

A STATISZTIKUS ATOMMODELL ÉS A HULLÁMMECHANIKA KÖZTI KAPCSOLAT

GOMBÁS PÁL r. tag

Előadta az 1954. június 17-én tartott nyilvános osztályülésen

A statisztikus atommodell és a hullámmechanika közti kapcsolatot először *Dirac*, majd *Brillouin* tették vizsgálat tárgyává. *Dirac* megmutatta, hogy az atomot a sajátfüggvények helyett az u, n sűrűségmatrixszal lehet leírni és erre egy u, n mozgásegyenletet vezetett le. Ha a térbeli és impulzuskoordináták közti felcserélési relációktól eltekintünk és csak azt vesszük figyelembe, hogy a fázistér h^3 nagyságú elemi cellájában legfeljebb két elektron foglalhat helyet, akkor a hullámmechanikai Hartree, ill. Hartree—Fock-egyenletekből a statisztikus Thomas—Fermi, ill. Thomas—Fermi—Dirac-egyenlet adódik. *Dirac* ebben a dolgozatában tehát nemcsak egy igen lényeges oldalról világítja meg a statisztikus atommodell és a hullámmechanika közti kapcsolatot, hanem le is vezeti a statisztikus alapegyenleteket, ill. legalább is azok egy részét. *Brillouin* főképpen a hullámmechanikai Wentzel—Kramers—Brillouin-féle közelítő eljárás alapján teszi vizsgálat tárgyává az említett kapcsolatot. *Fényes* szintén a Wentzel—Kramers—Brillouin módszer alapján vizsgálja meg a statisztikus atommodell és a hullámmechanika közti kapcsolatot és egy igen egyszerű módon sikerül levezetnie nemcsak a Thomas—Fermi-egyenletet, hanem a bővített egyenleteket is.

Itt szeretném megemlíteni — jóllehet nem tartozik szorosan előadásom tárgyához —, hogy *Gáspár* a hullámmechanika és a statisztikus elmélet közti kapcsolatot felhasználta a Hartree és Hartree—Fock módszerek igen nagyfokú egyszerűsítésére, ill. self-consistent field-potenciálok és sűrűségeloszlások előállítására és ezzel ezeket az igen nagy számolási munkát igénylő módszereket a speciális számológépekkel nem rendelkező fizikus számára is hozzáférhetővé tette.

Míg az említett szerzők a hullámmechanikából kiindulva közelítették meg a statisztikus atommodellét, én itt a fordított utat szeretném követni. Vagyis kiindulok a statisztikus alapegyenletből, ill. azok egyikéből és azt szeretném bizonyos szempontból párhuzamba állítani a hullámmechanikai Schrödinger-egyenlettel.

A továbbiak szempontjából lényeges, hogy említést tegyek egy a hullámmechanika és a statisztikus atommodell közötti kapcsolatáról, melynek lényege az, hogy a statisztikus atomelmélet alapján lehetségessé vált a Pauli-elvből származó betöltési elvnek teljesen betöltött kvantumállapotok esetén egy nem-klasszikus eredetű taszító erővel való helyettesítése, mely erő egy

egyszerű alakú potenciállal rendelkezik. Ezt a potenciált egy régebbi dolgozatomban levezettem és erről akadémiai előadásaimban többször szó volt, úgyhogy nem szeretnék ismétlésekbe bocsátkozni és ezért csak röviden annyit említek meg, hogy a valenciaelektrons-quantumállapotai, vagyis gömb-szimmetrikus kvantumállapotok esetén ennek az erőnek a potenciálja a következő alakú

$$(1) \quad F = \gamma_F \varrho^{2/3},$$

ahol ϱ az elektronsűrűség és γ_F a következő univerzális állandó

$$(2) \quad \gamma_F = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} e a_0.$$

e a pozitív elemi töltés és a_0 a legkisebb Bohr-féle H-rádiusz. Ha az elektrosztatikus potenciált ezzel a járulékos potenciállal kiegészítjük, tehát ha a

$$(3) \quad \Phi = V + F$$

modifikált potenciált vezetjük be, akkor a valenciaelektronra vonatkozó azon mellékfeltételektől, amelyek szerint a valenciaelektron sajátfüggvényének az elektronokkal teljesen betöltött kvantumállapotok sajátfüggvényeire ortogonálisnak kell lennie, eltekinthetünk.

Ha figyelembe vesszük az elektronoknak kicserélődési kölcsönhatását, mely egy tipikusan kvantummechanikai effektus, akkor ehhez a potenciálhoz még egy további kis korrektív tag járul, mely a valenciaelektronnak az összes többi elektronnal való kicserélődési kölcsönhatásából származik és mely a statisztikus elmélet alapján szintén egy egyszerű potenciállal, mégpedig a következő kifejezéssel írható le

$$(4) \quad -\gamma_a \varrho^{1/3},$$

ahol γ_a a következő univerzális állandó

$$(5) \quad \gamma_a = \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} e.$$

Tehát a kicserélődési kölcsönhatás figyelembevételével a fenti modifikált potenciált még ezzel a taggal ki kell egészíteni.

A továbbiak szempontjából teljesen hasonlóan, mint a Fizikus Kongresszuson tartott előadásomban, célszerű kiindulni az atom statisztikus energiakifejezéséből, mely a következő tagokból tevődik össze: az eletrongáz Fermi-féle kinetikus energiája, az elektronoknak Weizsäcker-féle kinetikus energiája, az atomoknak az elektronokkal való elektrosztatikus kölcsönhatásából származó potenciális energiája, az elektronoknak egymás közötti elektrosztatikus kölcsönhatásából származó potenciális energiája és végül az elektronoknak a kicserélődési kölcsönhatásból származó energiája. Ezek az energiategok sorra a következők:

$$(6) \quad E_F = \gamma_F e \int \varrho^{5/3} d\tau,$$

$$(7) \quad E_W = \alpha_W \int \frac{(\text{grad } \varrho)^2}{\varrho} dv,$$

$$(8) \quad E_p^k = - \int \frac{Ze^2}{r} \varrho dv,$$

$$(9) \quad E_p^e = \frac{1}{2} \int V_e e \varrho dv,$$

$$(10) \quad E_a = -\gamma_a e \int \varrho^{4/3} dv,$$

ahol ϱ jelenti az elektronsűrűséget, V_e az elektronok elektrosztatikus potenciálját, Z a rendszámot, e a pozitív elemi töltést, r a magtól való távolságot és dv a térfogatelemet; α_W a következő univerzális állandó

$$(11) \quad \alpha_W = \frac{1}{8} e^2 a_0.$$

A statisztikus alapegyenlet az atom összenergiájának, tehát az

$$(12) \quad E = E_F + E_W + E_p^k + E_p^e + E_a$$

kifejezésnek az elektronsűrűség szerinti variációjából adódik a következő mellékfeltétellel

$$(13) \quad \int \varrho dv = N,$$

ahol N az elektronok száma az atomban és a mellékfeltétel azt fejezi ki, hogy a variációt úgy kell végrehajtani, hogy az atomban lévő elektronok száma ne változzon meg. A variációs elvből a következő alapegyenlethez jutunk

$$(14) \quad 4\alpha_W \mathcal{A}\psi - \frac{5}{3} \gamma_F e \psi^{7/3} + \frac{4}{3} \gamma_a e \psi^{5/3} + (V - V_0) e \psi = 0,$$

melyben V az atom teljes elektrosztatikus potenciálja, $\psi = \varrho^{1/3}$ és V_0 egy Lagrange-féle multiplikátor, melyet úgy kell meghatározni, hogy a fenti mellékfeltétel teljesítve legyen. Ennek az egyenletnek a bevezetésben említett általam végrehajtott korrekciója abban áll, hogy az egyenletben még egy tag lép fel, mely a magtól való távolságtól és a sűrűségtől függ és amelyet $g(\psi, r)$ -el fogok itt jelölni. Ezt a tagot, minthogy a továbbiakban nem lesz rá szükségünk, itt nem akarom részletezni, hanem csak azt említem meg, hogy ennek a tagnak az eredete — amint ezt a Fizikus Kongresszuson tartott előadásomon részletesen kifejtettem — abban keresendő, hogy az elektronok Fermi-féle és Weizsäcker-féle kinetikus energiájának egyszerű összeadása esetén az ember egy hibát követ el, mert az elektronoknak ún. saját kinetikus energiáját, amelyet úgy a Fermi-féle, mint a Weizsäcker-féle kinetikus energiatag tartalmaz, duplán számoljuk; az innen származó hiba korrekcióját adja a $g(\psi, r)$ tag.

A kinetikus sajátenergián a kinetikus energiának azt a részét értjük, mely a kinetikus energiából fennmarad, ha a kinetikus energiának a sajátfügg-

vények orthogonalizálásától származó részét levonjuk. Vagyis a kinetikus sajátenergia lényegében azzal a kinetikus energiával egyenlő, melyet csomópont nélküli sajátfüggvények esetén kapnánk.

Ezt a $g(\psi, r)$ korrekciót figyelembe véve az alapegyenlet a következőképpen alakul

$$(15) \quad 4z_w \Delta \psi - \frac{5}{3} \gamma_F e \psi^{7/3} + g(\psi, r) + \frac{4}{3} \gamma_a e \psi^{5/3} + (V - V_0) e \psi = 0.$$

Ha az

$$(16) \quad \varepsilon = -V_0 e$$

és

$$(17) \quad W = - \left(V - \frac{5}{3} \gamma_F \psi^{4/3} - \frac{1}{\psi e} g(\psi, r) + \frac{4}{3} \gamma_a \psi^{2/3} \right) e$$

jelöléseket vezetjük be, akkor ez az egyenlet átmege a következőbe

$$(18) \quad 4z_w \Delta \psi + (\varepsilon - W) \psi = 0.$$

A fentebbi alapegyenletnek ebből az alakjából azonnal nyilvánvalóvá válik ennek az egyenletnek a hullámmechanikai Schrödinger-egyenlettel való analógiája, ha figyelembe vesszük, hogy

$$(19) \quad 4z_w = \frac{1}{2} e^2 a_0 = \frac{h^2}{8\pi^2 m},$$

ahol h a Planck-féle állandó és m az elektron tömege. Azonban ellentétben a Schrödinger-egyenlettel, mely egyszerű problémák esetén lineáris, a fenti egyenlet, hasonlóan pl. a többtestprobléma Hartree—Fock-féle egyenleteihez, melyek tágabb értelemben vett Schrödinger-egyenletek, nem lineáris, ugyanis az elektron potenciális energiája W függ ψ -től.

Ez a W potenciális energia az, amely itt bennünket közelebbről érdekel. W kifejezésében a zárójelben levő rész vagyis a

$$(20) \quad \Phi' = V - \frac{5}{3} \gamma_F \psi^{4/3} - \frac{1}{\psi e} g(\psi, r) + \frac{4}{3} \gamma_a \psi^{2/3}$$

kifejezés, eltekintve az $\frac{1}{\psi e} g(\psi, r)$ korrekciós tagtól és a kicserélődési korrekciótól, figyelembe véve a $\psi = \rho^{1/2}$ relációt, azonos a bevezetésben említett és teljesen más úton levezetett modifikált potenciállal, Φ -vel. A korrekciós tag szerepe igen lényeges, mert ez gondoskodik arról, hogy a kinetikus sajátenergia ne legyen kétszer számítva.

A fentebbi (18) egyenlet alapján a problémát úgy is megfogalmazhatjuk, hogy meghatározandó az elektron sajátfüggvénye ψ és sajátenergiája ε a Φ' modifikált potenciáltérben azzal a mellékfeltétellel, hogy

$$(21) \quad \int \psi^2 dv = N$$

legyen.

A modifikált potenciált a teljes elektronsűrűséggel, tehát $\varrho = \psi^2$ -el kell képezni, amiből következik, hogy $-\Phi'e$ a legmagasabb energiaállapotban levő elektron modifikált potenciális energiája. Innen következik, hogy a (18) egyenlet a legmagasabb energiaállapotra vonatkozó Schrödinger-egyenlet és ε az ezen energiaállapotnak megfelelő energia. Röviden még rá szeretnék mutatni arra, hogy abban a körülményben, hogy a (18) egyenlet a legmagasabb energiájú állapot sajátfüggvényét szolgáltatja, mellyel a $\psi^2 = \varrho$ összefüggés alapján ki lehet számítani az atom elektronsűrűségét — ami első pillanatra meglepő — nincsen semmi ellentmondás, mert amennyiben az ember a statisztikus atomelméletben az elektronokhoz sajátfüggvényeket rendel, akkor az összes elektronokat ugyanazzal az átlagsajátfüggvénnyel, $\psi = \varrho^{1/2}$ -el írja le. Az, hogy ezt az átlagsajátfüggvényt melyik állapotra vonatkozó egyenletből határozzuk meg, természetesen mellékes; a részletesebb vizsgálat azt mutatja, hogy a legegyszerűbb az egyenlet felírása a legmagasabb energiájú állapotra.

Az eddigiekből azt a konkluziót vonhatjuk le, hogy a modifikált potenciál segítségével a statisztikus alapegyenletet egy Schrödinger-egyenlet alakjában azonnal felírhatjuk, sőt az alapegyenletet, ill. a statisztikus elmélet alapproblémáját egy Schrödinger-féle sajátértékproblémához analóg probléma gyanánt foghatjuk fel.

Ha a korrelációtól eltekintünk, a (18) alapegyenlet a legáltalánosabb statisztikus alapegyenlet. Érdekes megvizsgálni, hogy ebből az egyenletből, mely alakjára nézve egy Schrödinger-egyenlet, milyen elhanyagolással nyerhetők az egyszerűbb statisztikus modellek, a Thomas—Fermi—Dirac, ill. a Thomas—Fermi-modell alapegyenletei. A lényeges elhanyagolás mindkét esetben az, hogy a (18) alapegyenletben elhagyjuk a differenciáloperátort tartalmazó első tagot. Mivel ekkor elhanyagoltuk a Weizsäcker-féle kinetikus energiárészt — ha konzekvensek akarunk maradni — el kell hanyagolnunk a kinetikus sajátenergiára vonatkozó korrekciót, tehát a Φ' modifikált potenciálban az $\frac{1}{\psi e} g(\psi, r)$ korrekciós tagot, ami azt jelenti, hogy a Φ' helyébe a Φ lép. A kinetikus sajátenergiának a korrekciója ugyanis kizárólag annak a következménye, hogy a Fermi-féle kinetikus energia mellett még a Weizsäcker-féle kinetikus energiát is figyelembe vettük, ami által a kinetikus sajátenergiát duplán számítottuk. Ha tehát a Weizsäcker-féle tagot elhagyjuk, el kell hagynunk az $\frac{1}{\psi e} g(\psi, r)$ korrekciós tagot is. Ezekkel az elhanyagolásokkal tehát az alapegyenleteink a következő alakot öltik

$$\varepsilon - \Phi e = 0,$$

vagyis

$$\frac{5}{3} \gamma_F e \psi^{4/3} - \frac{4}{3} \gamma_A e \psi^{2/3} - Ve + \varepsilon = 0.$$

Ez éppen a Thomas—Fermi—Dirac-féle alapegyenlet. Ha az elektronok kicse-

rélődésétől eltekintünk, ami $\gamma_a = 0$ -nak felel meg, akkor pedig a következő összefüggéshez jutunk

$$\frac{5}{3} \gamma_{Fe} \psi^{4/3} - V e + \varepsilon = 0.$$

Ez a Thomas—Fermi-féle alapegyenlet. Mindkét esetben $\psi^2 = \rho$ a potenciállal egyszerűen határozható meg, ρ -t behelyettesítve a Poisson-egyenletbe, vagyis a

$$\Delta V = 4\pi e \rho$$

egyenletbe, adódnak a potenciáeloszlást meghatározó egyenletek.

Befejezésül még rá szeretnék térni arra, hogy a (18) alapegyenlet megoldása hogyan vihető keresztül. Mivel a potenciális energia függ ψ -től, az egyenletet egy Hartree-féle szukcesszív approximációs módszerrel lehet megoldani. Evégből kiindulunk egy ψ_1 közelítő megoldásból, melyet pl. a variációs módszerrel határozunk meg, ezzel kiszámítjuk a Φ' potenciált, ill. a W potenciális energiát. Ezt behelyettesítve a fenti (18) egyenletbe, ebből egy ψ_2 megoldást határozhatunk meg és így tovább. Az eljárást addig kell folytatni, míg a W -be behelyettesített és az egyenlethől nyert megoldások praktice megegyeznek egymással. A rendelkezésünkre álló gépekkel a megoldást így csak az atom belsejében tudtuk meghatározni, a magtól nagyobb távolságban a megoldást ezen az úton nem tudtuk előállítani. Ugyanis a megoldás a magtól nagyobb távolságban rendkívül érzékeny a kezdeti iránytangens értékére. Így pl. nehezebb atomok esetén a kezdeti iránytangens már több mint 10 jegy pontossággal kell megadni. Lényegesen kedvezőbb a helyzet, ha az ember az egyenlet integrálásánál nem a magtól, hanem $r = \infty$ -tól, vagyis praktice igen nagy r értékektől indul ki és meghatározza az itt számbajövő azon megoldást, amely keresztülmegy az origón. Így módon az egyenlet megoldását az összes nemesgázokra előállítottuk. Az így nyert elektronsűrűségek az atom belsejében a Hartree-féle elektronsűrűségeknek igen jó átlagértékét adják, nagy távolságban az atommagtól pedig praktice megegyeznek a Hartree-féle sűrűségekkel.

Végül még megemlítem, hogy a fentebb említett és a Fizikus Kongresszuson tartott előadásomon részletesen tárgyalt kinetikus energiakorrekción valószínűleg még egy csekély módosítást kell végrehajtani, ugyanis a kinetikus energiának radiális és azimutális részeinek a súlyfaktorai nem 1 és 1, amint én azt túlságosan klasszikus elképzelésekre támaszkodva feltételeztem, hanem rendre 1 és 2. Erre a napokban *Macke* a saopaoi egyetem fizika professzora volt szíves figyelmemet felhívni. Az eredményekben az atomok energiájában és sűrűségeloszlásában a súlyfaktorok megváltozása csak igen csekély változást fog előidézni, az energiánál a tapasztalattal való egyezés egész kevéssé rosszabbodni fog, de a sűrűségeloszlásban előálló változás a tapasztalattal való egyezést, pl. a diamágneses szuszeptibilitásoknál, lényegesen meg fogja javítani.

IRODALOM

- [1] P. A. M. DIRAC. Proc. Cambridge Phil. Soc. 26, 376, 1930.
 [2] L. BRILLOUIN, L'atome de Thomas—Fermi, Actualités scientifiques et industrielles, 160, Hermann u. Cie, Paris, 1934.
 [3] I. FÉNYES, Csillagászati Lapok (Budapest) 6, 49. 1943; Múzeumi Füzetek (Kolozsvár) III, 3, 1945.
 [4] R. GÁSPÁR, Acta Phys. Hung. 2, 151, 1952.

Műszaki Egyetem
 Fizikai Intézete, Budapest

HOZZÁSZÓLÁSOK

HOFFMANN TIBOR a fizikai tudományok kandidátusa:

Gombás akadémikus előadása alatt felmerült bennem egy probléma. A statisztikus modell alapegyenlete így írható:

$$\Delta\psi + f(\psi) + (V - V_0)\psi = 0,$$

ahol $f(\psi)$ ismert függvény. A fenti egyenlet a $\Delta\psi + (\varepsilon - V)\psi = 0$ Schrödinger-egyenlettel lett analógiába hozva.

Egy pontra hívom fel a figyelmet. A Schrödinger-egyenletben a V potenciál tartalmazza a ψ -t, de nem túl komplikált módon. Ezt *Gombás* professzor is kihangsúlyozta, s ez csak matematikai nehézséget okoz. Itt azonban a V komplikált módon tartalmazza a ψ -t, t. i. a Poisson-egyenlet összefüggésében. Így a $\Delta(V - V_0) \approx \psi^2$ Poisson-egyenlet tekintetbe vételével a következő bikvadratikus egyenletet nyerjük:

$$\Delta\left(-\frac{\Delta\psi}{\psi} - \frac{f(\psi)}{\psi}\right) \approx \psi^2.$$

Ez nem analóg a Schrödinger-egyenlettel. Viszont ugyanezzel az eljárással lehet az első tag elhagyásával a Thomas—Fermi—Dirac-egyenletet megkapni. Még kellene nézni, hogy milyen viselkedést mutat egy ilyen bikvadratikus egyenlet, mennyiben változtatja meg az egész probléma képét.

FÉNYES IMRE a fizikai tudományok kandidátusa:

Nem túl hosszan, de néhány szónál többet szeretnék mondani az itt szereplő kérdésekről. Az elhangzott előadás a két elmélet olyan szoros kapcsolatára mutat rá, amelynek fennállítására eddig gondolni sem mertünk. Ezáltal a statisztikus atommodell jelentősége óriási mértékben megnövekedett, amire külön rá kell mutatni.

A tárgyalt problémát — bár itt látszólag „tisztán“ elvi kérdéstről van szó — gyakorlati jelentősége teszi érdekessé. Ami különben egyáltalán nem is meglepő, hiszen a valóban elvi jelentőségű megállapítások szokták a legnagyobb gyakorlati hasznot is nyújtani. Azért tartom szükségesnek a statisztikus atommodellről szóló elmélet jelentőségének aláhúzását, mert egyrészt: néhány évvel ezelőtt még úgy látszott, hogy ez az elmélet előregedőben, kimerülőfélben van, másrészt azt is lehetett gondolni, hogy a számológépek tökéletesedése fokozatosan fölöslegessé teszi az ilyen relative egyszerű közelítő elméletet. Mind az elhangzott előadás, mind ennek közvetlen előzményei, azonban, az ellenkezőjét mutatják. Nyugodtan állíthatjuk, hogy a statisztikus atommodellnek nem fejlődése, hanem csupán fejlődésének első szakasza van

lezárulóban. És talán az igazán érdekes és szép eredmények még csak most következnek, ide számítva a jelenleg hallott előadás megállapításait is. Ezt szeretném most néhány konkrét ténnyel és néhány plauzibilisnek látszó megállapítással újabb oldalról is alátámasztani.

Ami a nagy teljesítőképeségű számológépek szerepét illeti, erről egész röviden a következőket lehet mondani. Az exakt hullámmechanikai és a közelítő jellegű statisztikus elmélet komplikáltságát tekintve, a viszony kb. olyan, mint a komplikált számoló automata és a logarléc viszonya. Csodálatos módon azonban a két elmélet hatóképességének viszonyában koránt sincs meg ez a nagy aránytalanság, sőt sokszor (bizonyos finomságoktól eltekintve) az arány szinte egy az egyhez. Ez pedig óriási jelentőségű tény, mely a fent említett egyik aggályt teljes mértékben megcáfolja. Ez a körülmény mutatja, amint azt *Gombás* professzor is hangsúlyozta, hogy itt nem csupán egy ad hoc elgondolásról van szó, hanem valójában a hullámmechanikai többtestproblémának igen jó közelítésű megoldásáról. A következő feladat nyilván az, hogy ezt a kapcsolatot ne csak kvalitatíve, hanem kvantitatíve is feltárjuk, és ezen az alapon hibabecslési eljárást lehessen megadni. A hullámmechanikából a statisztikus modell felé történő átmenet már régebben ismeretes, ezt az utat most *Gombás* professzor fordítva csinálta meg és ilyen módon kvalitatíve ekvivalenciát mutatott ki a két elmélet között. A visszafelé menő út ismeretének birtokában (tudván most már, hogy itt mit kell kihozni) az approximációs matematika eszközeivel bizonyára kvantitatíve is megfogalmazható a kapcsolat. Ezzel olyan elgondolás birtokába jutnánk, amely lényegesen egyszerűbb a hullámmechanikai elméletnél, viszont pontosság szempontjából vetekszik vele. Mint látjuk, a probléma jelentős, éppen ezért a statisztikus atommodellel foglalkozó kartársak felé is szeretném felvetni a kérdést, hogy a jövőben hathatósabb kooperációt kellene kifejteni.

A dolog szakmai részét illetően is rövid leszek. A kellő élességű hibabecslés igen nehéz feladat, de ha az elméleti fizikus ismeri a kiindulópontot és az eredményt, az áthidalást könnyebben meg tudja csinálni, mint akkor, ha a hídnak csak az egyik pillére ismeretes. A közelítő módszereket nagyobb biztonsággal lehet használni, ha tudjuk, hogy honnan induljunk el a közelítésnél. A *Gombás* akadémikus által talált analógia éppen ehhez nyújt segítséget. A statisztikus elmélet egyik hibája az volt, hogy az olyan elgondolásokat is szerepeltetett, amelyek bizonyos fokig idegenek a hullámmechanikától. A koordináta-impulzus-térbeli megfontolások olyan nézőpontot hoznak be, amelyeket nem lehet pontosan kvantitatíve megfogni. Úgy látszik azonban, hogy ennek (a hullámmechanikától idegen segédeszköz felhasználásának) van egy eliminálási lehetősége. A W. K. B. módszerből kell kiindulni, de némi módosítással.

A

$$(1) \quad \hbar^2 f'' + p^2 f = 0$$

egydimenziós Schrödinger-egyenlet sajátállapotai, mint ismeretes, visszavezethetők bizonyos nem-sajátállapotok szuperpozíciójára. (1) a

$$(2) \quad \varphi = \exp \frac{i}{\hbar} \int y dx$$

nem-sajátállapotot jellemző függvénnyel mindig kielégíthető és a φ meghatározása a

$$(3) \quad \frac{\hbar}{i} y' + y^2 - p^2 = 0$$

Riccati-egyenlet megoldására vezethető vissza. A W. K. B. módszer ebből a tényből indul ki és első közelítésben az exakt

$$(4) \quad f = \frac{a}{2} (\varphi^* + \varphi) = \frac{a}{u^{1/2}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int u \, dx + \delta \right)$$

sajátfüggvényt (u az y valós része) a következő függvénnyel helyettesíti

$$(5) \quad f \approx \frac{a}{p^{1/2}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int p \, dx + \delta \right).$$

Sajnos, a W. K. B. módszernek olyan hibái vannak, melyek eliminálása a szokásosan használt

$$(6) \quad y = \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^i y_i$$

sorfejtés felhasználása mellett nem lehetséges. (Erre ez év januárjában az Eötvös Társulatban tartott előadásomban már rámutattam.) Mindezt azért említem, mert azok az előző vizsgálataim, melyekről itt *Gombás* professzor is megemlékezett, a W. K. B. módszeren alapulnak és a módszer hibái szükségszerűen a ráépített vizsgálatokban is jelentkeznek. Egyszerűen arról van szó, hogy a (6) sor általában nem egzisztál, ti. y -nak $\hbar = 0$ -nál lényeges szingularitása van. Illusztrálásul (*Lentei Ilona* számításai alapján) itt egy konkrét példát mutatok. A H -atom alapállapotában u (az y valós része) a következő formájú:

$$u = \hbar \frac{\frac{A^2}{f^2}}{1 + \left(\int_{x_0} \frac{A^2}{f^2} \, dx \right)^2}.$$

ahol f a radiális sajátfüggvény (a normálási tényezőtől eltekintve):

$$f = r \exp - \frac{m e^2}{\hbar^2} r,$$

A és x_0 tetszőlegesek. (Meglépő, de így van.) Ebből konkrétan is látszik, hogy az

$$y = u - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \frac{u'}{u}$$

függvénynek a $\hbar = 0$ helyen lényeges szingularitása van és így a (6) sorfejtés nem egzisztál.

Szerencsére egzisztáló sorfejtés is található és ily módon a statisztikus atommodell alapegyenleteinek levezetése az eddiginél konzekvensbben elvégezhető. Ezzel kapcsolatban csupán arra a körülményre akarok rámutatni, hogy a modifikált W. K. B. módszer a klasszikus impulzus-fogalmát teljesen mellőzi. Így a statisztikus atommodell hullámmechanikai levezetésénél nem lép fel és nincs szükség a koordináta-impulzus-térbeli eloszlás alkalmazására sem, mely a hullámmechanikával inkompatibilis. A vizsgálatoknak még a kezdetén vagyok, de remélhető, hogy az elhangzott előadás útmutatásai alapján a nehézségek elháríthatók.

Végül a többi felszólalásban felmerült egyik problémához szeretnék hozzászólni. Az a körülmény, hogy *Gombás* professzor által talált analógiában olyan sajátfüggvény szerepel, mely nemcsak komplex nem lehet, de előjelet sem válthat (holott ez sajátfüggvényeknél lehetséges), úgy látom: nem jelent lényeges nehézséget. Ha *Gombás* által levezetett Schrödinger-egyenlet-szerű egyenlethez még hozzávesszük a kontinuitási egyenletet is, akkor a két egyenletből szabályszerű Schrödinger-egyenlet állítható elő, melynek megoldása már minden tekintetben szabályszerű hullámmechanikai sajátfüggvény. Az eljárás lényegében ugyanaz, amit fentebb a W. K. B. módszerben szereplő nem-sajátállapotokkal kapcsolatban említettem.

KALMÁR LÁSZLÓ lev. tag :

Azt a módszert, ahogyan *Gombás* akadémikus a statisztikus atommodell általa megjavított Thomas—Fermi—Dirac-féle alapegyenletéből levezetett egy, a Schrödinger-féle egyenlethez hasonló hullámegyenletet, nagyon érdekesnek tartom. Az, hogy a kapott hullámegyenlet nem teljesen azonos a Schrödinger-egyenlettel, természetes, hiszen a módszer lényegéhez tartozik hozzá az, hogy a kérdést, amely eredetileg, exakt módon tekintve, többelektron-probléma, egyelektron-problémára vezet vissza (éppen ebben áll az az egyszerűsítés, amit a statisztikus atommodell alkalmazása jelent). Az azonban meggondolkodtató, hogy a kapott hullámegyenlet nem lineáris, tehát a benne szereplő ψ függvény interferencia szempontjából nem úgy viselkedik, mint a Schrödinger-egyenlet ψ -függvénye. Azonban ez is természetes, hiszen az elektromos sűrűség négyzetgyökét vezette be *Gombás* akadémikus ψ -függvény gyanánt, holott az exakt ψ -függvénynek csak az abszolút értéke jelent — megfelelő értelmezés esetén — elektromos sűrűséget. Ezért felvetődik az a kérdés, nem kaphatunk-e hasonló eljárással lineáris, vagy legalábbis a lineáristól kevésbé eltérő hullámegyenletet, ha az elektromos sűrűség négyzetgyöke helyett ennek alkalmas, 1 abszolút értékű, a helytől függő komplex tényezővel való szorzatát vezetjük be ψ -függvény gyanánt.

GOMBÁS PÁL r. tag:

A *Hoffmann* osztályvezető által említett negyedrendű differenciálegyenletet már régebben megvizsgáltam, de abból csak általános következtetéseket sikerült levonnom a megoldásra vonatkozóan. Úgy vélem, hogy a differenciálegyenlet megoldása megfelelő gépi berendezések nélkül reménytelen feladat.

A Hartree—Fock-egyenletekben szereplő általánosított potenciálfüggvény is tartalmazza az ismeretlen függvényt, amint azt az előadásban már ki is emeltem, úgyhogy az előadásban említett analógia kétségtelenül fennáll.

A *Fényes* docens hozzászólásában felvetett gondolatokat nagyon érdekesnek tartom. Nagyon örvendetes volna, ha a statisztikus modell esetén tényleg sikerülne egy hibabecslést végezni, ami rendkívül súlyos feladat.

Igen melegen üdvözlöm *Fényes* docensnek azt az óhaját, hogy azok a fizikusok, akik a statisztikus atommodellel foglalkoznak, kerüljenek egymással szorosabb nexusba, aminek alapján a problémák eredményesebb megoldása várható.

Kalmár professzornak azt válaszolom, hogy az a körülmény, hogy a kapott egyenlet nem lineáris, az analógiát nem zavarja, mert pl. a Hartree—Fock-féle egyenletek sem lineárisak.