\phi_{\pm 1}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{\pm i2\varphi}$$



"páratlan" bejövő hullám esetén. (c = 0, 5)



Kétdimenziós belső struktúrával rendelkező részecske modell (merev forgás) résen való szóródását vizsgáltuk kétféle módszerrel.

- Analitikus közelítés segítségével (nem forgó bemenet) a transzlációra vonatkozó effektív potenciálokat vezettünk be.
- Green-függvényes módszerrel egzakt numerikus megoldást adtunk a szórási problémára.
- Igazoltuk, hogy a közelítéseket tartalmazó analitikus megoldás alacsony energiákon jól egyezik az egzakt megoldással.

うして ふぼう ふほう ふほう しょう

Összegzés

Megjelent cikkek

New Journal of Physics > Volume 17 > January 2015

Bruce W Shore et al 2015 New J. Phys. 17 013046 doi:10.1088/1367-2630/17/1/013046

Scattering of a particle with internal structure from a single slit

OPEN ACCESS

Bruce W Shore¹, Piroska Dömötör², Emerson Sadurni³, Georg Süssmann⁴ and Wolfgang P Schleich⁵

New Journal of Physics > Volume 17 > February 2015

Piroska Dömötör et al 2015 New J. Phys. 17 023044 doi:10.1088/1367-2630/17/2/023044

Scattering of a particle with internal structure from a single slit: exact numerical solutions

OPEN ACCESS

Piroska Dömötör^{1,5}, Péter Földi¹, Mihály G Benedict¹, Bruce W Shore² and Wolfgang P Schleich^{3,4}



B. W. Shore, P. Dömötör, E. Sadurní, G. Süssmann, and W. P. Schleich, *New Journal of Physics*, vol. 17, no. 1, p. 013046, 2015.



P. Dömötör, P. Földi, M. G. Benedict, B. W. Shore, and W. P. Schleich, *New Journal of Physics*, vol. 17, no. 2, p. 023044, 2015.



Köszönöm a figyelmet!

Munkánkat az OTKA támogatta T81364 témaszám alatt.

▲□▶ ▲圖▶ ▲臣▶ ★臣▶ = 臣 = の��