

A *Wikipédia* néhány soros ismertetéséből is kiderül, hogy *Gombás Pál* 1909. június 5-én született Selegszántón. Ez a születési hely azért érdekes, mert jelenleg Antau néven egy békés burgenlandi falu, aminek száz éve is csaknem kizárólag német és horvát anyanyelvű lakosai voltak. Ezért volt az, hogy Gombás, ha tehette, szívesen fordította a szót németre.

A Szabad Enciklopédiából ezen kívül annyi derül ki, hogy Kossuth-díjas akadémikus volt. akinek számos publikációja jelent meg *Az atom statisztikus elmélete és alkalmazásai* témakörben. Amennyiben erről a diszciplínáról nem hallott, az olvasók zöme számára bezárul a címszó ismertetése. Hogy ennél a szintnél tovább juthassunk, foglaljuk össze a tudnivalókat erről az időközben perifériára szorult területről.

A statisztikus atommodell

Az atomi rendszerek statisztikus elmélete egy a kvantummechanikai soktestprobléma közelítő módszerei közül. Pontossága számos gyakorlati esetben kielégítő, és az igen sok részecskéből álló rendszereknél is jól kezelhető marad.

A statisztikus elmélet alapja az a felismerés, hogy az atomi rendszerek – atomok, molekulák, kristályok – elektronjai abszolút zérus fokon vagy annak közvetlen környezetében levő, elektromos töltéssel bíró Fermi-gáznak tekinthetők. Az egyes elektronok az atommagok és a többi elektron elektrosztatikus potenciálterében mozognak úgy, hogy alapállapotú rendszer esetén a rendszer energiája a lehető legmélyebb legyen.

A *statisztikus elmélet* elnevezés mögött a kvantummechanikai soktestprobléma közelítő módszerei vannak, amelyek közös alapja a Thomas–Fermi-modell. A Thomas–Fermi-modellben a rendszer E energiáját kell előállítani a rendszer elektronsűrűségének funkcionálja formájában. Ezután az elektronsűrűség abból a feltételből állapítható meg, hogy a rendszer energiája a lehető legmélyebb legyen. A Thomas–Fermi-modell energiakifejezésének levezetése céljából feltételezzük, hogy a rendszer elektronjai az atommagok és az elektronok kiátlagolt elektrosztatikus potenciálterében mozognak. Ebben a közelítésben nem vesszük figyelembe a kicserélődési és korrelációs effektusokat.

Az egyes térfogatelemekben levő elektronokat abszolút zérus hőmérsékleten levő elektrongáznak tekintjük. A konstans potenciáltérben mozgó sok elektrontól álló elektrongáz kvantummechanikai vizsgálata alapján belátható, hogy a gáz kinetikus energiája az elektronsűrűség $5/3$ -ik hatványának integráljával arányos. Ennek alapján felírható az elektronrendszer teljes energiája, mint a mag és a többi elektron elektrosztatikus potenciális energiájának és a kinetikus energiának az összege.

Ennek az energiakifejezésnek a segítségével a vizsgált rendszer elektronsűrűségére egyszerűen kaphatunk közelítést. Ez a közelítés általában – a magokhoz igen közel eső és a magoktól igen távol fekvő térszerek kivételével – a hullámmechanikai úton számított elektronsűrűségeknek igen jó középértékét adja.

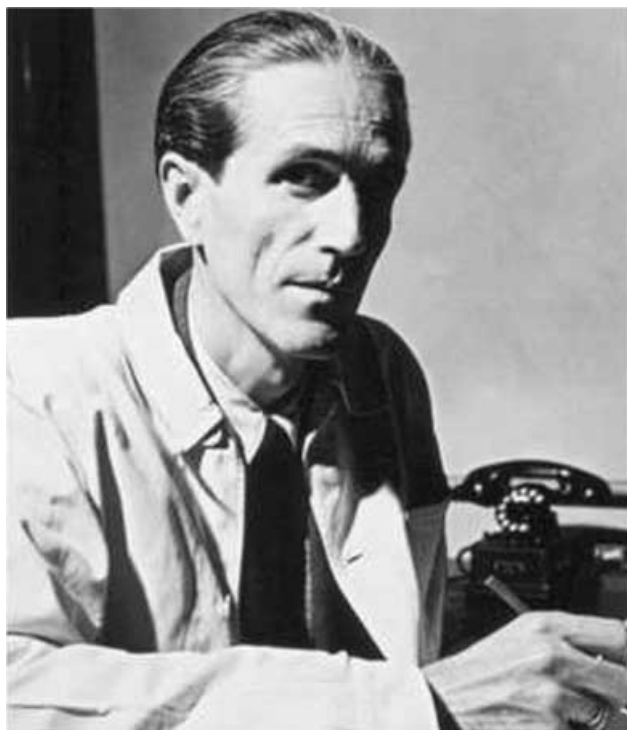
Az energiakifejezés bővíthető az elektronok kicserélődési és korrelációs energiájával is. Ehhez jelent segítséget a pszeudopotenciálok alkalmazása. A pszeudopotenciálok potenciálszerű kifejezések, amelyekkel az úgynevezett hullámmechanikai kicserélődési kölcsönhatást, a korrelációs kölcsönhatást és a Pauli-féle betöltési tilalmat igen leegyszerűsített módon, de mint a számítások eredményei mutatják, többnyire igen jó közelítésben helyettesíteni lehet. Vegyük sorra ezeket a pszeudopotenciálokat!

Annak következtében, hogy az atom teljes sajátfüggvénye az elektronok felcserélésével nyert megoldások lineáris kombinációja, az atom energiájában a klasszikus elméletben ismeretlen új tagok lépnek fel, amelyeket kicserélődési tagoknak nevezünk. Mivel az elektronok energiája általában a köztük fellépő kölcsönhatásból származik, beszélünk kicserélődési kölcsönhatásról, anélkül azonban, hogy ehhez bármilyen szemléletes képet fűznénk. Atomok valenciaelektronjaira vonatkozóan a statisztikus elmélet alapján még a 40-es évek elején sikerült kimutatni, hogy a kicserélődési kölcsönhatás potenciállal helyettesíthető, amely a valenciaelektronok nélküli elektronsűrűség köbgyökével arányos. Ezt úgy szemléltethetjük, hogy a párhuzamos spinű elektronok a kicserélődési kölcsönhatás következtében igyekeznek egymástól lehetőleg távol tartózkodni.

Ha az elektrosztatikus taszítást is figyelembe vesszük, akkor az elektronok e taszítás következményeként – függetlenül a spinek irányától – szintén igyekeznek egymástól lehetőleg távol elhelyezkedni. Tehát az elektronok a köztük működő elektrosztatikus taszítás következményeképpen sem mozognak egymástól függetlenül. Ezt nevezzük korrelációnak. A korreláció elsősorban antiparallel spinű elektronok között érezteti a hatását, parallel spinű elektronok esetében alig van szerepe, mert ott a kicserélődési kölcsönhatás dominál, amelyet a korreláció csak igen kis mértékben módosít. A korrelációs kölcsönhatást is helyettesíteni lehet közelítőleg pszeudopotenciállal.

A Pauli-féle betöltési tilalom teljesen betöltött kvantumállapotokra vonatkozik és elektronok esetében úgy szól, hogy két egymáshoz képest antiparallel spinű elektronnal betöltött kvantumállapotba (amely ebben az esetben teljesen betöltött kvantumállapotnak felel meg) még egy elektron nem léphet. Ki lehet mutatni, hogy a betöltési tilalmat taszító potenciállal lehet helyettesíteni.

E potenciálok alapján lehetségessé vált egy igen szemléletes és egyszerű fémelmélet kidolgozása,



amely az alkáli fémek és földalkáliák sok tulajdonságáról tisztán elméleti úton, empirikus vagy félempirikus paraméterek nélkül, tud számot adni.



Gombás Pál 1933-ban kapta meg matematika-fizika tanári diplomáját, és kezdettől nem élt a lehetőséggel, hogy gimnáziumban tanítson, hanem fizetés nélküli gyakornok lett a pesti tudományegyetem elméleti fizikai intézetében *Ortvy Rudolf* mellett. Maga választhatta a kutatási területet, és hogy a tudományos munkára fordított szabad időért mennyit képes éhezni. Munkájának eredményességét mutatja, hogy 1939 végéig külföldi folyóiratokban 19 cikke jelent meg, közülük 3 készült társszerzővel. A magyar nyelven megjelent írásokat is figyelembe véve 30 felett volt ekkor publikációinak száma, közöttük sokak által és gyakran idézett cikkek a statisztikus modell alapjairól és a pszeudopotenciálokról.

Ez a teljesítmény elegendő alap volt az éppen megüresedő szegedi elméleti fizikai tanszék elnyerésére. Külpolitikai okokból ez egy év múlva már kolozsvári professzorságot jelentett, majd újabb üresedés nyomán 1943-tól a budapesti Műegyetem fizika tanszékét.

A háború, majd az azt követő újjáépítés nem az elmélyült kutatómunka időszaka. Gombás Pál azonban sokat dolgozott és rendkívül eredményes volt. A nagy összefoglaló munka 1949-ben jelent meg Bécsben, a Springer kiadásában *Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen* címmel, amit majd csak az orosz kiadás után, 1955-ben követte a magyar fordítás, *Az atom statisztikus elmélete és alkalmazásai*.

Mindeközben elismertsége sajátosan alakult. 1946-ban az MTA levelező, majd néhány hónappal később rendes tagja lett. Ennek ellenére a kommunista hatalomátvétel időszakában *Szent-Györgyi Albert* segítsé-

gével az Egyesült Államokba távozott. Itt azonban nem fogadták azzal a megkülönböztetett tisztelettel, mint amihez már hozzászokott, ezért rövidesen hazatért.

Az imperialistákban csalódott Gombás tehát 1948-ban hazajött, helyzetében megerősödve vezette tovább a műegyetemi tanszékét, a Tudományos Akadémián pedig a vezetőségbe választották; tíz éven keresztül volt az Akadémia alelnöke. Még abban az évben megkapta a Kossuth-díj arany fokozatát, majd két évvel később ismét, 1951-ben pedig a Magyar Népköztársaság Érdemrendjét. A hivatalos tudománypolitika végre önmagával elégedetten ismert el egy nagy tudóst nagy tudósnak.

Gombás mérnökhallgatóknak tanította a fizika alapjait, minden érdeklődőnek a statisztikus atomelméletet. Létrehozta az MTA Elméleti Fizikai Kutatócsoportját, aminek haláláig igazgatója maradt. A tudományos iskola is hozzájárult, hogy az ötvenes évek közepén Gombás tekintélye magasán állt. Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat elnöki tiszte a szakma elismerése volt. 1956-ban tetőzött a nemzetközi megbecsülés a *Handbuch der Physik*ben megjelent 120 oldalas Gombás tanulmány, a *Statistische Behandlung des Atoms* hatására.

A pszeudopotenciálokról 1967-ben megjelent karcscú monográfiája is összefoglalás, de még inkább így van ez a társszerzőként jegyzett terjedelmes munkákkal, amelyekben a negyvenes években félretett előadás-vázlatok alapján állított össze majd kétezer oldalt *Kisdi Dávid* arról, ami a fizikában nélkülözhetetlen, illetve az elméleti fizikában széles körben használható. Különösen sikeres közös vállalkozásnak bizonyult a *Bevezetés a hullámmechanikába és alkalmazásaiba*, ami már majdnem királyi útnak számít ehhez a sokak által tervbe vett, de kevesek által elért tartományhoz. A három nyelven négy kiadást megért könyv sikere az ebben a témában könyvtárryira növekedett kínálat-hoz képest is impozáns volt.

Az összefoglalást és a közkinccs-tételt szolgálta a szakfolyóiratokban évente megjelent két-három közleményével is. A statisztikus magmodell bemutató sorozat öt részben jelent meg; a statisztikus elmélet eredményeit és lehetőségeit összefoglaló cikket helyezett el a *Review of Modern Physics*ben, és ami legalább ennyire nevezetes, a *Fizikai Szemle*ben. A pszeudopotenciálokról ugyancsak írt a szűkebb és tágabb szakmának, valamint a statisztikus modell teljesítőkéességét demonstrálta a héliumtól az uránig minden elemre elvégzett számítások közzétételével.

Eredményei és elismertsége ellenére 1971 májusában, 62 éves korában öngyilkos lett. Tettének oka ismeretlen – talán gyakori fejfájását érezte elviselhetetlennek. Csak remélhetjük, hogy helytálló *Marx György* következtetése, amelyre Gombás születésének 75. évfordulóján rendezett emlékülésen jutott: *Amikor eltávozott, befejezett művet hagyott hátra.*

Irodalom

1. Gombás Pál 1909–1971. A születésének 75. évfordulóján rendezett emlékülés előadásai. *Fizikai Szemle* 34 (1984) 443–457.
2. Füstöss László: Arcképvázlat Gombás Pálról. *Fizikai Szemle* 56 (2006) 127–131.