

Szuperszimmetria és a Morse
oszillátor koherens állapotai,
valamint alkalmazásuk
molekulák fotodisszociációjára

Molnár Balázs



Témavezető: Dr. Benedict Mihály

Elméleti Fizikai Tanszék

Szegedi Tudományegyetem

2002

1 Előzmények és tudományos célkitűzések

Előzmények

Az egydimenziós Morse potenciál a nem-lineáris rezgések fizikájának hasznos modellje. Segítségével valós fizikai problémák egész sorát írhatjuk le analitikus módon. A Morse potenciál legismertebb alkalmazási területe az atomi és molekulafizika. P. M. Morse úttörő jelentőségű cikkében [1] kimutatta, hogy nem-forgó kétatomos molekulák atomjai közötti kölcsönhatás kielégítően közelíthető az azóta róla elnevezett potenciális-energia függvénnyel. A Morse potenciált más rendszerek, pl. atomok és molekulák szilárdtestfelületekkel való kölcsönhatásának leírására is használták [2]. A hetvenes évek óta, amikor felfedezték annak lehetőségét, hogy molekulák infravörös lézerekkel kiváltott többfotonos folyamatok nyomán disszociálhatnak [3], a Morse oszcillátort megújult érdeklődés övezi. A lézer kontrollált kvantumkémia szintén gyakran használja a Morse potenciált bizonyos elektronállapotokhoz tartozó rezgési potenciálok közelítésére. Az anharmonikus oszcillátort, amelyet dipólmomentum kapcsol külső klasszikus elektromágneses terekhez, többen tanulmányozták kétatomos molekulák infravörös lézerrel történő gerjesztéseinek és fotodisszociációjának leírására [4-7]. Born-Oppenheimer közelítésben infravörös terek esetén az elektronátmenetek elhanyagolhatók, és a kényszerített Morse oszcillátor adekvát meg-

közelítést jelent a kétatomos molekulák számára. Ha az elektronátmenetekkel is foglalkozni kívánunk, akkor egyszerre több vibrációs potenciált kell figyelembe vennünk.

Időfüggő rendszerek, amilyen a kényszerített Morse oszcillátor is, elvileg kezelhetők a kvantummechanikában a stacionárius állapotokon történő kifejtésen keresztül. Azonban, ha a spektrum egy része a folytonos tartományba esik, ez a módszer nem elég kényelmes. Ezért egyéb, más módszereket dolgoztak ki, amelyeknek egy széleskörű áttekintését találjuk Kosloff cikkében [8]. Ezek nagyrészt koordináta reprezentációt vesznek alapul, valamint az időfüggő Schrödinger egyenletet az ún. "split-operátor" módszerrel oldják meg, minden egyes időpillanatban a koordináta és impulzus reprezentációt váltakozva használva.

Tudományos célkitűzések

Elsősorban abból indultunk ki, hogy a koordináta reprezentáció helyett egy alkalmasabb algebrai megközelítés segítségével mélyebb betekintést nyerhetünk a molekula vibrációk problémájába, amely a dinamikai egyenlet kezelését is megkönnyítheti. Egy a harmonikus oszcillátor léptető operátoros módszeréhez hasonló technika hasznos lehet az anharmonikus Morse oszcillátor esetében is. Ezek nyomán dolgozatunk célkitűzése, hogy részletes matematikai analízisét adjuk a Morse oszcillátornak, és tárgyaljuk

annak meghatározó csoportelméleti és algebrai struktúráit. A Morse potenciál csak véges számú kötött állapottal rendelkezik, amelyek nem alkotnak teljes rendszert a kvantummechanikai állapotok Hilbert-terében. A rendszer teljes leírása nem lehetséges csupán ezen állapotokra szorítkozva. Nyilvánvalóan a spektrum folytonos részét is figyelembe kell vennünk. Ezért vagy a nem-normálható (általánosított) sajátállapotokkal kell dolgoznunk, vagy más normálható állapotok egy teljes rendszerét kell bevezetnünk. Ez utóbbi módszer ára, hogy új bázisállapotaink nem energia-sajátállapotok többé. Úgy gondolhatjuk azonban, hogy található olyan megfelelő bázis, ahol a Hamilton operátor egészen egyszerű alakot ölt, amely noha nem diagonális, de közel lehet hozzá (pl. végtelen tridiagonális mátrix). A dolgozatban a szuperszimmetrikus kvantummechanika (a megfelelő angol rövidítést használva SUSY QM) operátoros technikája segítségével, új teljes ortonormált bázisok egy egész osztályát fogjuk bevezetni, amelyek mindegyike az anharmonikus rendszer teljes kvantummechanikai leírását adja.

Egy másik motiváló tényező volt, hogy a harmonikus oszcillátor koherens állapotai jelentős szerepet játszanak a kvantummechanikában. Ezek olyan folytonosan indexelt túlteljes állapotrendszert alkotnak, amelyek szerfelett hasznos eszközt jelentenek a kvantumoptikában és a lézerfizikában. Más, nem harmonikus potenciálokhoz tartozó, hasonló tulajdonságú állapotrendszerek kutatását hosszú ideje jelentős érdeklődés kíséri. A je-

len munkában a szuperszimmetrikus kvantummechanika technikáját alapul véve a Morse oszcillátor koherens állapotai számára kívánunk algebrai konstrukciót bemutatni. Amint azt látni fogjuk, a Morse potenciál esetén is megadható egy olyan előállítás, ami hasonlatos ahhoz, amelyet Glauber [9] és Klauder [10] talált a harmonikus oszcillátor koherens állapotaira.

A harmonikus oszcillátor koherens állapotainak kapcsolata jól ismert a Heisenberg-Weyl csoporttal. Ez a csoportelméleti kapcsolat motiválja, hogy azonosítsuk azt a struktúrát, amely hasonló szerepet tölthet be a Morse potenciál esetében mint a Heisenberg-Weyl csoport a harmonikus oszcillátor számára. A dolgozatból kiderül, hogy ez a csoport lényegében a valós számegyenes affin csoportja, illetve annak bizonyos további kiterjesztései.

Az elméleti apparátus kidolgozása után eredményeinket alkalmazni kívánjuk egy valóságos kétatomos molekula (nitrogén-monoxid) infravörös abszorpciós folyamatainak tanulmányozására. Az általunk javasolt módszer lehetővé teszi, hogy a dinamika analitikus leírásában sokkal tovább jussunk mint az korábban lehetséges volt.

2 Vizsgálati módszerek

A dolgozatban használt megközelítésünk matematikai alapja lényegében az elmúlt 20 évben kifejlesztett operátoros technika, az ún. szuperszimmetrikus kvantummechanika módszere [11]. Ez az eljárás, amely a harmonikus oszcillátor léptető operátoros tárgyalásának általánosítása, elegáns és hasznos algebrai eszközt szolgáltat, hogy megtaláljuk olyan Hamilton operátorok sajátállapotait, amelyek a Morse potenciált is tartalmazó, egydimenziós alakinvariáns potenciálok osztályába tartoznak [12].

Ezt a technikát fejlesztjük tovább, hogy leírjuk a kötött állapotok által kifizített altér ortogonális komplementerét is. Dolgozatunk szempontjából kulcsfontosságú észrevétel, hogy a Morse potenciál szuperszimmetrikus léptető operátorai az identitás operátorral zárt Lie algebrát alkotnak a kommutátor műveletére nézve. Ez utóbbi algebra az affin csoport centrális kiterjesztésének Lie algebrájával izomorf. Munkánk során szükségesnek bizonyul ezen algebra egy további bővítését is figyelembe venni. A tény, hogy az alapvető operátorok (koordináta, impulzus, Hamilton operátor) az affin algebra ez utóbbi kiterjesztéséhez tartozó operátor gyűrűben értelmezettek, lehetővé teszi, hogy a fizikai szempontból érdekes mátrixelemeket meghatározassuk a dolgozatban általunk bevezetésre kerülő bázisok osztályára.

3 Új tudományos eredmények

1. A kötött állapotok nem teljes rendszere, valamint a nem normálható szórt energia-sajátállapotok helyett teljes ortonormált rendszerek új – általunk Morse-Laguerre bázisoknak nevezett – osztályát vezettük be. Ezen osztály elemeit a szuperszimmetrikus keltő operátorral konstruáltuk az alapállapotból. Meghatároztuk a Morse potenciál Hamilton operátorának mátrixát a bázisok mindegyikében, és ezek tridiagonálisnak adódtak.
2. A Morse-Laguerre osztály egy elemének segítségével, amelyet pszeudoszámállapotoknak nevezünk, koherens állapotok algebrai konstrukcióját adtuk a harmonikus oszcillátorral szoros analógiában. Ezek az állapotok túlteljesek és folytonosan indexeltek. Megadtunk egy unitér eltolási operátort is, amely a koherens állapotokat állítja elő az alapállapotból, amely maga is koherens. Koordináta reprezentációban a koherens állapoti hullámfüggvények abszolútérték négyzetei az alapállapoténak eltoltjai.
3. A szuperszimmetrikus keltő és eltűnető operátorok az identikus operátorral együtt az affin csoport centrális kiterjesztésével azonos algebrát feszítenek ki. A Morse potenciál koherens állapotait a probléma Hilbert-terén az affin csoport unitér reprezentációjának elemei generálják az alapállapotból.
4. A Morse potenciál koherens állapotai minimalizálják az affin Lie algebra

generátoraihoz tartozó határozatlansági relációt.

5. A kvázi-számállapotok bázisán, amely szintén a Morse-Laguerre bázisokhoz tartozik, a Hamilton operátor két tridiagonális blokkra bontható. Az első blokk véges dimenziós és a megfelelő invariáns altér pontosan a kötött állapotok alterével esik egybe. A második blokk végtelen dimenziós és a megfelelő altér a kötött állapoti altér ortogonális komplementere.

6. NO (nitrogén-monoxid) molekula esetén, mások ab initio számításait felhasználva, a dipólmomentumot, amely függ az atommagok közötti távolságtól, olyan függvénnyel közelítettük, amely lehetővé tette, hogy mátrix-elemeit analitikusan számolhassuk a Morse-Laguerre bázisokon.

7. A kvázi-számállapotok bázisán, a kényszerített Morse oszcillátor modellt külső térrel gerjesztett NO molekulára alkalmazva, a Schrödinger egyenlet közönséges differenciálegyenletek csatolt rendszereként írható. Ez lehetővé teszi, hogy az egyenleteket standard, nagy pontosságú numerikus módszerekkel oldhassuk meg. Megfelelően választott csörpölt lézerpulzusok sorozatával jelentős disszociációs valószínűséget kaptunk az alapállapotból indulva.

Közlemények

Saját eredményeinket az alábbi közleményekben publikáltuk:

M. G. Benedict and B. Molnár, *Phys. Rev. A* **60** (1999) R1737

B. Molnár, M. G. Benedict and J. Bertrand, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34**,
(2000) 3139

B. Molnár, M. G. Benedict and P. Földi, *Fortsch. Phys.* **49** (2001) 1053

B. Molnár, M. G. Benedict, P. Földi and F. Bartha, preprint quant-
ph/0202069 (2002)

Egyéb közlemény, amely dolgozatban ismertetett eredményekre épül:

P. Földi, A. Czirják, B. Molnár and M. G. Benedict, *Opt. Express* **10**
(2002) 376

Irodalomjegyzék

- [1] P. M. Morse, *Phys. Rev.* **34** (1929) 57
- [2] J. E. Lennard-Jones and C. Strachan, *Proc. Roy. Soc. A* **150** (1935) 442
- [3] N. R. Isenor and M. C. Richardson, *Appl. Phys. Lett.* **18** (1971) 224
- [4] J. Juh-Lian Ting, *J. Phys. B* **27** (1994) 1249
- [5] J.-M. Yuan and W.-K. Liu, *Phys. Rev. A* **57** (1998) 1992
- [6] S. Chelkowski and A. D. Bandaruk, *Phys. Rev. A* **41** (1990) 6480
- [7] S. Chelkowski and N. Gibson, *Phys. Rev. A* **52** (1995) R3417
- [8] R. Kosloff, *J. Phys. Chem.* **92** (1998) 1992
- [9] R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **130** (1963) 2529, R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **131** (1963) 2766
- [10] J. R. Klauder and B.-S. Skagerstam, *Coherent States* (World Scientific, Singapore 1985)
- [11] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, *Phys. Rep.* **251** (1995) 268
- [12] L. Gendenstein, *JETP Lett.* **38** (1983) 356

Társszerzői nyilatkozat

Molnár Balázs téziseit ismerem, azokat a jelölt önálló kutatási munkával elért tudományos eredményeinek tekintem. Ezért nem használom, és nem fogom használni tudományos minősítés szerzése céljából.

Szeged, 2002. június 28.

Dr. Benedict Mihály, egyetemi docens

Szegedi Tudományegyetem

Dr. Bartha Ferenc, egyetemi adjunktus

Szegedi Tudományegyetem

Földi Péter, doktorandusz

Szegedi Tudományegyetem