

A KVANTUMMECHANIKA KITELJESEDÉSE: A KVANTUM-SZÓRÁSELMÉLET MEGSZÜLETÉSE

Bencze Gyula
KFKI Részecske és Magfizikai Kutatóintézet

A kvantummechanika megszületése

A huszadik század elején nagy események kavarták fel a klasszikus fizika nyugalmas vizeit. Az egyik ilyen nagy esemény volt 1900. december 14-én *Max Planck* előadása Berlinben a Német Fizikai Társulatban, amelyben azzal a meglepő feltevessel állt elő, hogy a feketetest-sugárzás intenzitásának frekvencia szerinti eloszlása csak akkor írható le a tapasztalattal megegyezően, ha feltesszük, hogy a testek csak diszkrét csomagokban, kvantumokban sugározhatnak ki energiát, amely arányos a frekvenciával. Az itt fellépő arányossági tényezőt *batáskvantumnak* nevezte el. Öt évvel később *Einstein* az új hipotézis alapján sikerrel magyarázta meg a fényelektromos jelenség törvényszerűségeit. *Arthur Compton* klasszikussá vált kísérleteiben megmutatta, hogy a röntgensugarak elektronokon való szóródása ugyanolyan törvényszerűségeket követ, mint két részecske rugalmas ütközése. A kvantumhipotézis tehát néhány éven belül mind kísérletileg, mind elméletileg szilárd megalapozást nyert.

1913-ban *Niels Bohr* Planck hipotézisét kiterjesztette az atomokban kötött elektronok mechanikai energiájára is, és a Bohr-féle atommodell ennek alapján sikerrel magyarázta meg a hidrogénatom spektrumát, és reprodukálta a spektrumokat leíró korábbi empirikus formulákat.

1925-ben *Louis de Broglie* francia fizikus meglepő interpretációját adta a Bohr-féle kvantumpályáknak az úgynevezett vezérhullámok („pilot waves”) feltételezésével. De Broglie elképzeléséből kiindulva később *Erwin Schrödinger* dolgozott ki egy elméletet, amely a *hullámmechanika* elnevezést kapta. Ezzel egy időben *Werner Heisenberg* fiatal német fizikus ugyanazon jelenségek leírására egy szokatlan formalizmust, a nem kommutatív műveleteken alapuló *mátrixmechanikát* fogalmazta meg, amely ugyanolyan sikeresen írta le a tapasztalatot. A két német folyóiratban párhuzamosan megjelent két látszólag drámaian különböző elmélet alaposan meghökkentette az elméleti fizika világát mindaddig, amíg Schrödingernek nem sikerült bebizonyítania, hogy a két formalizmus teljesen ekvivalens. A két formalizmus közül a Schrödinger-egyenleten alapuló tárgyalás bizonyult a gyakorlatban használhatóbbnak, és ez a dominancia a szóráselméletek témakörének kivételével ma is fennáll.

Itt kell megemlíteni *Max Born* nevét, akiről igazságtalanul feledkezett meg az elméleti fizika világa, és akinek a hullámfüggvény statisztikus interpretációja köszönhető. Born számos, Heisenberggel közös publikációban dolgozta ki a kvantumelmélet szigorú ma-

tematikai alapjait, azonban a dicsőséget elsősorban a fiatal titán Heisenberg aratta le. *Wolfgang Pauli* munkássága a híres kizárási elvvel járult hozzá az elmélet teljességéhez. A koronát a műre *P.A.M. Dirac* tette fel, aki 1929-ben levezette híres relativisztikus hullámegyenletét, és végül egyesítette a kvantumelmélet és a relativisztikus invariancia követelményeit.

Magyar kutatóknak is fontos szerep jutott a kvantummechanika forradalmian új tudományterületének kimunkálásában. *Wigner Jenő*, aki a kvantummechanika megszületése idején Németországban tevékenykedett és Göttingenben *David Hilbert*, a híres matematikus asszisztense volt, hívta fel a figyelmet arra, hogy a szimmetriák, illetve az azokat matematikailag precízen tárgyalni képes csoportelmélet milyen fontos szerepet játszik a mikrovilág törvényszerűségeinek leírásában. E témából írt *Gruppentheorie und Ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren* (F. Vieweg und Sohn, Braunschweig, 1931.) című monográfiája egyike a legfontosabb kézikönyveknek.

A kvantummechanika precíz tárgyalása kiterjedt és bonyolult matematikai eszköztárat kíván meg. Így például a kvantumrendszerek állapotát leíró hullámfüggvények egy végtelen dimenziós vektortér, a Hilbert-tér elemei, és a fizikai mennyiségeket e térben ható operátorok reprezentálják. Ezen a területen az alapok lefektetése ismét csak magyar kutató nevéhez fűződik: *Neumann János Matematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, Berlin, 1932.) című monográfiája egyike a témával foglalkozó „alpműveknek”. Bár nem ebben az időben született, azonban hasonlóan nélkülözhetetlen kézikönyve a szóráselmélet művelőinek *Riesz Frigyes és Szőkefalvi Nagy Béla* (Frédéric Riesz, Béla Sz.-Nagy: *Leçons d'analyse fonctionnelle*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1952.) munkája, amely a múlt század második felében, a kvantum-szóráselmélet kiteljesedése idején volt a funkcionálanalízis kincsestára. Talán magyar sajátosság, de azért érdemes elgondolkodni azon, hogy mindhárom alpműnek évtizedeket kellett várnia, hogy világsiker után a szerzők anyanyelvén is megjelenhessen! Nos, ahogy mondani szokás: „habent sua fata libelli”.

A következőkben a kvantum-szóráselmélet fejlődését, a három- és N-test-probléma formalizmusának kialakulását tekintjük át, az azok által felvetett nemtriviális matematikai problémák (pl. Coulomb-kölcsönhatás, permutációs szimmetria) megoldására irányuló erőfeszítésekkel együtt. Külön hangsúlyt fektetünk a hazai kutatók által elért eredmények ismertetésére, mivel szerencsés módon az 1960-as évek végétől a KFKI-ban egy *Budapest group* néven emlegetett



Max Born és Ludvig Dmitrijevics Fagyjev

igen sikeres kutatócsoport működött (tagjai voltak *Doleschall Pál*, *Lovas István*, *Révai János* és a szerző), amelynek eredményeit a nemzetközi szakmai körök nagy figyelemmel kísérték.

Formális szóráselmélet – a Lippmann–Schwinger-egyenlet

A fizikai alap kutatások egyik legsokoldalúbb és legszélesebb körben használt eszköze a szórás kísérlet, amelyben különféle részecskék kölcsönhatását tanulmányozzák ütközési folyamataikban. Az atommagokra és a szubatomi részecskékre vonatkozó szinte valamennyi információ ilyen kísérletekből származik, amelyekben rugalmas vagy rugalmatlan szórás megy végbe az ütközésben résztvevő részecskék belső gerjesztésével, vagy az alkotórészek átrendeződésével. Ezért alapvető fontosságú a kvantumelmélet alkalmazása a folyamatok leírására. Ennek ellenére a kvantum-szóráselmélet csak a 20. század második felében indult gyors fejlődésnek. A fizikai alkalmazások mellett a felmerülő matematikai kérdések vizsgálatával ma már egy külön diszciplína, a matematikai szóráselmélet foglalkozik.

A szóráselmélet alapvető feladata a kéttest-probléma, amelynél két részecske egy rövid hatótávolságú potenciállal hat kölcsön, vagyis a rendszer Hamilton-operátora

$$H = H_0 + V,$$

ahol H_0 a kinetikus energia operátora, V pedig a kéttest-potenciál. A szabad, illetve a kölcsönható rendszer dinamikáját rendre a megfelelő Schrödinger-egyenlet írja le:

$$i \frac{d\Phi}{dt} = H_0 \Phi, \quad i \frac{d\Psi}{dt} = (H_0 + V) \Psi.$$

A kéttest-probléma úgynevezett egycsatornás rendszer, amelynél a teljes rendszer Hamilton-operátora csak egyfajta módon bontható fel egy szabad rendszer operátorára és az azt perturbáló kölcsönhatásra.

A kéttest-problémánál a megoldásokra vonatkozó szórási határfeltétel (aszimptotikus feltétel) a következőképpen fogalmazható meg:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\Psi(t) - \Phi(t)\| = 0.$$

A szórási határfeltétel valójában azt követeli meg, hogy a megoldás közelítsen a szabad mozgást leíró megoldáshoz mind az ütközési folyamat előtt, mind pedig utána, amikor a részecskék közötti kölcsönhatás a rövid hatótávolság miatt elhanyagolhatóvá válik.

Sokcsatornás rendszerek esetén a rendszernek többféle kölcsönhatásmentes aszimptotikus állapota létezhet, ezek a teljes Hamilton-operátor különböző felbontásainak felelnek meg perturbálatlan rendszerre és kölcsönhatásra:

$$H = H_a + V^a = H_b + V^b = H_c + V^c \dots \text{ stb.}$$

A formális szóráselmélet a rendszert jellemző operátorokra fontos összefüggéseket állapít meg. Így például a rendszerben lezajló összes szórásfolyamatra vonatkozó információ jelen van a szórásoperátorban, illetve a tranzitoperátorban, vagy ekvivalens módon a rendszer rezolvens operátorában. A szórást jellemző operátorok megfelelő mátrixelemei pedig közvetlenül szolgáltatják az egyes ütközési folyamatokat jellemző fizikai mennyiségeket. Meg kell azonban jegyezni, hogy a „formális” jelző nem véletlen, az elmélet ugyanis nem specifikálja a sokcsatornás rendszerek tulajdonságait, valamint nem ad útmutatást arra, hogy a hullámfüggvényt vagy a tranzitoperátort meghatározó Lippmann–Schwinger-egyenlet milyen feltételek mellett és hogyan vezet a probléma teljes megoldásához.

A szóráselmélet széleskörű alkalmazásra talált az atomfizikai és magfizikai szórásfolyamatok tárgyalásában, azonban ezek szinte kizárólagosan a Born-közelítésen alapultak, azaz a fizikailag fontos mátrixelemek meghatározásánál a releváns Lippmann–Schwinger-egyenlet megoldását az első iterációval helyettesítették.

A közelítő módszerek alkalmazhatóságát némileg javították a különféle módosítások, például a torzított hullámú Born-közelítés (*distorted wave Born approximation*, DWBA) vagy a csatolt csatornás Born-közelítés (CCBA). A lényeges azonban az, hogy valamennyi módszer „kéttest-módszer”, azaz az erőfeszítések a kéttest-dinamika minél pontosabb figyelembe vételét célozzák, minden egyéb folyamat, például a legegyszerűbb háromtest-folyamat, az ütköző részecskék átrendeződése, csak perturbációként kezelhető. Ez a helyzet csak *Fagyjev* úttörő munkássága nyomán változhatott meg, amikor lehetőség nyílt a három-, illetve soktest-dinamika hatásainak figyelembe vételére is.

Háromtest-probléma, a Fagyjev-módszer

A formális szóráselmélet egyik legfontosabb eredménye, hogy a Schrödinger-egyenletet egy ekvivalens integrálegyenlettel helyettesíti, amelybe a szórási határfeltétel eleve beépítésre kerül. Gondot jelent azonban, hogy kettőnél több részecske esetére ez az

egyenlet nem Fredholm-típusú, azaz magja még komplex energiáknál is szinguláris, ezért folytonos spektruma van – más szóval nem teljesül az úgynevezett Fredholm-alternatíva. A mag tulajdonságait iterációval sem lehet javítani, mivel annak során a szingularitást okozó „disconnected” tagok újratermelődnek. Ezek a tagok azért lépnek fel, mert a részecskék közti kéttest-kölcsönhatások a harmadik részecske energiáját és impulzusát megőrizve a magban szinguláris δ -függvények megjelenéséhez vezetnek.

A kiutat a matematikai nehézségekből Fagyejev találta meg [1], aki a Lippmann–Schwinger-integrálegyenlet magjában a szinguláris tagokat elkülönítve, azok járulékát invertálva a szingularitást megszüntette. Az eredményként adódó csatolt egyenletek magja már jól viselkedik és többszöri iteráció után kompakttá válik egy megfelelően választott függvényterben.

Az egyenletekről Fagyejev monográfiájában kimutatta, hogy ekvivalensek a Schrödinger-egyenlettel, megoldásaik azonosak, továbbá, hogy az egyenletek homogén és inhomogén változatának nem lehetnek egyszerre megoldásai. Fagyejev munkája megtermékenyítette a témakört, az érdeklődés azonnal megnövekedett a három- és soktest-probléma iránt, és egyre növekvő számban jelentek meg a témakörrel foglalkozó cikkek.

Az a körülmény, hogy Fagyejev eredményei nyomán rendelkezésre álltak a háromtest-probléma megoldását szolgáltató dinamikai egyenletek, gyökeres szemléletváltást eredményezett a szóráselmélet alkalmazása terén is. Míg korábban az ütközések leírásában szinte kizárólag csak kéttest-módszereket alkalmaztak, most új lehetőségek nyíltak, és ezek kihasználásában a magyar kutatók is élen jártak. *Beregi Péter*, Lovas István és Révai János kidolgozta a rezonanciaszórás egy egzaktul megoldható háromtest-modelljét, Lovas István és *Dénes Ervin* a küszöbeffektusokat tanulmányozta egy szintén egzaktul kezelhető háromtest-modell keretében. Doleschall Pál és Révai János a háromtest-egyenletek numerikus megoldásának technikáját, azon belül az iterációs módszer alkalmazhatóságát vizsgálta.

Ugyanebben az időben terelődött a figyelem a hiperszférikus függvények, vagy más elnevezéssel a K-harmonikusok alkalmazására a háromtest-probléma megoldásánál. Ezek a függvények a gömbfüggvények általánosításának feleltek meg magasabb dimenziójú terekben, és igen alkalmasnak bizonyultak sokrészecskefüggvények leírására. Nem-triviális technikai problémát jelentett azonban a bázisfüggvények transzformációja különböző Jacobi-koordinátarendszerek között. A probléma matematikai megoldása Révai János és francia kollégája, *Jacques Raynal* nevéhez fűződik, akik analitikus alakban megadták a transzformációs együtthatókat, ezeket a szakirodalom azóta *Raynal–Révai-koefficiensek* néven emlegeti.

Doleschall Pál a háromnukleon-szórásproblémára alkalmazta a Fagyejev-egyenleteket, és a numerikus megoldás meghatározására egy óriási számítógépes programot írt (*Doleschall code*), amellyel azonnal a

szakterület élvonalába került. Fagyejev munkája nyomán a háromtest-egyenleteket a konfigurációs térben is megfogalmazták, az eredmény érdekessége abban rejlik, hogy ezekhez a differenciálegyenletekhez nem lehetett volna eljutni a probléma Schrödinger-egyenletéből.

A kvantummechanikai N-test-probléma

Fagyejev eredményei nyomán a fejlődés felgyorsult, és a következő lépés kézenfekvő módon a módszer kiterjesztése volt néhánytest-rendszerekre, ami azonban korántsem volt triviális. A Fagyejev-egyenletek analogonja, amely a kéttest t-operátorokat tartalmazza a kölcsönhatások helyett, már a négytest-problémánál sem küszöböli ki a 6 egyenletből álló egyenletrendszer magjának szingularitását; a szingularitások részletesebb osztályozására van szükség. A módszert az N-részecske-rendszerre Fagyejev tanítványa, *O.A. Jakubovszkij* terjesztette ki [2]. Érdekes módon az orosz nyelven megjelent munkáról szélesebb körben csak Fagyejev 1968-as birminghami konferencián tartott meghívott előadásából értesülhetett a szakmai közösség.

A szingularitások osztályozásához szükség van a partíciók és partícióláncok fogalmának a bevezetésére. Az N-részecske-rendszer a_i , $i \geq 2$ partíciója az N-részecske felosztása i csoportra (fragmentumra, klaszterre). Ha egy a_k partíció úgy jön létre, hogy csoportjait további részekre osztjuk, akkor fennáll közöttük a reláció $a_k \subset a_i$. A partíciók egy $\alpha_i = (a_i, a_{i+1}, \dots, a_{N-1})$ sorozatát partícióláncnak nevezzük, ha rendelkezik a következő tulajdonsággal $a_i \supset a_{i+1} \supset \dots \supset a_{N-1}$. (Közbevetőleg fontos megjegyezni, hogy N objektum, esetünkben részecskék, partíciói egy kétműveletes absztrakt algebrai struktúrát, egy hálót alkotnak, amelyben a két művelet a közös rész képzése és az egyesítés. A háló félig rendezett struktúra, a rendezési reláció pedig a \subset szimbólummal jelölt tartalmazás.)

Mivel az a_{N-1} partíció egyértelműen meghatároz egy részecskepárt, azok indexelésére is használható. Hasonló módon a rendszer a_i partíciója egy aszimptotikus csatornát határozhat meg, amelyben i kölcsönhatásban nem álló fragmentum van jelen. Ezért minden partícióhoz hozzárendelhetünk egy N-részecske-rendszert, amelyben csak a közös fragmentumban lévő részecskék hatnak kölcsön. Ezen aszimptotikus csatorna Hamilton-operátora

$$H_a = H_0 + V_a,$$

a kölcsönhatás pedig

$$V_a = \sum_{a_{N-1} \subset a} V_{a_{N-1}}.$$

A magreakciók elméleti tárgyalásához legjobban illeszkedő formalizmust *Bencze* találta meg, az általa levezetett egyenletek csak a kétfragmentumos csator-

1. táblázat						
A csatolt egyenletek száma különböző formalizmusoknál az N részecskeszám függvényében						
	$N=3$	$N=4$	$N=5$	$N=6$	$N=7$	$N=8$
R	3	6	10	15	21	28
BRS	3	7	15	31	63	127
CG	4	14	51	202	876	4139
NY	3	18	70	325	651	1764
Y	3	18	180	2700	56700	1587600

N-részecske-formalizmusok:

R: Rosenberg, BRS: Bencze–Redish–Sloan, CG: Chandler–Gibson, NY: Narogyekij–Jakubovszkij, Y: Jakubovszkij

nák T-operátorait csatolják össze, minden egyéb folyamat T-operátora az előbbiekből kvadratúrákkal nyerhető [3]. Ezek az egyenletek speciális esetként tartalmazzák a háromtest-probléma AGS (Alt–Grassberger–Sandhas) egyenleteit, valamint a Sloan-féle négytest-egyenleteket. Ugyanezekre az egyenletekre jutott egy évvel később *E.F. Redish* is. Az egyenleteket az irodalomban ma Bencze- vagy Bencze–Redish–Sloan (BRS) egyenleteknek nevezik.

A különböző N-részecskeegyenletek gyakorlati alkalmazhatóságát nagy mértékben befolyásolja a csatolt egyenletek száma. Esetenként azonban a csatolt egyenletek számának meghatározása a különféle formalizmusokban egyáltalán nem triviális probléma. Az N-részecske-szóráselméletben fellépő kombinatorikai problémákat Bencze tárgyalta [4]. Érdekesként érdemes megemlíteni, hogy a csatolt Jakubovszkij-féle egyenletek száma megegyezik a N objektum partíciói által alkotott partíciós hálóban a láncok maximális számával, amely korábban nem volt leszámolva.

Igen tanulságos összehasonlítani a csatolt egyenletek számát N függvényében a különböző formalizmusoknál (1. táblázat).

Az N-részecske-formalizmus a konkrét alkalmazások mellett bizonyos szemléletbeli változásokat is hozott magával. A korábban használt közelítő módszerek az egzakt formalizmus alapján szilárdabb elméleti alapokat kaptak, valamint új közelítő módszerek is megszülethettek. Ennek megfelelően mind a csatolt csatornák módszere, mind pedig az úgynevezett effektív háromtest-modellek pontosabban megfogalmazhatók váltak az egzakt formalizmusnak köszönhetően. A mára már jórészt kiépített egzakt formalizmusról jó áttekintést ad Fagyejev és *Merkuriev* a témakört tárgyaló monográfiája.

A Coulomb-szórásprobléma

A kéttest Coulomb-probléma analitikus alakban megoldható, ezért a precíz matematikai tárgyalás nehézségei jó ideig nem kaptak megfelelő figyelmet. A szórás határfeltétel szerint nagy távolságokra a hullámfüggvény aszimptotikus alakjának a beeső síkhul-

lám és a szórt gömbhullám szuperpozíciójához kell közelítenie:

$$\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r},$$

ez azonban a végtelen hatótávolságú Coulomb-kölcsönhatás esetén nem teljesül, vagyis érvényét veszti az az egyszerű, intuitív fizikai kép is, amelyet a rövid hatótávolságú potenciálon való szórással társítunk. A probléma Schrödinger-egyenletének analitikus megoldásából a következő aszimptotikus kifejezés adódik:

$$\Psi_c(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z} + i\gamma \ln k(r-z)} + f_c(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}r - i\gamma \ln kr}}{r},$$

ahol γ a szokásos Coulomb-paraméter, $f_c(\theta)$ pedig a Rutherford-féle amplitúdó. A fizikai kép némi módosításával bevezethető a szórás amplitúdó és a differenciális hatáskeresztmetszet, a híres Rutherford-féle kifejezés. Az a körülmény, hogy a szórás amplitúdó zérus szögnel szinguláris, valamint nem definiálható totális hatáskeresztmetszet, már jelzi, hogy lényeges matematikai különbség van a véges hatótávolságú potenciálok és a Coulomb-kölcsönhatás fizikai tulajdonságai között.

West volt az első, aki felhívta a figyelmet arra, hogy Coulomb-potenciál esetén a kéttest-probléma Lippmann–Schwinger-egyenlete szinguláris, ezért az egyenlet módosításra szorul. A szinguláris tulajdonság abban mutatkozik meg, hogy a Coulomb szórás hullámfüggvény a homogén egyenletet elégíti ki, míg a Green-függvény az inhomogén egyenlet megoldása, azaz az egyenletre nem teljesül az úgynevezett Fredholm-alternatíva. Más szóval az egyenlet nem rendelkezik egyértelmű megoldással, és hasonló módosításra szorul, mint a háromtest Lippmann–Schwinger-egyenlet a Fagyejev-formalizmusban.

A Coulomb-szórás pontos matematikai tárgyalását *Dollard* dolgozta ki az időfüggő formalizmus keretében. Legyen H_c a Coulomb kéttest-probléma Hamilton-operátora:

$$H_c = H_0 + \frac{e_1 e_2}{r},$$

valamint legyen a Coulomb- és a „torzított szabad” propagátor rendre

$$W_c(t) = e^{-iH_c t}, \quad U(t) = e^{-iH_0(t)}.$$

Nyilvánvaló módon a „torzító tényező” úgy kell megválasztani, hogy a konvergencia feltétele teljesüljön.

Dollard hasonló módon bizonyította be, hogy sokcsatornás Coulomb-rendszerek esetére is definiálhatók mind a módosított csatorna hullámoperátorok, mind pedig a sokcsatornás rendszer szórásoperátora. Sajnos az időfüggő tárgyalásmód nem teszi lehetővé

a stacionárius formalizmusban N -test-integrálegyenletek levezetését.

A Fagyjev-egyenletek módosítását töltött részecskék jelenléte esetén elsőként *Noble* dolgozta ki, aki kihasználta azt a körülményt, hogy amennyiben csak két töltött részecske van a háromtest-rendszerben, a Coulomb–Hamilton-operátor rezolvense (Green-függvénye) analitikus alakban előállítható. Módosított egyenletei megőrizték a Fagyjev-egyenletek előnyös tulajdonságait. *Noble* ötlete nyomán *Bencze* a háromtest Coulomb-rezolvens egy csatornafüggő közelítését felhasználva bevezette a „csatorna torzítás közelítést” (*channel distortion approximation*, CDA), és lényegében Coulomb-torzított AGS-egyenletekre jutott. A CDA-közelítést később a BRS-formalizmus keretében az N -test-problémára is sikerült kidolgozni.

Azonos részecskék a szóráselméletben

Két részecske akkor azonos, ha összes fizikai tulajdonságuk megegyezik, és semmiféle megfigyelés nem képes megkülönböztetni őket. Ez a megkülönböztethetetlenség a kvantummechanikában egy többértelműséget, úgynevezett kicserélődési elfajulást (*exchange degeneracy*) eredményez, ha nem vezetjük be a szimmetrizálási posztulátumot: egy N azonos részecskét tartalmazó rendszer állapotai szükségképpen mind vagy szimmetrikusak vagy antiszimmetrikusak az azonos részecskék felcserélésével szemben. Az, hogy adott esetben szimmetria vagy antiszimmetria valósul meg, a részecske természetétől (spin) függ. Nyilvánvaló módon az azonos részecskékből álló rendszer Hamilton-operátora, valamint minden megfigyelhető mennyisége a részecskék minden permutációja esetén az előírt szimmetriával rendelkezik. Ezt a tényt a csoportelmélet nyelvén úgy szokás kifejezni, hogy az N azonos részecskékből álló rendszer minden fizikai állapota az S_N szimmetrikus csoport egydimenziós irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódik. Ez a követelmény természetes módon általánosítható többféle azonos részecskét tartalmazó rendszerekre.

Kötött állapotú problémák tárgyalásánál a részecskék azonosságának figyelembe vétele alapvetően csak technikai kérdés: a Schrödinger-féle sajátérték-feladatot az N -részecske Hilbert-tér megfelelő szimmetriájú alterében kell megfogalmazni. Ezekről a módszerekről könyvtárnyi szakirodalom áll rendelkezésre, azonban mindegyik módszer a szimmetrikus csoport elméletének kiterjedt használatán alapul.

Szórásproblémáknál ezzel szemben a permutációs szimmetria figyelembe vétele egyáltalán nem triviális feladat, mivel a szórás hullámfüggvény aszimptotikus alakja (szórás határfeltételek) nem rendelkezik a megkövetelt permutációs szimmetriával az azonos részecskék változóiban. A hagyományos eljárás szerint ilyenkor a problémát meg kell oldani megkülönböztethető részecskék esetére, majd utólag felösszegezni a fizikailag megkülönböztethetetlen csatornák

járolékát („a kicserélődési tagokat”) az egyes hatáskeresztmetszetekhez. Világos azonban, hogy ez az eljárás nem oldja meg az alapvető fizikai problémát, és az első Born-közelítés esetétől eltekintve a gyakorlatban nem alkalmazható.

A néhányrészecske-szórás egyes egzakt megfogalmazásaiban a permutációs szimmetria beépíthető a szórás integrálegyenletekbe. Ennek eredményeképpen a csatolt egyenletek – a folyamat fizikai leírásához szükséges mennyiségek – száma csökken. Ha N kicsi, az egyenletek szimmetrizálása „nyers erővel” (*brute force*) is elvégezhető. Három azonos részecske problémájánál *Lovelace* redukálta a Fagyjev-egyenleteket egyetlen egyenletre, a négytest-problémánál a 18 csatolt *Jakubovszkij*-féle egyenletet fáradságos munkával *Harczenko* és *Kuzmicsev* vezette vissza mindössze két csatolt egyenletre. N azonos részecske esetében azonban nyilvánvalóan elkerülhetetlen absztrakt algebrai módszerek használata.

Tetszőleges N számú azonos részecske szórásának első explicit tárgyalását csoportelméleti módszerekkel *Bencze* és *Redish* adta meg a BRS-formalizmus keretében. Mivel azonban a permutációs (*exchange*) szimmetria nem dinamikai természetű, explicit tárgyalása nem függhet az N -részecske-egyenletek szerkezetétől. Ez a várakozás beigazolódott, *Bencze* és *Redish* a módszert kiterjesztve az N -részecske-integrálegyenletek egy széles osztályára kidolgozta az azonos részecske szórás általános algebrai elméletét [5].

A fentebb ismertetett megfontolások azt bizonyítják, hogy megfelelő csoportelméleti és algebrai módszerekkel a rendszer permutációs szimmetriája a dinamikai egyenletekbe is beépíthető. Mivel ebben az esetben a fizikai állapot jellemzésére kevesebb mennyiség szükséges, a csatolt egyenletek száma természetes módon csökken. A csatolt egyenletek számának meghatározása azonban ebben az esetben is nemtriviális kombinatorikai probléma, a feladat az indexhalmaz ekvivalenciaosztályainak leszámllálása.

A matematikai alapossággal kiépített N -test-szóráselmélet tehát soha nem fogja átvenni az atommagreakciók tárgyalásánál alkalmazott különféle heurisztikus modellek szerepét. A néhány nukleon-rendszerek tárgyalásánál jelenleg a négy nukleon-probléma vizsgálatára fordítanak nagy energiát, azonban itt sem lehet korlátlanul továbblépni nagyobb rendszerek felé.

Mindezen nehézségek ellenére fontos alkalmazást találhat az N -részecske-szóráselmélet a magreakciók elméleti tárgyalásában. Egy ilyen érdekes lehetőség a direkt magreakciók témakörében az úgynevezett „exchange mechanizmusok” vizsgálata. A hagyományos közelítő tárgyalásnál (pl. DWBA, CCBA) a kísérleti adatok interpretálásához szükség van egyes domináns reakciómechanizmusok figyelembe vételére. Az empirikus számításoknál azonban nem ismeretes az egyes mechanizmusokat leíró reakcióamplitúdók normalálása, illetve relatív súlya a hatáskeresztmetszetben. Az ilyen esetekben segítséget jelenthet az egzakt elmélet és az azon alapuló kombinatorikai megfontolá-

sok. Az első ilyen vizsgálatot Bencze és Chandler [6] végezték el és megmutatták, hogy a kicserélődési effektusok a reakció dinamikai tárgyalásától függetlenül tanulmányozhatók.

Összefoglalás

A kvantummechanika kerek százéves története két részre osztható fel. Max Planck 1900-ban megfogalmazott kvantumhipotézisét követően az első fél évszázadban megszületett és szilárd alapokat nyert a kvantummechanika; az új elmélet pedig új szemléletmódot követelt meg. Nagy Károly professzor szavait idézve Max Planck „ajtót nyitott a kvantumok világára”. A kvantummechanika lehetővé tette az anyag szerkezetének feltárását és törvényszerűségeinek megértését. Az atomfizika és atommagfizika rohamos fejlődése szükségszerűen elvezetett az atomenergia felszabadításához, amelyben kulminált a kvantummechanika száz éves sikertörténetének első felvonása. Az első felvonásban lényeges szerep jutott a magyaroknak. Mint azt korábban már vázoltuk, a kvantummechanika elméleti megalapozásában kulcsszerep jutott Neumann Jánosnak, Wigner Jenőnek, majd később a Riesz Frigyes – Szőkefalvi Nagy Béla párosnak. A felsorolás azonban itt még nem ér véget, hiszen „az atomenergia magyar találmány” ahogy azt Alvin Weinberg, a reaktorfizika nagy alakja megfogalmazta. Az 1942. december 2-án kritikussá vált – azaz működőképesnek bizonyult – *Chicago Pile 1 Szilárd Leó és Enrico Fermi* alkotása. A Washington állambeli Hanfordban megépült szaporítóreaktort és még sok más típust Wigner Jenő tervezte. Neumann János és Teller Ede pedig a Manhattan-project vezéregyéniségei voltak. (Csak zárójelben említjük meg, hogy Teller Ede mellesleg „a hidrogénbomba atyja” is volt.)

A II. világháború befejezése után a figyelem ismét a fizika békés felhasználása, az alapkutatás felé fordult, és az 50-es évektől kezdődően az érdeklődés egyre inkább a szórás kísérletekre összpontosult, amelyek hamarosan a kvantumos effektusok kutatásának leghatékonyabb eszközeivé váltak. Nagy szükség lett tehát kvantum-szóráselméletre, ezen belül pedig olyan közelítő módszerekre, amelyek segítségével a kísérleti eredményeket értelmezni lehetett. Létrejött az úgynevezett „formális szóráselmélet”, amely megalapozta a közelítő módszerek numerikus alkalmazását. A Born-közelítés, a torzított hullámú Born-közelítés (DWBA), a csatolt csatornák módszere lassanként külön iparággá vált, amelyben nagy szerep jutott a rohamosan fejlődő számítástechnikának és az egyre szélesebb körben elérhetővé vált nagy teljesítményű számítógépeknek. Az alkalmazott közelítő módszerek azonban alapvetően kéttest-szemléletmódon alapultak, mivel, ahogy azt a korabeli publikációk mindegyikében mentegetőzősképpen megjegyezték: „a háromtest-probléma megoldása igen bonyolult”.

Ebbe a viszonylag nyugodt és békés tevékenységbe robbant be 1959-ben a 25 éves L.D. Fagyeev, aki

kidolgozta a kvantum háromtest-szórásprobléma szigorú matematikai elméletét, és ezzel új lendületet adott a szóráselmélet kutatásának. Ahogy Fagyeev munkáját C. Lovelace közvetítése nyomán a nyugati világ megismerte, lázas munka kezdődött a háromtest-probléma elmélete és annak alkalmazása terén. Az 1968-ban Birminghamban rendezett *Three Body Problem in Particle and Nuclear Physics* konferencián Fagyeev meghívott előadásában már új fejleményekről számolt be a Coulomb-szórásprobléma valamint az N-test-probléma terén.

A fejlődés ezután felgyorsult, egyre-másra születtek meg az N-részecske-integrálegyenek, valamint a Coulomb-probléma megoldására irányuló egzakt és közelítő módszerek. A fejlődésnek ebben az intenzív szakaszában ismét jelen voltak magyar kutatók, a *Budapest csoport* eredményei a fejlődés minden szakaszában figyelmet keltettek a szakmai körökben. E sikeres tevékenység alapját a kiváló nemzetközi kapcsolatok fektették le. A magyar kutatók egyaránt megfordultak Saclay-ban a francia Magkutató Központban, a dubnai Atommagkutató Intézetben, a Helsinkii Egyetem Elméleti Fizikai Kutatóintézetében, a jülichi Magkutató Intézetben, Los Alamosban és számos amerikai és kanadai egyetemen. A közös kutatások anyagi feltételeit a külföldi intézményeken kívül az MTA és az amerikai National Science Foundation közötti együttműködési szerződés teremtette meg majd két évtizedig.

A kvantummechanika száz éves történetének második felvonása tehát szintén sikerrel zárult: megszületett az N-test-szórásprobléma tárgyalásának elméleti eszköztára, a konkrét alkalmazások már a soktest-probléma szemléletmódjához igazodnak, és lényeges előrelépés történt a Coulomb-probléma terén is. Sajnos jelenleg még nem létezik minden esztétikai igényt kielégítő, matematikailag szigorú, valamint a gyakorlatban könnyen alkalmazható Coulomb-szóráselmélet, de az idő majd meghozza ezt is. A fejlődésnek azonban nincs vége, hiszen a kísérletek mindig szolgálnak valami új eredménnyel, aminek értelmezése további feladatot jelent a kutatók számára.

Irodalom

1. Л.Д. Фаддеев: *Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трех тел*. SZUTA Sztjeklov Mat. Int. Közleményei, Moszkva 1963. (angolul L.D. Faddeev: *Mathematical Aspects of the Three-Body Problem in Quantum Scattering Theory*, Israel Program of Scientific Translations, Jerusalem, 1965.)
2. О.А. Якубовский: Об интегральных уравнениях теории рассеяния для N частиц. *ЯФ* 5 (1967) 1312. (O. A. Yakubovskii, On the integral equations in the theory of N particle scattering. *Soviet J. Nuclear Phys.* 5(1967) 1312.)
3. Gy. Bencze: Integral Equations for N-Particle Scattering. *Nucl. Phys.* A210(1973) 568.
4. Gy. Bencze: Combinatorial Problems in N-Particle Scattering. *Phys. Lett.* 72B(1977) 155.
5. Gy. Bencze, E.F. Redish: General Algebraic Theory of Identical Particle Scattering. *J. Math. Phys.* 19 (1979) 1909., Gy. Bencze: *General Algebraic Treatment of Identical Particles in Scattering Processes, in Few-Body Nuclear Physics*. IAEA, Vienna, 1978. 113–153. old.
6. Gy. Bencze, C. Chandler: On the Treatment of Exchange Effects in Direct Reactions. *Phys. Lett.* 154B(1985) 347.