Kvantumos rotor áthaladása apertúrán

Dr. Dömötör Piroska

SZE GIVK Fizika és Kémia Tanszék Szemináriuma

Győr, 2023. november 21.

Tartalom

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.

A rotor modell

- 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

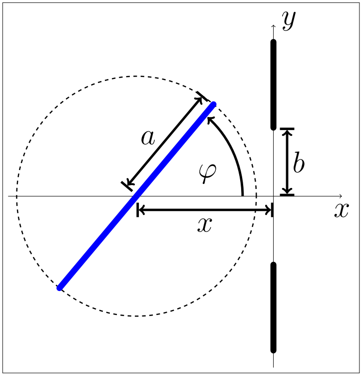
  $\Rightarrow$ Két szabadsági fok: x és φ

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

Jellemző paraméterek:

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

A szimmetrikus rotor

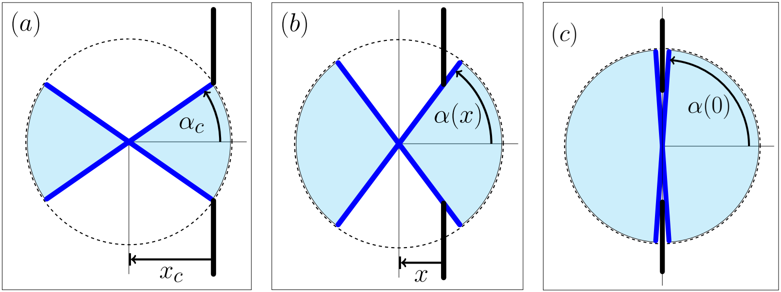


A rotor modell – a forgási és haladó szabadsági fokok összefonódása

Geometriai kényszerek

Kritikus távolság és szög: x_c és α_c

Az elérhető forgásszög függ a TKP koordinátától: $\alpha(x)$



Klasszikus (geometriai) átmeneti valószínűség:

Nem forgó rotorok egyenletes szögeloszlású sokaságát föltételezve

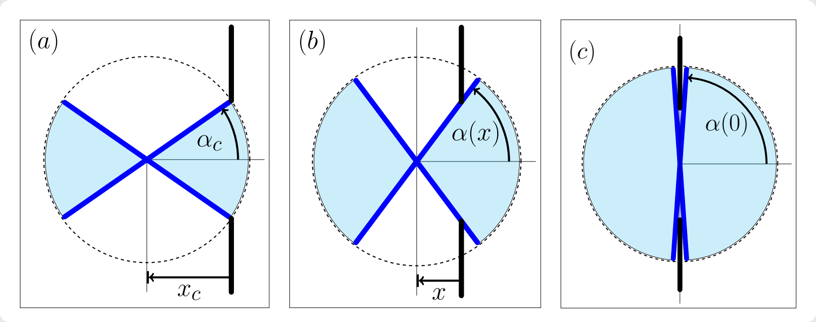
$$T^{\mathrm{cl}} = \frac{\text{transzmissziót megengedő rotor hajlásszögek}}{\text{összes lehetséges rotor hajlásszög}}.$$

A rotor modell – a forgási és haladó szabadsági fokok összefonódása

Geometriai kényszerek

Kritikus távolság és szög: x_c és α_c

Az elérhető forgásszög függ a TKP koordinátától: $\alpha(x)$



Klasszikus (geometriai) átmeneti valószínűség:

Nem forgó rotorok egyenletes szögeloszlású sokaságát föltételezve

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

Kvantumos szórási probléma

A rendszer $|\Psi_E\rangle$ energiasajátállapotát a

$$\hat{H}\,|\Psi_E\rangle = E\,|\Psi_E\rangle$$

egyenlet határozza meg, amely koordináta reprezentációban

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

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

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

Kvantumos szórási probléma

Az energiasajátérték egyenlet dimenziótlan változókkal

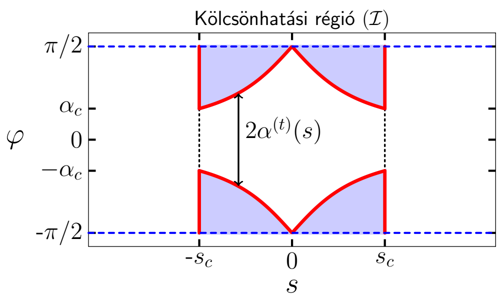
$$\hat{H}\,|\Psi_E\rangle = E\,|\Psi_E\rangle \quad \Rightarrow \quad -\left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]\Psi_\varepsilon(s,\varphi) = \varepsilon\ \Psi_\varepsilon(s,\varphi).$$

+ Peremfeltételek

A $-s_c \leq s \leq s_c$ kölcsönhatási régió-ban a hullámfüggvénynek el kell tűnnie a geometriailag megengedett régió határán és azon kívül.

(Lásd piros vonal)

$$\alpha(s) := \arctan\frac{c}{\kappa|s|}$$



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

Analitikus közelítés

A kvantummechanikai állapot a kölcsönhatási régióban — Ansatz

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

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

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

Effektív egydimenziós egyenlet a haladó módusokra

Az $\alpha(s)$ deriváltjait elhagyjuk $\Rightarrow$ a transzlációs módusok szétcsatolódnak.

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

Ahol $v(s)$ az $\alpha(s)$-től függő effektív potenciál.

Analitikus közelítés

Effektív potenciál az áthaladó részecskékre

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

Illesztett fiktív oszcillátor potenciál

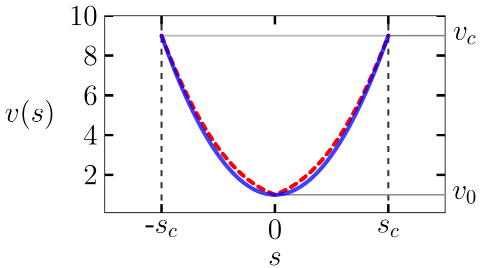
Az $\arctan$ függvényt lineárisan közelítve:

$$v(s) \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(\frac{\kappa}{c}\right)^2 s^2.$$

A másodfokú kifejezést illesztve:

$$v_{\mathrm{osc}}(s) = v_0 + \frac{1}{2}\underbrace{\left[\frac{2(v_c - v_0)}{s_c^2}\right]}_{\omega_{\mathrm{osc}}^2} s^2$$

Paraméterek: $c = 0.5, \ \kappa = 1.$



$v^{(t)}(s)$ effektív potenciál (szaggatott piros)

$v_{osc}(s)$ oszcillátor potenciál (folytonos kék)

Analitikus közelítés

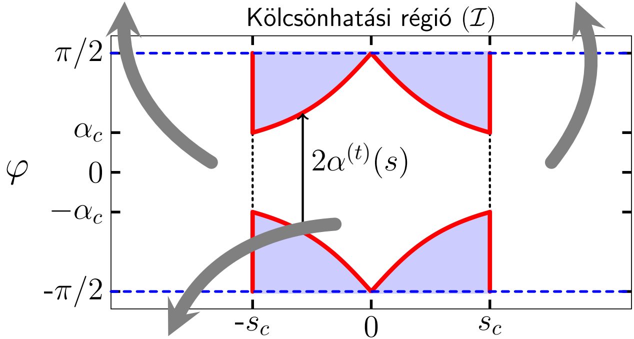
A megoldások illesztése

Szabad rotor megoldások:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\left[{\color{blue}\delta_{0m}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m s}+{\color{red}r_m}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_m s}\right]\phi_m(\varphi).$$

Szabad rotor megoldások:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}{\color{red}t_m}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m s}\phi_m(\varphi).$$



Korlátozott rotor megoldások:

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

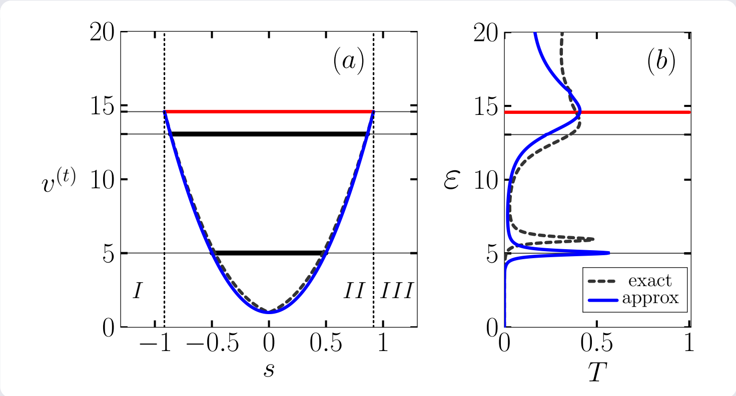
Transzmisszió:

$$T(\varepsilon)=\frac{1}{k_0}\sum_{m=-m_0}^{m_0}k_m|{\color{red}t_m}|^2$$

Analitikus közelítés

Transzmisszió a bejövő hullám energiájának függvényében

Nem forgó részecskék esetén



$(c = 0.4)$
$(\kappa = 1)$

A fiktív oszcillátor sajátenergiái: $\boxed{\varepsilon_{\mathfrak{n}} = v_0 + \left(\mathfrak{n} + \frac{1}{2}\right) \omega_{\mathrm{osc}}}$

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

Célunk

A szórási probléma megoldása tetszőleges bejövő hullámra.

Az analitikus eredmények ellenőrzése.

$$\textbf{S-mátrix:}\ r_m = \sum_{n=-m_0}^{m_0} S_{mn}^{LL}\, c_n, \qquad \text{és} \qquad t_m = \sum_{n=-m_0}^{m_0} S_{mn}^{RL}\, c_n.$$

A c_m bejövő és az r_m ill. t_m kimenő amplitúdók lineáris kapcsolata.

A kölcsönhatási régiótól távol

$$\Psi_\varepsilon^L(s,\varphi) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \left[c_m\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m s} + r_m\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_m s}\right] \phi_m(\varphi).$$

$$\Psi_\varepsilon^R(s,\varphi) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \left[t_m\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m s}\right] \phi_m(\varphi).$$

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel

Célunk

A szórási probléma megoldása tetszőleges bejövő hullámra.

Az analitikus eredmények ellenőrzése.

$$\textbf{S-mátrix:}\quad r_m = \sum_{n=-m_0}^{m_0} S_{mn}^{LL} c_n, \qquad \text{és} \qquad t_m = \sum_{n=-m_0}^{m_0} S_{mn}^{RL} c_n.$$

A c_m bejövő és az r_m ill. t_m kimenő amplitúdók lineáris kapcsolata.

Módszer:

Az S-mátrix meghatározása a problémához tartozó Green-függvény segítségével.

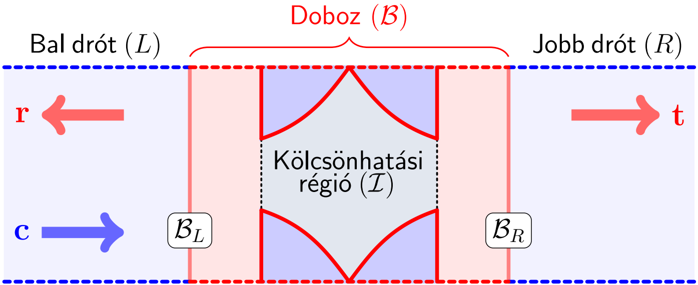
A retardált Green-függvényt definiáló egyenlet:

$$[(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}]\,\mathbf{G}(\varepsilon) = \mathbb{1} \quad \text{ahol, } \eta \longrightarrow 0^+$$

A megoldás diszkrét rácson egy (elvben végtelen) mátrix invertálását jelenti.

S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge, 1995.

A szórásprobléma megoldása Green-függvénnyel



A probléma végessé tétele

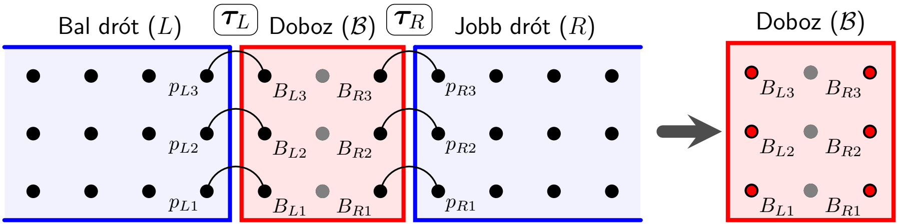
$\mathbf{S}$ kiszámításához elegendő a $\mathbf{G}(\varepsilon)$ ismerete a $\mathcal{B}$ Dobozra megszorítva:

$$\boxed{S_{nm}^{LR} = -\delta_{nm} + \mathrm{i}\, 2k_m \left\langle \mathcal{B}_L, \phi_n \right| \mathbf{G}(\varepsilon) \left| \mathcal{B}_R, \phi_m \right\rangle} \quad \textit{(Fisher-Lee reláció)}$$

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

Fisher, D. and Lee, P., Phys. Rev. B **23** (1981) 6851.

A Green-függvény numerikus meghatározása diszkrét rácson



A Dobozra megszorított Green-függvény diszkrét rácson egzakt

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

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

A Jobb dróttól származó nem eltűnő korrekciók:

$$\mathbf{\Sigma}^R[B_{Ri}, B_{Rj}] \sim g^R\,[p_{Ri}, p_{Rj}] \qquad g^R = \text{félvégtelen drót Green-függvénye}$$

S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge, 1995.

Di Ventra, M.,*Electrical Transport in Nanoscale Systems*, Cambridge, 2008.

A Green-függvény numerikus meghatározása diszkrét rácson

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

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

$$\mathbf{G} = \left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{G}^{LL} & \mathbf{G}^{LB} & \mathbf{G}^{LR} \\ \hline \mathbf{G}^{BL} & \mathbf{G}^{BB} & \mathbf{G}^{BR} \\ \hline \mathbf{G}^{RL} & \mathbf{G}^{RB} & \mathbf{G}^{RR} \end{array}\right]$$

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

A releváns fizikai tulajdonságok és a Green-függvény

A Doboz formális sajátértékproblémája — Élettartam

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

$$\varepsilon_\mu = \boxed{\varepsilon_{\mu,0}} - \boxed{\Delta_\mu} - \boxed{\mathrm{i}(\gamma_\mu/2).}$$

Az izolált probléma sajátenergiája

$\mathbf{\Sigma}(\varepsilon)$ hermitikus része

$\mathbf{\Sigma}(\varepsilon)$ anti-hermitikus része $\Rightarrow$ véges élettartam

A rendszer energia-spektrumának jellemzése — Állapotsűrűség (DOS)

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

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

A releváns fizikai tulajdonságok és a Green-függvény

A Doboz formális sajátértékproblémája — Élettartam

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

$$\varepsilon_\mu = \underbrace{\boxed{\varepsilon_{\mu,0}}}_{\text{Az izolált probléma sajátenergiája}} - \underbrace{\boxed{\Delta_\mu}}_{\mathbf{\Sigma}(\varepsilon)\text{ hermitikus része}} - \underbrace{\boxed{\mathrm{i}(\gamma_\mu/2).}}_{\mathbf{\Sigma}(\varepsilon)\text{ anti-hermitikus része} \Rightarrow \text{véges élettartam}}$$

A rendszer energia-spektrumának jellemzése — Állapotsűrűség (DOS)

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

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

Numerikusan egzakt eredmények

A transzmisszió energiafüggése "nem forgó" bejövő hullám esetén $(c = 0.5)$

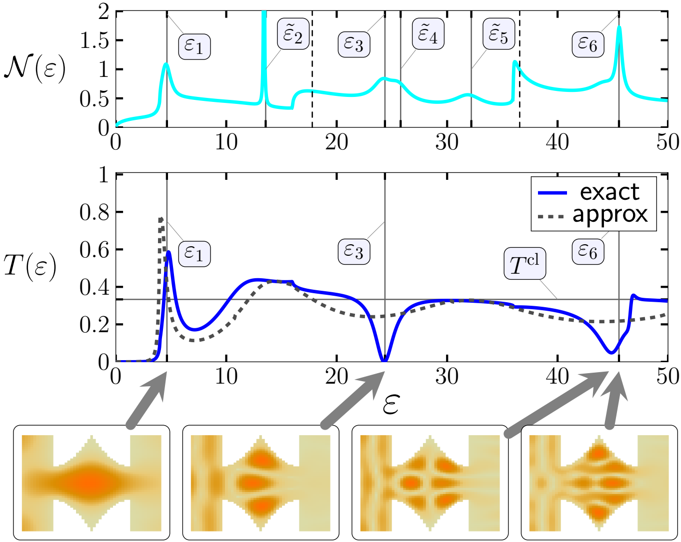
Állapotsűrűség (DOS)

Mely energiákon számíthatunk rezonanciára?

A transzmisszió energiafüggése

$$\Psi_0^{\rm even}(s,\varphi) = e^{ik_0 s}\phi_0(\varphi)$$

A hullámfüggvény abszolút érték négyzete rezonáns energiákon.

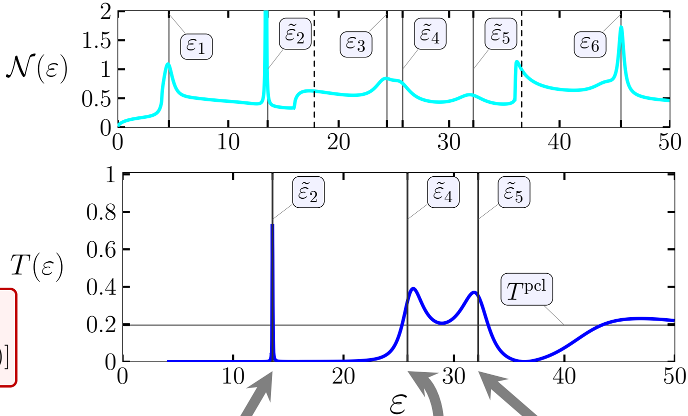


Numerikusan egzakt eredmények

A transzmisszió energiafüggése "ellentétesen forgó" bemenet esetén $(c = 0.5)$

Állapotsűrűség (DOS)

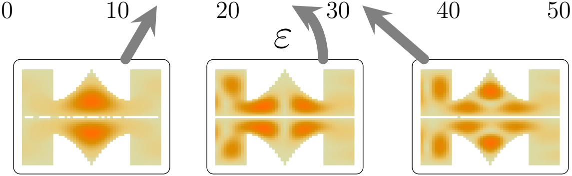
Mely energiákon számíthatunk rezonanciára?



A transzmisszió energiafüggése

$$\Psi_1^{\mathrm{odd}}(s,\varphi) = = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 s}\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_1(\varphi) - \phi_{-1}(\varphi)\right]$$

A hullámfüggvény abszolút érték négyzete rezonáns energiákon.



Összegzés

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

- Analitikus közelítés segítségével (nem forgó bemenet) a kölcsönhatási régióban a transzlációra vonatkozó effektív potenciálokat vezettünk be, és meghatároztuk a transzmissziós valószínűséget.
- A transzmisszióban mutatkozó rezonanciák a rotor késleltetett áthaladását jelentik, melyek energiájára egy a geometriai paraméterektől függő közelítő formulát is adtunk.
- Green-függvényeken alapuló módszerrel tetszőleges energián egzakt numerikus megoldást adtunk a szórási problémára, és a nyert adatok segítségével jellemeztük a folytonos energia spektrumot.
- Igazoltuk, hogy a közelítéseket tartalmazó analitikus megoldás alacsony energiákon jól egyezik az egzakt megoldással és rámutattunk az analitikus módszer határaira is.

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 Shore[1], Piroska Dömötör[2], Emerson Sadurní[3], Georg Süssmann[4] and Wolfgang P Schleich[5]

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 Földi[1], Mihály G Benedict[1], Bruce W Shore[2] 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.

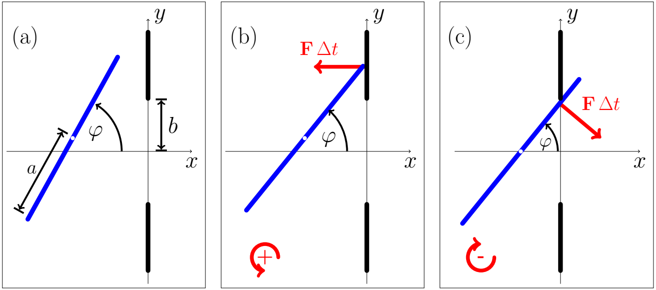
Kitekintés

Kísérleti lehetőségek

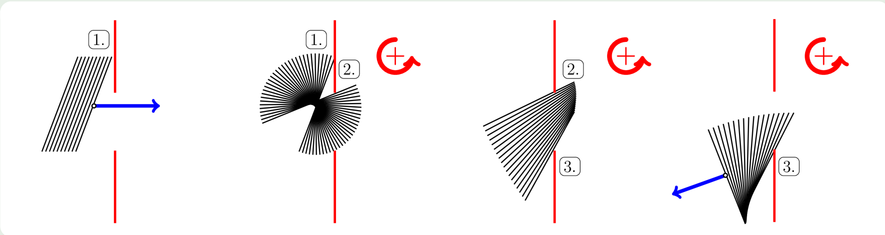
- Mechanikus rács $\sim 100\,\mathrm{nm}$ – döntéssel csökkenthető.
- Hélium dimer mérete: transzmissziós koefficiens méréséből. $62\,\mathring{\mathrm{A}} = 6.2\,\mathrm{nm}$. – csak rotációs alapállapotban létezik.
- Atomoptikai kísérletek, elhajlás lézer generálta rácson.
- Rb_2^{87} nempoláris molekula, $6.09\,\mathring{\mathrm{A}}$ hosszú. – térbeli orientáció pontosan meghatározható

M. Deiß, B. Drews, B. Deissler, and J. H. Denschlag J
"Probing the axis alignment of an ultracold spin-polarized Rb_2 molecule"
Phys. Rev. Lett. vol. 113, p. 233004, 2014.

Vissza a klasszikus problémához

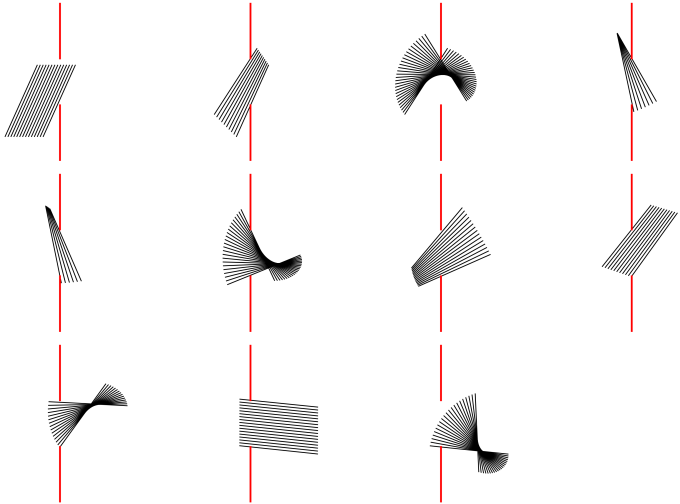


Példa: A rotor 3 ütközést követően hagyja el a kölcsönhatási régiót

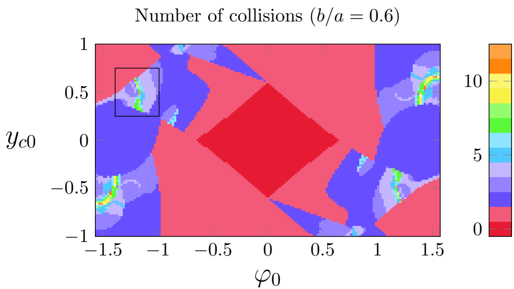


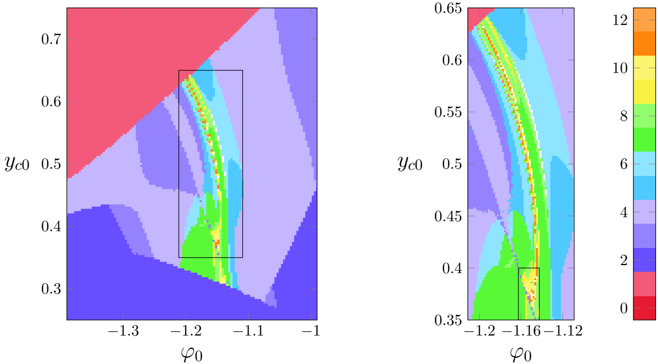
Vissza a klasszikus problémához

De lehet 3-nál sokkal több ütközés is ...

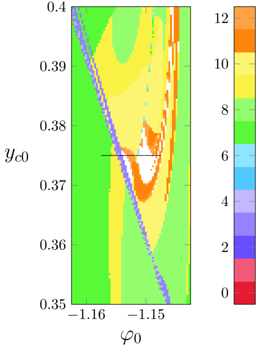


Kaotikus viselkedés jelei

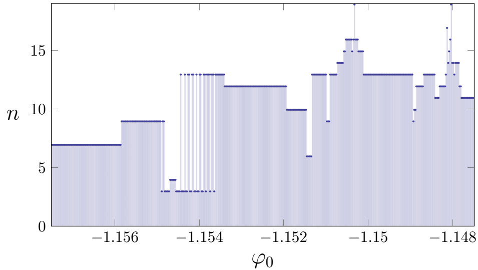


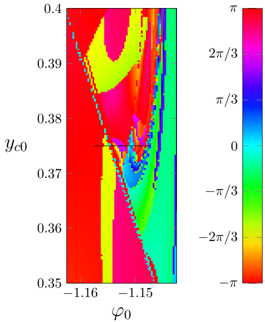


Kaotikus viselkedés jelei

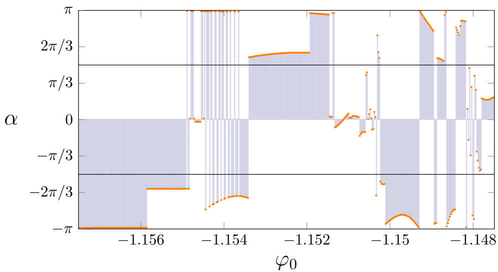


Ütközések száma adott kezdeti szög esetén





Végsebesség iránya adott kezdeti szög esetén



Köszönöm a figyelmet!