

**Számítógépes módszerek
a modern fizikában**
Nemzetközi Konferencia

**Computational Methods
in Modern Physics**
International Conference

Kolozsvár, 2006. november 2-5.
Cluj, November 2-5, 2006

Kiadó

Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság

Szerkesztő

Dr. Nagy László

Felelős kiadó

Dr. Köllő Gábor

Nyomdai előkészítés

Prokop Zoltán

Nyomtatás

Incitato nyomda – Kolozsvár

Felelős vezető: Biró Á. Attila

Támogatók

Illyés Közalapítvány – Budapest

Pro Technica Alapítvány – Kolozsvár

Vitacom Electronics Kft – Kolozsvár

Konferencia szervező

Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság
Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Magyar Tagozat
KMEI Interdiszciplináris Számítógép – Szimulációs Munkacsoport

Konferencia elnök

Dr. Nagy László

Tudományos bizottság

Dr. Nagy László

Dr. Karácsony János

Dr. Néda Zoltán

Szervező bizottság

Brem Walter

Lőrentz Ildikó

Matekovits Hajnalka

Prokop Zoltán

Szabó Zsófia

A konferencia programja

November 2, csütörtök

Hotel Universitas (Str. Pandurilor, u. 7)

20⁰⁰ Informális fogadás

November 3, péntek

BBTE, Központi épület, II. emelet, Augustin Maior előadóterem
(Str. M. Kogălniceanu u. 1.)

10⁰⁰ *megnyitó* (Andrei Marga, a BBTE Akadémiai Tanácsának elnöke, Köllő Gábor, az EMT elnöke, Karácsony János, a Fizika kar dékán-helyettese, Nagy László, a konferencia elnöke)

10⁴⁰ *kávészünet*

1. ülés

Elnök: Nagy László

11¹⁰ Csörgő Tamás
*2005 vezető eseménye a fizikában:
Folyadék volt a korai Világegyetem*

12⁰⁰ Csernai László
*Relativisztikus számítógépes folyadékdinamika
és moduláris modellezés*

12⁵⁰ *ebéd* – Piramis étterem (Str. E. de Martonne, u. 1)

2. ülés

Elnök: Csernai László

14³⁰ Tőkési Károly
*Atomi ütközési folyamatok tanulmányozása
klasszikus pályájú Monte Carlo módszerrel*

- 15²⁰ Járai-Szabó Ferenc
Teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek számítása félklasszikus, impakt-paraméter közelítésben
- 15⁴⁰ Tóth István Ferenc
Molekulák pozitronnal történő ionizációja
- 16⁰⁰ Póra Katalin
Az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszet számítása a H₂ molekula esetében
- 16²⁰ Borbély Sándor
Atomok (molekulák) fotoionizációja során jelentkező rezonanciahatások
- 16⁴⁰ kávészünet

3. ülészak

Elnök: Csörgő Tamás

- 17¹⁰ Donkó Zoltán
Részecskeszimulációs módszerek alkalmazása az alacsony hőmérsékletű plazmafizikában
- 18⁰⁰ Derzsi Aranka
Töltött részecskék mozgásának szimulációja ECR ion források esetén
- 18²⁰ Groma István
Modern módszerek a molekuladinamikában
- 18⁴⁰ Deák Róbert
A kinetikus Monte Carlo módszer alkalmazása vékonyrétegekben kapott mintázatok tanulmányozására
- 19⁰⁰ Konferencia állófogadás – Piramis étterem (Str. E. de Martonne u. 1.)

November 4, szombat

BBTE, Központi épület, II. emelet, Augustin Maior előadóterem
(Str. M. Kogălniceanu u. 1.)

1. ülés

Elnök: Donkó Zoltán

9⁰⁰ Vertse Tamás
*Az általánosított Berggren-reprezentáció használata megszerke-
zet számolásban*

9⁵⁰ Libál András
*Kolloid rendszerek dinamikája, egyenirányítása
és feldarabolódása villogó optikai szubsztrátumokon*

10⁴⁰ kávészünet

2. ülés

Elnök: Karácsony János

11¹⁰ Ravasz Erzsébet
Hálózatok a fehérjeláncok vizsgálatában

12⁰⁰ Palla Gergely
*A természet és a társadalom komplex hálózataiban található
átfedő csoportosulások feltárása*

12²⁰ Néda Zoltán
Klaszterezés és fázisátalakulás frusztrált hálózatokban

13⁰⁰ ebéd – Piramis étterem (Str. E. de Martonne u. 1.)

3. ülés

Elnök: Vertse Tamás

14⁴⁰ Kovács Katalin
*Rendezetlenség által vezérelt fázisátalakulás
egy rugó-fal típusú mágnesezési modellben*

- 15⁰⁰ Hajnal Zoltán
Atomi szintű modellezés a sűrűségfüggvény alapú tight-binding (DFTB) módszerrel
- 15²⁰ Ravasz Mária
Analogikai celluláris számítógépek – egy új paradigma a számítástechnikában
- 15⁴⁰ Szász Ágota
Optikai Ping-Pong....vagy a fény sebességének a számítógépes mérése
- 16⁰⁰ Zárszó – A legjobb fiatal előadónak járó díj átadása
- 17⁰⁰ A kolozsvári Báthory István (volt 11-es, volt 3-as Matematika-Fizika) Líceumot végzett fizikusok találkozója

November 5, vasárnap

Opcionális kirándulás a tordai sóbányába és Torockóra

Atomok (molekulák) fotoionizációja során jelentkező rezonanciahatások

Resonance Effects in the Photoionization of Atoms (Molecules)

BORBÉLY Sándor, NAGY László

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,
400084 Kolozsvár, Kogălniceanu u. 10, Románia

In the recent years much theoretical and experimental work about the ultrashort laser field –quantum system interaction was published (for review see [1,2]). In these theoretical works the consecutive laser pulses are discussed separately or only one pulse is considered [3]. In this work we show that in the case of moderately intense pulses with high repetition rate the interpulse spectral interference have an important role, which in the case of photoionization of atoms (molecules) leads to resonance - like effects.

Az elmúlt években a szakirodalomban számos tudományos munka jelent meg, amelyek tárgya a rövid lézertimpulzusok és a különböző fizikai rendszerek (atomok, molekulák, klasszterek, stb.) közötti kölcsönhatás elméleti illetve kísérleti vizsgálata (lásd [1,2]). Az eddigi elméleti munkák nagy részében a lézerteret egyetlen lézertimpulzus segítségével írják le, mivel a jelen kísérleti feltételek mellett (fotoionizáció esetén lézertimpulzusok hossza, az elektron spektrométerek felbontóképessége, stb.) az egymás utáni impulzusok hatása külön tárgyalható és hatásuk összegezhető.

Jelen munka célja a lézertimpulzus-csomag együttes hatásának vizsgálata, illetve annak kiderítése, hogy fotoionizáció esetén milyen feltételek mellett lehet a lézertimpulzusok hatását külön vizsgálni. A fenti cél elérésének érdekében a fotoionizáció folyamatát az időtől függő perturbációs módszer elsőrendű közelítésének keretein belül írjuk le. A választott modell előnye, hogy általa a fotoionizációra vonatkozó egyszerű, könnyen értelmezhető információhoz jutunk. Hátrány, hogy az ionizáció folyamatában elég jelentős szerepet játszó többfoton átmeneteket figyelmen kívül hagyja, így csak minőségi leírás lehetséges.

Egyszerű számítások alapján a Ψ_i kezdeti és a Ψ_f végállapot közötti átmeneti valószínűség n lézertimpulzus hatására megadható mint

$$P_{f_i}(n) = E_0^2 \left| \langle \Psi_f | \hat{\epsilon}^r | \Psi_i \rangle \right|^2 H(\omega_{f_i}, \omega, T) G(\omega_{f_i}, \tau_0, n),$$

ahol $H(\omega_{f_i}, \omega, T)$ a lézerimpulzus alakja által meghatározott faktor míg $G(\omega_{f_i}, \tau_0, n)$ a rezonanciafaktor (a fenti kifejezésekben használt jelölések: $\hat{\epsilon}$ – a lézertér polarizációs iránya; T – a lézerimpulzusok hossza; ω – a lézertér fő frekvenciakomponense; τ_0 – két egymás utáni lézerimpulzus közötti idő; $\omega_{f_i} = E_f - E_i$ a végállapot és a kezdeti állapot közötti energiakülönbség). A fent említett rezonanciafaktor fő tulajdonsága, hogy éles maximumokkal rendelkezik az $\omega_{f_i} = \frac{2k\pi}{\tau_0}$ értékeknél, azaz csak ezen energiaértékekre van számottevő átmeneti valószínűségünk. Folytonos végállapot esetén a kísérletileg kimérhető átmeneti valószínűség az elméleti valószínűségnek a használt elektron spektrométer felbontása által meghatározott energiaintervallumra vett átlaga. Elemi számítások segítségével kimutatható, hogy ha felbontás eleget tesz a következő feltételnek $\eta \geq \pi / \tau_0$, akkor a rezonancia tag teljesen kiátlagolódik. Ebben az esetben az impulzusok hatása külön tanulmányozható.

- [1] M. Protopapas, C. H. Keitel, P. L. Knight, Atomic physics with super-high intensity lasers, Rep. Prog. Phys. 1997 **60** 389 – 489
- [2] A. Pukhov, Strong field interaction of laser radiation, Rep. Prog. Phys. 2003 **66** 47 – 101
- [3] G. Duchateau et. al, Ionization dynamics of atoms with ultra-short and intense laser pulses, J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. 2000 **33** L571-L576

Relativisztikus számítógépes folyadék dinamika és moduláris modellezés

Relativistic CFD and Multi Module Modeling

CSERNAI László P.

University of Bergen

Relativistic CFD poses several new problems for computing. Instabilities do increase physically in energetic flow like rocket propulsion, nuclear implosions, high energy heavy ion reactions. Frequently the initial and final stages of the reaction must be described differently, with other physical and mathematical approaches. This brings focus to problems related to dissipation, viscosity, numerical viscosity and fluctuations. The stages of the reaction can now be treated separately as computational modules, and these can be connected by interface methods, which mean massive data transfer among the modules. Present increased storage and transfer capacities, especially in GRID computing, make such distributed computing tasks possible.

2005 vezető eseménye a fizikában: Folyadék volt a korai Világegyetem

Top Physics Story 2005: The Early Universe Was a Liquid

CSÖRGŐ Tamás

Magyar Tudományos Akadémia
KFKI Részecske és Magfizikai Kutató Intézet
Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.

At the Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) on Long Island, US, the four large detector groups agreed, for the first time, on a consensus interpretation of several year's worth of high energy heavy ion collisions: the fireball made in these collisions – a sort of stand-in for the primordial universe only a few microseconds after the Big Bang – was not a gas of weakly interacting quarks and gluons as earlier expected, but something more like a liquid of strongly interacting quarks and gluons.

The talk will highlight the Hungarian contribution to this result, which was selected as the top physics story of 2005 by the American Institute of Physics.

A 2005-ös esztendő legfontosabb fizikai eseményeinek lajstromából az Amerikai Fizikai Intézet egy olyan hírt emelt ki első helyen, amelyhez magyar akadémiai és egyetemi kutatók lényeges hozzájárulást adtak. A Long Island-i Brookhaven Nemzeti Laboratórium (BNL) Relativisztikus Nehézion Ütköztető (RHIC) nevű gyorsítójánál négy nagy kísérleti csoport közös bejelentést tett, melyben először számoltak be sokéves adatgyűjtésük egyetemes értelmezéséről. A RHIC nehézion-ütközéseiben egy olyan tűzgömb keletkezik, amely a korai világegyetem egyfajta mása, az Ősrobbanás utáni néhány mikromásodpercéből. Noha ez a tűzgömb az atommagok már ismert építőköveiből: a kvarkokból és gluonokból áll, tulajdonságai jelentősen eltérnek a várakozástól, mivel nem gyengén kölcsönható kvarkok és gluonok gázaként, hanem sokkal inkább erősen kölcsönható kvarkok és gluonok folyadékként viselkedik ez az anyag. Ebben a felfedezésben magyar kutatók is jelentős és nemzetközileg is elismert szerepet játszottak, melyet az előadás során részletesen ismertettünk, különös tekintettel a számítógépes fizika alkalmazásaira.

<http://www.aip.org/pnu/2005/split/757-1.html>

<http://arXiv.org/abs/nucl-ex/0410003/>, Nucl. Phys. A757 (2005) 148-283

A kinetikus Monte Carlo módszer alkalmazása vékonyrétegekben kapott mintázatok tanulmányozására

The Kinetic Monte Carlo Method for Reproducing Patterns in Thin Layer Growth

DEÁK Robert^{1,2}, NÉDA Zoltán¹

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Elméleti Fizika Tanszék,
400084 Kolozsvár, Kogălniceanu u. 1, Románia

²Eötvös Loránd Tudományegyetem, Anyagfizikai Tanszék,
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1, Magyarország

A special case of two-species co-deposition is studied by realistic kinetic Monte Carlo type simulations in 2+1 dimensions. The practically interesting case when impurities decorate the islands formed by segregated adatoms is studied. In contrast with all previous attempts for simulating the formation of impurity decorated islands we show that the generally considered unrealistic exchange process between adatoms and impurities is not necessary for retrieving these structures.

Az egyréteg lerakódás tanulmányozásán belül, két típusú atom felületre való lerakódása során kapott struktúrák időbeli fejlődését tanulmányozzuk. Ezt számítógépes szimulációval valósítjuk meg, felhasználva a Kinetikus Monte Carlo (KMC) módszert. Az A típusú atomok, mint adalékanyag és a B típusú atomok, mint szennyeződések, lerakódnak, diffundálnak és csoportosulnak egy A típusú atomból álló sík felületen, aminek szerkezete háromszög alakú. Azt a gyakorlati szempontból fontos esetet tanulmányozzuk, mikor a B típusú atomok körülveszik az A típusú atomok által létrehozott szigeteket. Korábbi próbálkozásokban, ezen struktúrák eléréséhez, egy külön jelenséget értelmeztek, az A és B típusú atomok közötti direkt kicserélődést, ami nem valóságos jelenség. Ezzel ellentétben, megmutatjuk, hogy e jelenség nélkül is létrejönnek a mintázott szegélyű szigetek. Az általunk létrehozott modellben az atomok nem csak az első rétegben, hanem egy ún. *buffer*, második rétegben is mozoghatnak és az ugrási gát kiszámítására egy új módszert javasoltunk. Ezen módszerben figyelembe vesszük az atomok kezdeti és végső állapotban való kötési energiáját is, amit a Lenard-Jones potenciál segítségével számítunk ki, figyelembe véve a több rácscsillagra levő szomszédos atomokat is.

Töltött részecskék mozgásának szimulációja ECR ionforrások esetén

Simulation of Charged Particles' Motion in ECR Ion Sources

**DERZSI Aranka¹, BIRI Sándor²,
FEKETE Éva², IVÁN István²**

¹Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Fizika Kar
str. Kogalniceanu 1, RO-400084 Cluj-Napoca, Romania

²MTA ATOMKI, 4026 Debrecen, Bem tér 1/18

The original TrapCAD code was developed in the 90s on DOS-platform in order to visualize the magnetic field line structure of ECR ion sources and to simulate the movement of individual charged particles in the plasma chamber. Recently TrapCAD was modified for Windows platform and underlaid a major upgrading. The last version of the code provides a user-friendly graphical interface and some new functionality.

A TrapCad program első változatát [1] a debreceni ECR ionforrás mágneses rendszerének tervezésekor fejlesztették ki. A program lehetővé tette az összetett mágneses tér tanulmányozását és segítséget nyújtott azon paraméterek optimális beállításához, melyek szoros összefüggésben vannak a létrejövő plazma és így a kivont ionnyaláb paramétereivel. Mindezek mellett a program alkalmazható volt egyedi töltött részecskék mozgásának szimulációjára is a mágneses csapdában.

A TrapCad program utolsó változata [2] biztosítja a régi funkciók működését és néhány új opcióval is rendelkezik. Ebben a változatban lehetőség van nagyszámú töltött részecske egyidejű mozgásának nyomon követésére. A szimulációk során nagyszámú elektront indíthatunk a teljes plazma kamrából, a rezonáns zóna felületéről vagy egy korong alakú elektródáról (biased disc). A program segítségével tanulmányozhatjuk az ECR plazma szerkezetét, a plazma elektronjainak térbeli és energia szerinti eloszlását. A kamra felületén elveszett részecskék paramétereit információként szolgáltatnak az elektron vesztesési folyamatokról. Az ATOMKI-ECR ionforrásnak megfelelő mágneses tér esetén végzett szimulációk összhangban vannak a kísérleti eredményekkel.

[1] J. Vámosi, S. Biri, Computer Physics Communications 98 (1996) 215

[2] S. Biri, A. Derzsi, É. Fekete, I. Iván, The Upgraded TrapCad Cod, 2006, High Energy Physics and Nuclear Physics (HEP&NP)

Részecskeszimulációs módszerek alkalmazása az alacsonyhőmérsékletű plazmafizikában

Application of Particle Simulation Methods in Low-temperature Plasma Physics

DONKÓ Zoltán

Magyar Tudományos Akadémia
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézete
Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.

The application of particle simulation techniques in low-temperature plasma physics is reviewed and illustrated with examples: (i) Monte Carlo simulations used for description of nonequilibrium charged particle transport in low-pressure gas discharges, and (ii) Molecular Dynamics simulations of strongly-coupled many-particle system formed in dusty plasma crystals and liquids.

Az Univerzum látható anyagának túlnyomó része plazma állapotban található. A természetben és laboratóriumi körülmények között előállított plazmákra jellemző részecskesűrűség és részecskeenergia (hőmérséklet) rendkívül tág határok között változik: az igen ritka és alacsony hőmérsékletű csillagközi plazmáktól a csillagok belsejében és fúziós berendezésekben található forró és sűrű plazmáig terjed. A plazmák egyes típusainak leírásárahoz természetesen különböző matematikai megközelítés használható. Egyes esetekben a részecske típusú leírás előnyösen alkalmazható, az ehhez a körhöz tartozó módszerek alkalmazhatósági lehetőségei, a számítástechnikai eszközök fejlődésének köszönhetően egyre bővülnek.

A mesterségesen előállított plazmák egyes típusai gyakorlati szempontból is igen jelentősek. Ilyenek például a kis ionizáltsági fokú ködfénykisülések, amelyek széleskörűen alkalmazhatók fényforrásokban, integrált áramkörök gyártásának technológiai lépéseiben, gázlázerekben. Ezen gázkisülések elemi folyamatok szintjén való megértése a tudományos ismeretek megszerzésén kívül az alkalmazások miatt is rendkívül fontos. A gázkisülések modellezésének alapja a töltött részecskék mozgásának leírása. Az alacsony nyomású ködfénykisülések esetében hatékonyan alkalmazható a Monte Carlo típusú leírás, amellyel egyes részecskék pályája és ütközési folyamatai követhetők. Az előadás első részében az alacsony nyomású

ködfénykisülések egyes alapjelenségeinek vizsgálatán mutatjuk be ezen szimulációs módszer adta lehetőségeket.

A részecskék kölcsönhatásából származó (potenciális) energia általában több nagyságrenddel kisebb a hőmozgásból adódó kinetikus energiánál, egyes plazmatípusokban fordított helyzet is előállhat. Ilyen, ú.n. erősen csatolt (potenciális energia által dominált, nemideális) plazmákra példa a neutronsillagok köpenyében, fehér törpe csillagokban, óriásbolygók belsejében található anyagállapot. Mesterségesen létrehozott erősen csatolt plazmákra példaként említhetők csapdában tárolt ionok, amelyek esetében a hőmérséklet igen alacsony lehet és így a rendszerek kristályos állapotba is kerülhetnek. További fontos rendszerek a komplex (poros) plazmák, amelyekben az elektronok, ionok és semleges gázatomok (molekulák) mellett nanométer – mikrométer méretű részecskék is jelenvannak. Ilyen rendszerekre asztrofizikai példaként a csillagközi por, az üstökösök csóvája, egyes bolygók gyűrűi említhetők. A porrészecskék elektromosan töltötté válhatnak, így a plazma többi összetevőjével kölcsönhatásba kerülnek és azokhoz hasonlóan reagálnak a külső elektromos és mágneses térre. Mivel a plazma egyéb összetevőihez képest igen nagy méretű porrészecskék nagy töltést vehetnek fel, a porrészecskék gyakran erősen csatolt rendszert alkotnak, plazmakristályok keletkezhetnek. Az erősen csatolt plazmák termodinamikai jellemzői, transzport jelenségei és kollektív gerjesztései hatékonyan tanulmányozhatók molekuladinamikai szimulációk alkalmazásával.

Analogikai celluláris számítógépek
– egy új paradigma a számítástechnikában –

Analogic Cellular Computers
– a new paradigm in information technology –

ERCSEY-RAVASZ Mária, ROSKA Tamás, NÉDA Zoltán

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,
Elméleti- és számítógépes Fizika Tanszék
str. Kogalniceanu 1, RO-400084 Cluj-Napoca,
Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Információs Technológia Kar,
Práter u. 53., Budapest, HU-1053, ravasz@digitus.itk.ppke.hu

The computational paradigm represented by Cellular Neural/nonlinear Networks (CNN) and the CNN Universal Machine (CNN-UM) as an Analogic Cellular Computer, gives new perspectives for computational sciences. Beside the applications developed in image processing, robotics, we will present how this computer can be used in physics for solving special, complex problems.

1960 és 2000 között az egy mikroprocesszorban lévő tranzisztorok száma 1-ről közel 1 milliárdra változott. Ez alatt a négy évtized alatt egyre komplexebb lapkák jelentek meg közel azonos áron. A chipek szerveződési és működési elve azonban nem változott, máig a Neumann János alkotta tárolt programú, digitális szerkezeti modellt követik. A mai technológia azonban lassan eléri működési korlátait, ezért ma már újfajta számítógépek konstrukciójával foglalkoznak a kutatók és mérnökök. Egy ilyen újfajta eszköz a Analogikai Celluláris Számítógép, mely a celluláris neurális hálózatok elméletére épül. (rövidítve CNN-UM: Celluláris Neurális/Nemlineáris Hálózat – Univerzális Gép). A processzor működtetése a hagyományos, rugalmas tárolt-program vezérléssel történik, azonban a műveletek jó része folytonos, analóg jelek térképszerű képein folyik.

A celluláris neurális hálózatok elmélete alapján megtervezett CNN számítógépek új perspektívát nyújtanak bizonyos komplex és sok számítógépes időt igénylő feladatok megoldásában. Ezeket a chipeket eddig főképp a robotikában és képfeldolgozásban alkalmazták, de sok fizikában fontos probléma megoldásánál is hasznosak lehetnek. Az előadás keretében a CNN alapvető elmélete és a CNN számítógép rövid bemutatása után a fizikában hasznos alkalmazásokról adunk áttekintést. Egy új alkalmazás keretében sztohasztikus szimulációkat implementáltunk a CNN chipre. Az eredményekből látható, hogy a CNN chipek folyamatban levő fejlődése fontos előnyöket jelenthet a jövőben, fizikában hasznos komplex problémák megoldásában.

Modern módszerek a molekuladinamikában

Modern Methods in Molecular Dynamics

GROMA István

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Anyagfizikai Tanszék
1117 Budapest Pázmány P. sétány 1/A

In recent molecular dynamics simulations 3 different approaches are applied. The simplest possible one uses pair potentials with justable parameters which are determined from experimental results. A somewhat more complex method operates with multi-particle potentials. The so called “ab initio” method treats the complete quantum mechanical problem. In the talk the 3 different methods are explained and illustrated.

A molekuladinamikában napjainkban három különböző megközelítést szokás használni. A legegyszerűbb amikor az atomok ill. molekulák között egyszerű páronkénti kölcsönhatást tételezünk fel. A kölcsönhatási potenciál alakját valamilyen az anyagra jellemző fizikai tulajdonságok alapján vesszük fel szabad paraméterekkel, amelyeknek az értékét valódi mérési adatokból határozzuk meg.

A másik egyre inkább elterjedt közelítés már figyelembe veszi, hogy az elektronok mozgásának következtében az egyszerű pár-potenciálok sokszor nem tudnak kielégítő eredményt adni. Ekkor megfelelően választott sokrészeske potenciálokat kell választani. Az előadásban kitérünk a leggyakrabban használt potenciálalakok fizikai hátterére.

A harmadik mintegy 10 éve kialakult módszer az ún. első elvekből történő számolás. Ez lényegében a megfelelő kvantummechanikai probléma közelítő megoldását jelenti. Ehhez szükség van az ún. “local density approximation” alkalmazására. Ez röviden ismertetésre kerül.

Az előadás második felében a három módszerrel számolt különböző rendszereken kapott konkrét eredményeket mutatunk. Emellett megvizsgáljuk, hogy külső kényszerek (hőtartály, nyomás rezervoár) hogyan vehetők figyelembe.

Teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek számítása félklasszikus, impakt-paraméter közelítésben

Calculation of Fully Differential Cross Sections with Semi-classical, Impact Parameter Method

JÁRAI-SZABÓ Ferenc, NAGY László

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika kar
400084 – Kolozsvár, Kogălniceanu u. 1, Románia

The semiclassical impact parameter method is used to calculate fully differential cross sections for single ionization of helium produced by fast charged C^{6+} projectile impact. 3D image of electron-emission pattern is generated and the results are compared with the available experimental data.

Az ütközési folyamatokról a legtöbb információt a teljesen differenciális ütközési hatáskeresztmetszetek révén nyerhetjük. Kísérletileg ez kinematikailag teljes mérésekkel határozható meg, melynek során detektálni lehet a lövedék, a kilökött elektron és a visszamaradt ionizált atom impulzusait. Nemrégiben M. Schulz és csoportja [1] háromdimenziós képeket készítettek a hélium atom ionizációja során bekövetkező elektron-kibocsájtási mintákról. A kísérlet során gyors C^{6+} lövedéket használtak és detektálták a kilökött elektront, az ionizált atomot valamint a szóródott lövedéket.

Jelenleg létezik néhány elmélet, amely megmagyarázza a kapott teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek értékeit [2, 3], de ezek az elméletek eléggé bonyolult közelítéseket alkalmaznak és nagy részük csak a szórási síkban ad helyes eredményeket és nem magyarázza meg az észlelt mintázatokat a lövedéknyalábra merőleges síkban.

Egy egyszerű, a félklasszikus impakt-paraméter módszerre alapuló [4] elméleti leírást dolgozunk ki a fenti kísérleti helyzet tanulmányozására. A módszert az előző években sikeresen alkalmaztuk teljes hatáskeresztmetszetek kiszámítására a héliumatom egyszeres és kétszeres ionizációjakor, a korrelációs hatások vizsgálatára a még komplexebb lítiumatom egyszeres és kétszeres ionizációja esetében.

Ezt az elsőrendű perturbációszámításon alapuló módszert első alkalommal alkalmazzuk teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek kiszámítására. A számításokban a lövedék mozgását klasszikusan írjuk le, míg a cél-atom leírására kvantummechanikai formalizmust használunk. Első közelítésben a lövedékrészecske szóródását egyszerű Rutherford-szórásnak tekint-

jük. A számításokat elvégezzük a hélium atom gyors C^{6+} lövedékkel történő ütközése során bekövetkező egyszeres ionizációra és a kapott eredményeket összehasonlítjuk a szakirodalomban közölt kísérleti adatokkal. Mindemellett megvizsgáljuk a modellt befolyásoló fontosabb paramétereket is.

A fent ismertetett elsörendű, félklasszikus modell segítségével megpróbálunk egy egyszerű képet kapni az ütközésben részt vevő részecskék közötti kölcsönhatásokról és korrelációkról. Megvizsgáljuk a kísérleti és elméletileg számolt hatáskeresztmetszetek egyezését mind a szórási, mind pedig az erre merőleges síkokban. A modell segítségével elméleti háromdimenziós képeket készítünk az elektron-kibocsátási mintákról a héliumatom egyszeres ionizációja esetén.

- [1] Schulz M. et al., Three-dimensional imaging of atomic four-body processes, *Nature* 422 (2003), 48-50.
- [2] Madison D.H. et al., Probing Scattering Wave Functions Close to the Nucleus, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), 253201.
- [3] Foster M. et al., Fully differential cross sections for C^{6+} single ionization of helium, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 37 (2004), 1565.
- [4] Nagy L., Two-electron processes in fast collisions with charged particles, *Nucl. Instr. Meth. B* 124 (1997), 271-280.

Rendezetlenség által keltett fázisátalakulás egy rugó-fal típusú mágnesezési modellben

Disorder-induced Phase Transition in a Spring-block Type Magnetization Model

KOVÁCS Katalin, NÉDA Zoltán

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,
Elméleti- és számítógépes Fizika Tanszék
str. Kogalniceanu 1, RO-400084 Cluj-Napoca, Romania
kkovacs@phys.ubbcluj.ro

An one-dimensional Burridge-Knopoff type magnetization model is studied by Monte-Carlo computer simulation. Disorder is introduced through randomly distributed pinning centers, the magnetization process is modeled with relaxation dynamics. The avalanche size distribution is studied for different values of the disorder. The results indicate that the model exhibits disorder-driven phase transition.

Egydimenziós Burridge-Knopoff [1] típusú rugó-fal modell kerül bemutatásra, amelynek célja, hogy a mágnesezési jelenségeket magyarázza. A modellt Monte Carlo szimulációs módszerrel tanulmányoztuk, vizsgáltuk a rendezetlenség által keltett fázisátalakulás kialakulásának lehetőségét és feltételeit.

Ez a mágnesezési modell a klasszikus (földrengések leírására használt) Burridge-Knopoff modellekhez hasonlóan rugókkal összekapcsolt falakból áll: a falak az ellentétes irányítású mágneses doméniumokat elválasztó Bloch-falakat modellezik, míg a rugók a mágneses tartományoknak felelnek meg. Az így felépített rendszerbe rendezetlenséget viszünk be azáltal, hogy a mintába véletlenszerűen úgynevezett „pinning center”-eket szórunk szét. Három típusú kölcsönhatást veszünk figyelembe: (i) mágneses doméniumok kölcsönhatása a külső mágneses térrel (a modellben minden falra egyenlő nagyságú, de szomszédos falakra ellentétes irányítású erő hat), (ii) a doméniumok saját mágneses energiájából származó erő (a modellben a rugókban fellépő rugalmas erő), (iii) pinning (megtűző) erő, ami a falak mozgását akadályozza (a modellben véletlenszerű tapadási súrlódás jellegű erő). A mágnesezési folyamatot relaxációs dinamika vezérli.

Tanulmányozzuk a hiszterézis (mágnesezési) görbék alakját, valamint mágnesezettségben bekövetkező diszkrét (Barkhausen-) ugrásoknak (lavi-

náknak) nagyság szerinti eloszlását a rendszerben levő rendezetlenség függvényében [2]. Az eredmények alapján felismerhető a szubkritikus, kritikus és szuperkritikus tartomány, ami összhangban van korábbi mágnesezési modellek eredményeivel [3]. A lavinák nagyság szerinti eloszlása hatványfüggvény a kritikus rendezetlenség környezetében.

A fázisátalakulás tanulmányozására bevezetett rendparaméter a legnagyobb lavina relatív mérete, a vezérlő paraméter pedig a rendszerben levő rendezetlenség mértéke. Ábrázolva a rendparaméter értékét a rendezetlenség függvényében kimutattuk a rendezetlenség által keltett fázisátalakulást [4].

- [1] R. Burridge and L. Knopoff, *Bull. Seis. Soc. Amer.* **57**, 341 (1967)
- [2] K. Kovacs, Y. Brechet and Z. Neda, *Model. Sim. Mat. Sci. Eng.* **13**, 1341-1352 (2005)
- [3] E. Vives and A. Planes, *Phys. Rev. B* **50**, 3839 (1994)
- [4] K. Kovacs and Z. Neda, *Phys. Lett. A*, (2006)

Kolloid rendszerek dinamikája, egyenirányítása és feldarabolódása villogó optikai szubsztátumokon

Dynamics, Rectification, and Fractionalization for Colloids on Flashing Substrates

A. LIBÁL^{1,2}, C. REICHHARDT¹, B. JANKÓ², C.J. OLSON REICHHARDT¹

¹ Center for Nonlinear Studies and Theoretical Division,

Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico 87545

² Department of Physics, University of Notre Dame, Notre Dame, Indiana 46556

We show that a rich variety of dynamic phases can be realized for mono- and bidisperse mixtures of interacting colloids under the influence of a symmetric flashing periodic substrate. With the addition of dc or ac drives, phase locking, jamming, and new types of ratchet effects occur. In some regimes we find that the addition of a non-ratcheting species increases the velocity of the ratcheting particles. We show that these effects occur due to the collective interactions of the colloids.

Megmutatjuk hogy dinamikus fázisok gazdag változatossága hozható létre egy- illetve kétkomponensű kölcsönható részecskékből álló kolloid rendszerekben, hogyha ezeket egy szimmetrikus villogó periodikus szubsztátumra helyezzük. Egyen- illetve váltakozó hajtás esetén 'phase locking'-ot, 'jamming'-et és új típusú egyenirányító hatást (ratcheting) figyelhetünk meg. Egyes paraméter tartományokban azt találjuk hogy a mozgásban aktívan részt nem vevő részecskék hozzáadásával felgyorsítható egy kétfázisú rendszer egyenirányított mozgása. Megmutatjuk hogy ez a hatás a részecskék kollektív kölcsönhatásának tudható be.

Klaszterezés és fázisátalakulás frusztrált hálózatokban

Coalition Formation and Phase Transition in Frustrated Network

NÉDA Zoltán¹, RAVASZ Mária¹, FLORIAN Răzvan¹,
LIBÁL András², GYÖRGYI Géza²

¹Babes-Bolyai University, Dept. of Theoretical Physics, Cluj-Napoca, Romania

²Center for Nonlinear Studies, Los Alamos National Laboratory, U.S.A.

²Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Fizika Tanszék, Budapest, Magyarország

The ground-state of an infinite-range Potts glass-type model with $\pm J$ bonds and unrestricted number of states is used to investigate coalition formation. As a function of the q probability of $+J$ bonds in the system it is found that the r relative size of the largest cluster (a cluster being the group of elements in the same state) shows a percolation like behavior. By a simple renormalization approach and several optimization methods we investigate the $r(q)$ curves for finite systems sizes. Non-trivial consequences for social percolation problems are discussed.

Az egyedek közti kapcsolatok függvényében nap mint nap észlelhetjük a politikában, a gazdaságban, vagy szűkebb társadalmi csoportokban a koalíciók, csoportok kialakulását. A koalíciókat (klasztereket) meghatározó kapcsolatok általában egy hierarchikus strukturájú és nagyon bonyolult topológiával rendelkező hálózatot alkotnak. Leegyszerűsítve őket vonzó és taszító kölcsönhatásokra a jelenséget úgy közelíthetjük meg, hogy a rendszer koalíciókra szakad, hogy minnél jobban megfeleljen az egyének közti kötéseknek. Ideális klasztereződés esetén az egy csoportban levő egyének közt csak vonzó, a különböző csoportokban levők között pedig csak taszító kölcsönhatás létezik. Természetesen ilyen ideális állapot nem mindig lehetséges, de statisztikus fizikai módszerekkel kereshetjük az optimális konfigurációt a rendszerben egy költségfüggvényt minimizálva. A dolgozat keretében ilyen optimális koalíciók kialakulását vizsgáltuk egy nagyon egyszerű modellel és költségfüggvénnyel. Modellünk egy globálisan csatolt rendszert vizsgál, vagyis minden két elem közt van kapcsolat, a kötések értékei meg pozitívak vagy negatívak lehetnek (vonzó és taszító kölcsönhatás), és akárhány klaszter kialakulása megengedett. A modellünk nagyon hasonlít a Potts féle

spinüveg modellhez, ugyanakkor létezik néhány fontos különbség amely a rendszer viselkedésében nagyon érdekes változásokat okoz. Az optimális konfiguráció esetén kialakult legnagyobb klaszter relatív méretét rendparaméterként tekintve a rendszerben egy nagyon érdekes fázisátalakulás figyelhető meg. A hálóban létező pozitív kötések sűrűségének a függvényében, a termodinamikai határesetben egy perkolációra emlékeztető viselkedés van: ha a rendszerben a pozitív kapcsolatok vannak túlsúlyban akkor egy nagy klaszter alakul ki, ha viszont a negatív kötések dominálnak akkor az optimalis állapot az ha minden egyén külön koalíciót alkot.

Ezen perkolációszerű fázisátalakulásnak a megjelenését több módszerrel igazoljuk. Először egy egyszerű renormalizációs módszerrel számolunk, majd egy tovább-finomított Monte Carlo típusú renormalizációt használunk. Kis rendszerek esetén az összes állapotot letérképezzük számítógépes módszerekkel ($N < 8$), majd nagyobb rendszerek ($N > 7$) esetén különböző Monte Carlo típusú optimalizációs módszereket alkalmazunk. A feladat komplexitása hasonlít más érdekes és közismert problémához, mint pl. a tekeredő proteinláncok problémája, a spinüvegek, az "utazó ügynök" feladat vagy gráf színezési problémához .

A természet és a társadalom komplex hálózataiban található átfedő csoportosulások feltárása

Uncovering the Overlapping Community Structure of Complex Networks in Nature and Society

PALLA Gergely^{1,2}, DERÉNYI Imre²,
FARKAS Illés^{1,2}, VICSEK Tamás^{1,2}

¹ MTA-ELTE Biológiai Fizika kutatócsoport,

² ELTE Biológiai Fizika tanszék,

H1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1A, Magyarország

Real-world networks are mostly inhomogeneous; one of the most obvious signs for this is the appearance of locally dense regions: groups of internally densely connected nodes. These groups – often called communities, clusters or modules – are the building blocks of complex networks and enable their proper functioning. To locate communities we propose the Clique Percolation Method (CPM) [2] and find that in real networks communities overlap strongly. We define novel statistical properties, find nontrivial scaling and suggest applications.

A hálózatok a természet és a társadalom leírásának igen általános és gyakran használt eszközei. A rajtuk végbemenő folyamatok szempontjából meghatározó szerepe van a csoportosulásoknak (más néven moduloknak vagy klasztereknek): ezek olyan csoportok, amelyeken belül a csúcsok egymáshoz sűrűn kapcsolódnak. Közismert példa az emberi kapcsolatok hálózata, ahol a hírek egy-egy csoportosuláson belül (az egymással személyesen vagy akár telefonon gyakran beszélő emberek között) gyorsan terjednek, a csoportosulások között viszont jóval lassabban. A Világháló oldalainak hálózatában megtalált csoportosulások olyan weboldalak, amelyek egymás közt sok mutatóval (hiperlinkkel) rendelkeznek. Ezek az oldalak gyakran földrajzilag egymáshoz közel találhatóak vagy hasonló témájúak, és a keresőprogramok számára hasznos lehet a feltérképezésük. A sejtjeink molekulái is sűrű csoportokba rendeződnek; ezeknek a csoportoknak a megtalálása számos érdekes alapkutató felismerést és gyógyászati lehetőséget rejt.

Fontos, hogy a valódi hálózatok csoportosulásai gyakran átfednek egymással, tehát egy elem egyszerre több csoportnak is tagja lehet. Saját kapcsolataink hálózában könnyen találhatunk számos sűrű csoportot, amelyek-

nek egyaránt tagjai vagyunk: családjunk, baráti körünk, munkatársaink vagy akár iskolatársaink. A csoportosulások (klaszterek) fontossága miatt a keresésükre kidolgozott módszerek számos tudományterületen és alkalmazásban használhatósak. Azonban jelenleg használt klaszterezési eljárások döntő része egymástól elszigetelt, átfedéseket nem tartalmazó modulokat keres. Bemutatunk egy keresési algoritmust [1,2], amely egymással átfedő klasztereket is megenged, és így hozzásegít ahhoz, hogy megismerjük a komplex hálózatok egymáshoz bonyolultan kapcsolódó csoportjait valamint a csoportosulások hálózatát. E módszerrel végzett vizsgálataink szerint számos hálózatban (például tudományos együttműködési, szó asszociációs ill. fehérje kölcsönhatási gráfokban) a csoportosulások között valóban jelentősek az átfedések. A bevezetett új statisztikus jellemzők segítségével nemtriviális skálázási és korrelációs tulajdonságok találhatóak.

Hivatkozások

- [1] Derényi Imre, Palla Gergely, Vicsek Tamás. Clique percolation in random networks. *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 160202:1-4.
- [2] Palla Gergely, Derényi Imre, Farkas Illés, Vicsek Tamás. Uncovering the overlapping community structure of complex networks in nature and society. *Nature* **435** (2005) 814-818. A publikációban használt program ingyenesen letölthető a <http://angel.elte.hu/clustering> helyről.

Az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszet tanulmányozása H₂ molekula esetében

Study of Ionization Differential Cross Section in Case of H₂ Molecule

PÓRA Katalin, NAGY László

Fizika Kar, Babes-Bolyai Tudományegyetem,
Kogalniceanu 1, 400084 Kolozsvár, Románia

Ionization differential cross section is investigated in case of ionization of hydrogen molecule by fast charged ion impact. There are several experimental results for Kr³⁴⁺, Kr³³⁺ ions [8, 9, 10] and proton projectile [2, 3]. There are some theoretical investigations too [1, 4, 5, 6, 7]. The present paper gives a theoretical model for calculation of differential cross section using numerical methods. Performing the calculations the results are compared with the experimental ones.

Az utóbbi pár évben több elméleti [1, 4, 5, 6, 7] és kísérleti [2, 3, 8, 9, 10] tanulmány született a hidrogénmolekula töltött részecskével történő ionizációjával kapcsolatban és a jelentkező interferenciaeffektusról.

Az interferenciahatás a hidrogénmolekula kétcentrumú jellegéből adódik. A lejátszódó jelenség hasonlít a Young-típusú interferencia kísérletre. Az interferenciahatás megmarad akkor is, ha átlagolunk a molekulatengely összes irányára.

Az általunk kidolgozott analitikus számítások [5] jól igazolták az interferenciaeffektust, és viszonylag jó egyezést eredményeztek a kísérletileg kapott hatáskeresztmetszettel. A jelenlegi munkánkban egy más módszerrel számítjuk ki a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetet annak érdekében, hogy a kísérletivel jobban egyező eredményt kapjunk. Számításaink során félklasszikus közelítést alkalmazunk, a H₂ alapállapotát Heitler-London típusú molekula-hullámfüggvény írja le, a végső állapot a kilökött elektron hullámfüggvényének és a visszamaradt H₂⁺ ion kötöttállapot hullámfüggvényének szorzataként írjuk fel.

Elvégezve a numerikus számításokat a kapott eredményeket összehasonlítjuk a kísérleti eredményekkel. Az eredmények a hatáskeresztmetszetre jobb egyezést mutatnak ez esetben, mint az előzőekben általunk közölt eredmények [5]. Megvizsgálva a hidrogénmolekula és két hidrogénatom hatáskeresztmetszeteinek arányát a kilökött elektron sebességének függvényében oszcillációt észlelünk ami az interferencia jelenlétére utal.

- [1] Galassi M. E. et al, Young-type interference patterns in electron emission spectra produced by impact of swift ions on H₂ molecules, *Phys. Rev. A*, 2002/66, 052705
- [2] Hossain S. et al, Interference effects in electron emission from H₂ by 3 and 5 MeV H⁺ impact, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, 2003/205, 484-487
- [3] Hossain S. et al, Interference phenomena associated with electron-emission from H₂ by (1–5) MeV H⁺ impact, *Phys. Rev. A*, 2005/72, 010701
- [4] Laurent G. et al, Orientation and interference effects in single ionization of H₂ by fast ions, *J. Phys. B*, 2002/35, L495-L501
- [5] Nagy L. et al, Interference effects in the ionization of H₂ by fast charged particles, *J. Phys. B*. 2002/35, L453-L459
- [6] Póra K., L. Nagy, Intereference effects in the differential ionization cross-section of H₂ by H⁺ impact, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* 2005/233, 293-297
- [7] Sarkadi L., Interference effects in electron emission from H₂ by particle impact, *J. Phys. B* 2003/36, 2153-2163
- [8] Stia C. R. et al, Interference effects in single ionization of molecular hydrogen by electron impact, *J. Phys. B* 2003/36, L257-L264
- [9] Stolterfoht N. et al, Evidence for Interference Effects in Electron Emission from H₂ Colliding with 60 MeV/u Kr³⁴⁺ Ions, *Phys. Rev. Lett* 2001/87, 023201
- [10] Stolterfoht N. et al, Interference effects in electron emission from H₂ by 68 MeV/u Kr³³⁺ impact: Dependence on the emission angle, *Phys. Rev. A* 2003/67, 030702

Hálózatok a fehérje-láncok vizsgálatában

Protein Folding Networks

RAVASZ Erzsébet, TOROCZKAI Zoltán, G. GNANAKARAN

Center for Nonlinear Studies, Los Alamos National Laboratory
Los Alamos, NM 87544, U.S.A., eravaszh@lanl.gov

We take a networks approach to protein folding by identifying different protein conformations with nodes, while an elementary step of the system (rotation around a bond) that takes one configuration to another is defined as a link. The energies of configurations are scalar quantities associated with each node. Using this approach we can show that the scale-free nature of the observed protein conformation networks can be explained by simple results obtained on gradient networks. We also show the sufficient conditions for a configuration network model that is able to produce funneled landscapes.

A komplex hálózatok egy új alkalmazását mutatjuk be a polimér-láncok és fehérjék térszerkezetét jellemző fázisterek leírásában. A szerkezet-háló csomópontjai a polimér vagy fehérje különböző konfigurációi. Két csomópont akkor van összekötve, ha az él egyik végét képező konfiguráció egyetlen kémiai kötés körüli forgással átvihető a másikba. Azonosítottuk a szerkezet-háló felépítésének alapvető statisztikai szabályait. Segítségükkel reprodukálható a fehérjék térszerkezeti dinamikájának néhány mérhető tulajdonsága. 2004-ben Rao és Caflisch molekuláris dinamika szimulációk segítségével feltérképezte néhány peptid térszerkezeti hálóját. Azt találták hogy ezek a hálózatok minden vizsgált peptid esetében skálafüggetlenek: kötés-eloszlásuk - 2-es kitevővel eső hatványfüggvény. Megmutatjuk hogy a molekuláris dinamika által kimért hálózatok a gradiens háló egy sajátos eseteként értelmezhetőek. Ezek a hálózatok speciális szerkesztésüknek köszönhetően általában skálafüggetlenek, akkor is ha az alapul szolgáló hálózat teljesen homogén. Rámutatunk a szerkezet-háló azon tulajdonságaira amik a - 2-es kitevőért felelősek, majd megvizsgáljuk a tölcser szerkezetű energia-felületek képződésének feltételeit.

**Optikai Ping-Pong...
vagy a fény sebességének
a számítógépes mérése**

**Optical Ping-pong...
or the Measurement of the Speed
of Electromagnetic Waves with Computers**

SZÁSZ Ágota¹, NÉDA Zoltán²

¹Bolyai Farkas High-school, Tg.-Mureş, Romania

²Babes-Bolyai University, Dept. of Theoretical Physics, Cluj-Napoca, Romania

A simple and elegant method for measuring the speed of electromagnetic waves by using the "ping" instruction incorporated in most of the operating systems is described. Using a local network composed of a computer and a router and considering relative measurements the speed of light in optical cables and the speed of electromagnetic radio-waves is estimated. The natural noise (arising from the involved electronic systems) affecting the length of the ping time-intervals and the used large scale statistics are the main ingredients that helps us to extend the limited time-precision of the "ping" command. Results obtained in optical and wireless networks are encouraging.

Egy egyszerű, elegáns és mindenki számára hozzáférhető módszert mutatunk be, amelynek a segítségével nagyságrendileg jól megbecsülhető a fény illetve az elektromágneses rádióhullámok terjedési sebessége. Módszerünk alapja a jólismert "ping" utasítás, amit általában arra használunk, hogy teszteljük egy számítógép elérhető-e a hálózaton keresztül. A ping utasítást követően megkapjuk mikroszekundumokban kifejezve, hogy mennyi idő szükséges egy adott információs csomagnak a tesztelt számítógéphez való elküldéséhez illetve a visszaküldéshez. Egy zárt lokális hálózaton való relatív mérések segítségével kiszűrhető a számítógépeken való késés és ezáltal megbecsülhető a kábelekben vagy a térben az elektromágneses hullámok terjedési sebessége. A hálózati kártyán illetve a routeren levő természetes zaj az ami segít bennünket abban, hogy a ping által megengedett mikroszekundumos időfelbontást tovább finomítsuk, és ezáltal már több méteres távolságon is mérni tudjunk.

Kétféle mérést fogunk bemutatni: fénykábelekben kapott eredményeket illetve vezeték nélküli (wireless) hálózaton kapott eredményeket tárgyalva. Mindkét esetben eredményeink jól megközelítik a fénysebességre elfogadott értéket. Módszerünknek elsősorban pedagógiai értéke van, ugyanis szemléletesen és érdekesen alkalmazható iskolai feltételek mellett az elektromágneses hullámok sebességének a nagyságrendi megbecslésére. Ugyanakkor az a statisztikai módszer ahogy a zajt a mérési pontosság növelésére tudjuk alkalmazni hasznos lehet más nagy pontosságot igénylő mérés esetén is, ahol a mérőberendezés felbontóképessége nem elégséges a mérendő mennyiség megbecsléséhez.

Molekulák pozitronnal történő ionizációja

Ionization of Molecules by Positron Impact

TÓTH István¹, Radu I. CÂMPEANU²,
Vasile CHIȘ¹, NAGY László¹

¹ Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár 400084, Románia

² Department of Physics and Astronomy, York University, 4700 Toronto, ON, Canada

We have refined previously performed calculations for the positron impact ionization of the N_2 , CO, CO_2 and CH_4 molecules. In the framework of the DWBA method we have calculated the wavefunctions of the incoming and outgoing particles numerically in the spherically averaged, screened field of the molecule. Present results are in very good agreement with experiment for the N_2 and CO molecules, while the results for the CO_2 and CH_4 molecules need more improvements.

Az utóbbi két évtized során fokozott érdeklődésnek örvendett az atomok és molekulák pozitronnal történő ionizációjának a jelensége. Több tudományos műhelyben végeztek ilyen jellegű kísérleteket. A H_2 , N_2 , O_2 , CO, CO_2 és CH_4 molekulák pozitron-lövedékkel való ionizációját tekintve, a közelmúltban több tanulmány is született. Ezek a tanulmányok a CPE (Coulomb plus plane waves with full energy range) modell alkalmazták az ionizációs folyamat leírására. A CPE modell keretében a kilökött elektront Coulomb típusú hullámfüggvénnyel írták le, míg a szórt pozitron leírására síkhullámot vagy Coulomb típusú hullámfüggvényt alkalmaztak. Továbbá, az aktív elektron kezdeti állapotának a jellemzésére, többcentrumú, Gauss-típusú hullámfüggvényeket alkalmaztak. A számítások egyszerűsítése végett, a többcentrumú hullámfüggvényeket sorba fejtették a Legendre polinomok, vagy a gömbfüggvények szerint (a nem lineáris molekulák esetén). A CPE modell szolgáltatta elméleti hatáskeresztmetszetek jó egyezést mutattak a H_2 [2] és CO [3] molekulák esetében a kísérleti hatáskeresztmetszetekkel, azonban a N_2 [4], CO_2 [3], és CH_4 [5] molekulákra számolt elméleti eredmények nagyobbak voltak a kísérleti értékeknél.

A kísérlettel való jobb egyezés érdekében, a jelen tanulmány [1] során a N_2 , CO, CO_2 és CH_4 molekulák pozitronnal történő ionizációja esetén, alkalmaztuk a DWBA (Distorted Wave Born Approximation) módszert. A módszer keretében valószerűbb hullámfüggvényekkel írtuk le a lövedéket, a szórt pozitront illetve a kilökött elektront. Ezt úgy valósítottuk meg, hogy az

atommagok illetve az elektronok keltette valódi potenciált szférikusan átlagoltuk, és a szabad részecskék kezdeti valamint végállapotú hullámfüggvényeit ebben az árnyékolt térben, numerikusan határoztuk meg. Az így kapott eredmények nagyon jó egyezést mutatnak a kísérleti adatokkal a N_2 és CO molekulák esetén, míg a CO_2 és CH_4 molekulák eredményei további javításokat igényelnek.

- [1] I. Tóth, R. I. Campeanu, V. Chiş and L. Nagy, Screening effects in the ionization of molecules by positrons, *Physics Letters A*, Elsevier, 2006, in press.
- [2] R. I. Campeanu, V. Chiş, L. Nagy and A. D. Stauffer, The effect of target representation in positron impact ionization of molecular hydrogen, *Physics Letters A*, Elsevier, 2003 / 310, 445-450.
- [3] R. I. Campeanu, V. Chiş, L. Nagy and A. D. Stauffer, Positron impact ionization of CO and CO_2 , *Physics Letters A*, Elsevier, 2005 / 344, 247-252.
- [4] R. I. Campeanu, V. Chiş, L. Nagy and A. D. Stauffer, Positron impact ionization of molecular nitrogen, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, Elsevier, 2004 / 221, 21-23.
- [5] R. I. Campeanu, V. Chiş, L. Nagy and A. D. Stauffer, Positron impact ionization of CH_4 , *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, Elsevier, 2006 / 227, 58-60.

**Atomi ütközési folyamatok tanulmányozása
klasszikus pályájú Monte Carlo módszerrel**

**Investigation of Atomic Collisions
within the Framework of the Classical Trajectory
Monte Carlo Method**

TŐKÉSI Károly

Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, (ATOMKI)
H-4001 Debrecen, P.O.Box 51, Hungary

Abstract

Interpretation of the cross sections in multi-electron ion-atom collisions is a challenging task for theories. The main difficulty is caused by the many-body feature of the collision, involving the projectile, projectile electron(s), target nucleus, and target electron(s). The classical trajectory Monte Carlo (CTMC) method has been quite successful in dealing with the atomic processes in ion-atom collisions. One of the advantages of the CTMC method is that many-body interactions are exactly taken into account during the collisions on a classical level and in a nonperturbative manner. In this work CTMC simulations for a various collision systems are presented. Our results are compared with other calculations and experimental results.

Az atomi ütközések tanulmányozásának egyik alapvető részét képezi az ütközés során emittált elektronok teljes, valamint energia- és szög szerinti differenciális hatáskeresztmetszeteinek a vizsgálata. Az elmúlt évtizedekben különösen nagy hangsúlyt kaptak azon folyamatoknak a vizsgálatait, amelyek során a kirepülő elektron állapotára mind a célatom, mind a lövedék tere jelentős hatással voltak. A klasszikus modellek az összetett rendszerek időfejlődésének leírására a kezdetektől napjainkig igen hatékonyak bizonyultak. A jelenlegi munkában a klasszikus pályájú Monte Carlo (Classical Trajectory Monte Carlo, CTMC) módszert fogom alkalmazni számos ütközési rendszer hatáskeresztmetszeteinek bemutatására.

A CTMC számításokat kezelhetjük úgy is, mint *elméleti kísérletet*, ahol a mérési körülményeket a lehető legpontosabban igyekszünk figyelembe venni. A CTMC módszer az ütközésben résztvevő részecskékre vonatkozó

klasszikus mozgásegyenletek numerikus megoldásán alapszik. Természetesen ilyen módon az ütközés kvantumos (hullám) jellege csak nagyon korlátozottan, bizonyos modellfeltevésekkel vehető figyelembe. Ugyanakkor a CTMC nagyon alkalmas arra, hogy egy adott ütközés legfőbb jellegzetességeit megértsük. A kvantummechanikai leírásmódokkal összehasonlítva fontos megjegyezni, hogy a CTMC jelenleg a leggyakrabban alkalmazott elméleti módszer azokban az esetekben, amikor a többrészecke probléma perturbatív módon nem kezelhető, természetesen szem előtt tartva annak korlátait.

Az általánosított Berggren-reprezentáció használata magszerkezet számolásban

Use of Generalized Berggren-representation in Nuclear Structure Calculation

Tamás VERTSE^{1,2,3}, Rodolfo IDBETAN^{3,4}, Roberto J. LIOTTA³,
Nicolae SANDULESCU^{3,5}

¹Institute of Nuclear Research of the HAS, (ATOMKI) Debrecen, Hungary

²University of Debrecen, Faculty of Informatics, Debrecen, Hungary

³Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden

⁴Departamento de Fisica, FCEIA, UNR, Rosario, Argentina

⁵Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucharest, Romania

The generalized Berggren-representation is formed from bound, anti-bound, resonant and scattering sets of single particle wave functions. The resonances have discrete complex energies and the scattering states are taken from a contour on the complex energy-plane. We used this basis to build the multiparticle wave functions of exotic nuclei with halo structure in a shell model approach.

Az atommag, mint kvantummechanikai soktestrendszer állapotfüggvényét a héjmodellben a mag nukleonjainak egyrészcseke-függvényeiből építjük fel. Az egyrészcseke-függvények leírják, hogy a kiszemelt nukleon hogyan mozog a többi nukleon hatását leíró átlagtérben. A szokásos héjmodell kötött egyrészcseke-függvényekből építkezik. A radioaktív nyalábú gyorsítókkal sok új, alig kötött vagy hamar elbomló atommagot lehet előállítani. Ezek elméleti leírásában a szórás állapotokat is figyelembe kell venni. Míg a kötött állapotok diszkrét, negatív energiákkal, a szórások folytonos pozitív energiaspektrummal ún. kontinuummal rendelkeznek. Mindkét fajtájú egyrészcseke-állapot energia-sajátértéke valós, ahogy azt a kvantummechanika megkívánja.

A Berggren-reprezentáció az egyrészcseke-állapotokat kibővíti a diszkrét, komplex energiájú rezonanciákkal és a kontinuumot is egy komplex energiájú kontúrról veszi. Ily módon a rezonanciákat valós energiájú szórás állapotokból készült hullámcsomag helyett egyetlen komplex energiájú bázisállapottal írja le.

Az általánosított Berggren-reprezentáció olyan teljes rendszer, amelyben az előbbi állapotok mellett diszkrét, negatív energiájú antikötött, másnéven

virtuális bázisállapot is szerepel. A virtuális állapot a nem-fizikai energiasíkon fekszik és természetesen nem fizikai állapot, hanem az egyrészesceke szórási mátrix pólusához tartozó megoldása az egyrészesceke radiális egyenletnek.

Elsőként használtunk ilyen egyrészesceke bázist, amit könnyű, egzotikus atommagok, a neutronglóriával rendelkező ^{11}Li és az eddig még kísérletileg nem megfigyelt ^{72}Ca szerkezetének héjmodellbeli leírására alkalmaztunk (IdBetan, et al., Physics Letters B584, 48 (2004)). Páratlan előnye ennek a reprezentációnak, hogy az antikötött pólus és a continuum hatása szeparálódik és külön-külön vizsgálható. Számolásaink azt mutatták, hogy az antikötött állapot járuléka destruktíven interferál a szórási állapotok járulékaival. Ellentétben a keskeny rezonanciákkal, amelyeknél a rezonancia mellett a komplex kontúr járuléka másodlagos és ezért gyakran elhagyható, az antikötött állapottal egy hasonló közelítés nem tehető meg.

Résztevők névsora

- Bondár Piroska** Terebesi és Genyétei Általános Iskola
415300 Marghita (Margitta)
Str. Bujorului nr. 27.
Tel.: +40-259-362397
E-mail: bondarp@yahoo.com
- Borbély Sándor** BBTE, Fizika kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
Tel.: +40-722-243223
E-mail: borbelys@yahoo.com
- Csernai László** University of Bergen
Department of Physics and Technology
Theoretical and Computational Physics Section
5007 Bergen, Allégaten nr. 55.
Tel.: +47-55582802, Fax.: +47-55589440
E-mail: csernaiI@ift.uib.no
- Csörgő Tamás** MTA KFKI RMKI
1121 Budapest 114, Pf. 49
Tel./fax.: +36-1-3922222/33-94
E-mail: csorgo@sunserv.kfki.hu
- Deák Róbert** ELTE, TTK Anyagfizikai Tanszék
1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A
Tel.: +36-20-2630568
E-mail: kokumetto@yahoo.ca
- Derzsi Aranka** BBTE, Fizika kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
Tel.: +40-744-695948
E-mail: aderzsi@phys.ubbcluj.ro
- Donkó Zoltán** MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet
1525 Budapest, Pf. 49.
Tel.: +36-1-3922222
Fax.: +36-1-3922215
E-mail: donko@sunserv.kfki.hu
- Ercsey-Ravasz Mária** BBTE, Fizika kar
400305 Cluj (Kolozsvár)
Str. Traian Grozăvescu nr. 6-8/7
Tel.: +40-745-369149
E-mail: ravaszmarek@yahoo.com
- Groma István** ELTE Anyagfizikai Tanszék
1028 Budapest, Achim A. u. 1.
Tel./Fax: +36-1-3722802
E-mail: groma@metal.elte.hu

- Hajnal Zoltán** Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet
1525 Budapest, Pf. 49.
Tel.: +36-1-3922224, Fax.: +36-1-392-2226
E-mail: hajnal@mfa.kfki.hu
- Jakab-Farkas László** Sapientia EMTE, Marosvásárhelyi Karok
540119 Tg. Mureş (Marosvásárhely)
Str. Lucafařurului nr. 1A/4
Tel.: +40-745-873844
E-mail: jflaci@ms.sapientia.ro
- Járai-Szabó Ferenc** BBTE, Fizika kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
Tel.: +40-744-426067
E-mail: jferenc@phys.ubbcluj.ro
- Karácsony János** BBTE, Fizika Kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
E-mail: csonyi@phys.ubbcluj.ro
- Kovács Katalin** BBTE, Fizika kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
Tel.: +40-745-653459
E-mail: kkovacs@phys.ubbcluj.ro
- Köllő Gábor** EMT
400750 Cluj (Kolozsvár)
C.P. 1-140.
Tel./fax.: +40-264-590825
E-mail: emt@emt.ro
- Libál András** University of Notre Dame
225 Nieuwland Science Hall
Notre Dame, IN 46556
E-mail: andras.libal@gmail.com
- Nagy László** BBTE, Fizika Kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
Tel : +40-741-146221
E-mail: lnagy@phys.ubbcluj.ro
- Néda Zoltán** BBTE, Fizika Kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
E-mail: zoli.neda@gmail.com
- Palla Gergely** ELTE TTK Biológiai Fizika Tanszék
1117 Budapest, Pázmány P. stny. 1/A
Tel.: +36-1-3722768 , Fax.: +36-1-3722757
E-mail: pallag@angel.elte.hu

- Péter András Ede** Kisiratosi Általános Iskola
310362 Arad (Arad), Str. Poetului nr. 47.
Tel.: +40-257-289472
E-mail: ede@k.ro
- Póra Katalin** BBTE, Fizika Kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
Tel.: +40-741-405034
E-mail: kpora@phys.ubbcluj.ro
- Ravasz Erzsébet** Los Alamos National Laboratory
4118 High St. Thorndike, MA 01079
Tel./Fax.: +1-413-283-4663
E-mail: erzsoravasz@gmail.com
- Ravasz József** Mikes Kelemen Líceum
530090 Sf. Gheorghe (Sepsiszentgyörgy)
Str. Lăcrimioarei nr. 18/42/B/14
Tel.: +40-367-405972
E-mail: ravaszj@mikes.educv.ro
- Rend Erzsébet** Margittai Általános Iskola
415300 Marghita (Margitta)
Str. Crinului nr. 5/E/6
Tel.: +40-259-364523
E-mail: e.rend@computer.org
- Szász Ágota** Bolyai Farkas Elméleti Líceum
540064 Tg. Mureş (Marosvásárhely)
Str. Bolyai nr. 3.
E-mail: agota@bolyai.ro
- Tóth István Ferenc** BBTE, Fizika Kar
400084 Cluj (Kolozsvár)
Str. Kogălniceanu nr. 1.
Tel.: +40-744-232460
E-mail: itoth@phys.ubbcluj.ro
- Tőkési Károly** MTA, ATOMKI
4026 Debrecen, Bem tér 18/c
Tel.: +36 52-509200, Fax.: +36 52-416181
E-mail: tokesi@atomki.hu
- Vallasek István** Sapientia EMTE, Csíkszeredai Karok
530104 Miercurea Ciuc (Csíkszereda)
P-ța Libertății nr. 1
Tel.: +40-721-244834
E-mail: vallasekistvan@sapientia.siculorum.ro
- Vertse Tamás** MTA, ATOMKI
4026 Debrecen, Bem tér 18/C
Tel.: +36-52-509231, Fax.: +36-52-416181
E-mail: vertse@atomki.hu

Hasznos információk

Regisztráció

November 2., 18.⁰⁰ – 20.⁰⁰

a Hotel Universitas halljában (Str. Pandurilor u. 7.)

November 3., 9.³⁰ – 12.⁰⁰, 15.⁰⁰ – 17.⁰⁰

a BBTE Központi Épületének II. emeletén. (Str. M. Kogălniceanu u. 1.)

November 4., 8.⁴⁵ – 12.⁰⁰

a BBTE Központi Épületének II. emeletén. (Str. M. Kogălniceanu u. 1.)

Előadások helyszíne

BBTE Központi Épületének II. emeletén található Augustin Maior előadóterem

Szálláshelyek

Hotel Universitas (Str. Pandurilor u. 7.)

Bethlen Kata Diakóniai Központ (Str. Ponorului u. 1.)

Étkezések

A reggelit mindenki a szálláshelyén fogyasztja el. Az informális fogadás a Hotel Universitas éttermében zajlik. (Str. Pandurilor u. 7.)

A pénteki és szombati ebéd, illetve a pénteki állófogadás a Piramis étteremben zajlik. (Str. E. de Martonne u. 1.)

Kirándulás

Útvonal: Kolozsvár – Torda – Torockó és vissza.

Hasznos telefonszámok

Magyar Főkonzulátus, Kolozsvár
Konferencia titkárság

Tel.: 0264-596300
mobil: 0744-783237

Taxi

Diesel Rapid

0264-946

Diesel Taxi

0264-953

Nova Taxi

0264-949

Terra Fan

0264-944

Tartalomjegyzék – Content

Atomok (molekulák) fotoionizációja során jelentkező rezonanciahatások Resonance Effects in the Photoionization of Atoms (Molecules) <i>BORBÉLY Sándor, NAGY László</i> _____	8
Relativisztikus számítógépes folyadék dinamika és moduláris modellezés Relativistic CFD and Multi Module Modeling <i>CSERNAI László P.</i> _____	10
2005 vezető eseménye a fizikában: Folyadék volt a korai Világegyetem Top Physics Story 2005: The Early Universe Was a Liquid <i>CSÖRGŐ Tamás</i> _____	11
A kinetikus Monte Carlo módszer alkalmazása vékonyrétegekben kapott mintázatok tanulmányozására The Kinetic Monte Carlo Method for Reproducing Patterns in Thin Layer Growth <i>DEÁK Robert, NÉDA Zoltán</i> _____	12
Töltött részecskék mozgásának szimulációja ECR ionforrások esetén Simulation of Charged Particles' Motion in ECR Ion Sources <i>DERZSI Aranka, BIRI Sándor, FEKETE Éva, IVÁN István</i> _____	13
Részecskeszimulációs módszerek alkalmazása az alacsonyhőmérsékletű plazmafizikában Application of Particle Simulation Methods in Low-temperature Plasma Physics <i>DONKÓ Zoltán</i> _____	14
Analogikái celluláris számítógépek – egy új paradigma a számítástechnikában Analogic Cellular Computers – a new paradigm in information technology <i>ERCSEY-RAVASZ Mária, ROSKA Tamás, NÉDA Zoltán</i> _____	16
Modern módszerek a molekuladinamikában Modern methods in molecular dynamics <i>GROMA István</i> _____	17
Teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek számítása félklasszikus, impakt-paraméter közelítésben Calculation of Fully Differential Cross Sections with Semi-classical, Impact Parameter Method <i>JÁRAI-SZABÓ Ferenc, NAGY László</i> _____	18
Rendezetlenség által keltett fázisátalakulás egy rugó-fal típusú mágnesezési modellben Disorder-induced Phase Transition in a Spring-block Type Magnetization Model <i>KOVÁCS Katalin, NÉDA Zoltán</i> _____	20

Kolloid rendszerek dinamikája, egyenirányítása és feldarabolódása villogó optikai szubsztrátumokon Dynamics, Rectification, and Fractionalization for Colloids on Flashing Substrates <i>A. LIBÁL, C. REICHHARDT, B. JANKÓ, C.J. OLSON REICHHARDT</i> _____	22
Klaszterezés és fázisátalakulás frusztrált hálózatokban Coalition Formation and Phase Transition in Frustrated Network <i>NÉDA Zoltán, RAVASZ Mária, FLORIAN Răzvan, LIBÁL András, GYÖRGYI Géza</i> _____	23
A természet és a társadalom komplex hálózataiban található átfedő csoportosulások feltárása Uncovering the Overlapping Community Structure of Complex Networks in Nature and Society <i>PALLA Gergely, DERÉNYI Imre, FARKAS Illés, VICSEK Tamás</i> _____	25
Az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszet tanulmányozása H_2 molekula esetében Study of Ionization Differential Cross Section in Case of H_2 Molecule <i>PÓRA Katalin, NAGY László</i> _____	27
Hálózatok a fehérje-láncok vizsgálatában Protein Folding Networks <i>RAVASZ Erzsébet, TOROCZKAI Zoltán, G. GNANAKARAN</i> _____	29
Optikai Ping-Pong...., vagy a fény sebességének a számítógépes mérése Optical Ping-pong... or the Measurement of the Speed of Electromagnetic Waves with Computers <i>SZÁSZ Ágota, NÉDA Zoltán</i> _____	30
Molekulák pozitronnal történő ionizációja Ionization of Molecules by Positron Impact <i>TÓTH István, Radu I. CAMPEANU, Vasile CHIȘ, NAGY László</i> _____	32
Atomi ütközési folyamatok tanulmányozása klasszikus pályájú Monte Carlo módszerrel Investigation of Atomic Collisions within the Framework of the Classical Trajectory Monte Carlo Method <i>TÓKÉSI Károly</i> _____	34
Az általánosított Berggren-reprezentáció használata magyszerkezet számolásban Use of Generalized Berggren-representation in Nuclear Structure Calculation <i>Tamás VERTSE, Rodolfo IDBETAN, Roberto J. LIOTTA, Nicolae SANDULESCU</i> _____	36

