

szete segíthet innovatív, részecskeszemléleten alapuló megoldást találni. Másrésről, olyan problémák esetén, ahol eddig csak a makroszkopikus mennyiségek megfigyelésére nyílt lehetőségünk, a rács-Boltzmann módszer lehetőséget nyújt mezoszkopikus mennyiségek megfigyelésére. A rács-Boltzmann módszerrel turbulens áramlásokat modellezve például (4. ábra) nemcsak a hidrodinamikai sebesség és annak különböző korrelációi, de a sűrűségfüggvények maguk, azok egyensúlyi és nem-egyensúlyi része és a köztük megfigyelhető korrelációk is származtathatók, tanulmányozhatók. Reményeink szerint ez utóbbi tény segíthet olyan folyamatok mélyebb megértésében, amelyek esetén a tiszta makroszkopikus megközelítés eddig nem vezetett sikerre.

Végül, de nem utolsósorban, érdemes megemlíteni, hogy a módszernek ugyancsak nagy előnye az egyszerűsége. A 3. és 4. ábrán látható szimulációk például egy mindössze 400-500 soros számítógépprogrammal megvalósíthatók. A műveletek mindegyike lokális, így egy feladat megoldása párhuzamos számí-

tógép-architektúrán is gond nélkül kivitelezhető. Ráadásul a párhuzamosítás rendkívül effektív tud lenni. Számos gyakorlati esetben például lineáris gyorsulás érhető el, vagyis kétszer annyi gépen ugyanaz a feladat feleannyi idő alatt végezhető el. Ugyanakkor nem győzzük hangsúlyozni, hogy bár maga a módszer egyszerűen megvalósítható, a módszer mögött rejlő bizonyítás, amely segítségével a makroszkopikus egyenletekig eljuthatunk, közel sem tekinthető könnyen emészthetőnek. Éppen ezért gyakran találkozhatunk az irodalomban az alapmódszer olyan jellegű célirányos „megspékelésével”, amely bár első ránézésre fizikailag indokoltnak tűnik, egyszerű teszteken kiváló eredményeket produkál, mégis a módszer részletes analízisén elvérzik. Ennek ellenére úgy gondoljuk, hogy a módszer bemutatása helyet követel magának a fizika oktatásában is. Részecskeszemlélete gyors és könnyű befogadhatóságot, közelsége a Boltzmann-egyenlethez a statisztikus fizika alapvető fogalmainak gyakorlati alkalmazását, egyszerűsége a számítógépes kísérletezés lehetőségét biztosítja.

## NEVEK ÉS HÍRNEVEK

### Herzberg, Jahn, Renner, Teller és az elektron-rezgési kölcsönhatások

Hargittai Magdolna, Hargittai István

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
Magyar Tudományok Akadémia

*Teller Ede* neve nagyon sok, a kémiában és a fizikában számon tartott „hatásban” szerepel. Példaként említhetők a BET-egyenlet, a Jahn–Teller-hatás és Renner–Teller-hatás, a Teller–Redlich-szabály, a Herzberg–Teller-hatás, vagy a Landau–Teller-modell. Teller hírneve mégsem elsősorban ennek köszönhető. Az ezekben a kifejezésekben vele társuló nevek viselői közül némelyikről sokat tudunk, másokról alig valamit. Teller a jelek szerint a BET (Brunauer–Emmet–Teller) egyenletet tartotta közülük a legjelentősebbnek, amire az is utal, hogy szerinte ezért az eredményéért kaphatott volna Nobel-díjat. A BET-egyenletet valóban sokan és sokat használják, de az eredeti megfogalmazásán kívül ennek az egyenletnek nem volt mozgalmas „élete”, noha még maga Teller is foglalkozott a továbbfejlesztésével. A Jahn–Teller-hatás [1] ezzel szemben az elmúlt évtizedek során nagyon sok további kutatásnak lett tárgya és kiindulópontja. Ezek közül a legjelentősebb a magashőmérsékletű szupravezetés felfedezése [2]. A hatás az elektron-rezgési (*vibronic*) kölcsönhatások közé tartozik, amelyek a korszerű molekulafizikában és szerkezeti kémiában egyre nagyobb szerepet játszanak. A Jahn–Teller-hatás mellett ide tartozik a Renner–Teller-hatás is. Feltűnő, hogy Teller ismertsége mellett *Jahn* és *Renner* mennyire ismeretlen maradt. Ezzel a rövid dolgozattal adózunk emléküknél.

A Jahn–Teller-hatás eredeti megfogalmazása szerint nemlineáris szimmetrikus elfajult elektronállapotú (vagyis elektronokkal csak részben betöltött pályákkal rendelkező) molekulák nem stabilak, és ezért szimmetrikus szerkezetük torzul. A torzulás megszünteti az elektronszerkezet elfajultságát és stabil – bár kevésbé szimmetrikus – szerkezet jön létre. Egyszerűbben megfogalmazva, az ilyen molekulákban nincs összhang az atommag-konfiguráció magas szimmetriája és az elektronsűrűség-eloszlás alacsonyabb szimmetriája között. Ez azt eredményezi, hogy az atommagok egy része elmozdul eredeti helyzetéből és olyan konfiguráció alakul ki, amelyben az atommag-konfiguráció és az elektronsűrűség-eloszlás szimmetriája már megfelel egymásnak. A molekula így alacsonyabb szimmetriájú lesz, mint amilyen szimmetriát várhatnánk pusztán a molekula szerkezeti képlete alapján.

A Jahn–Teller-hatás a molekula elektronszerkezete és rezgőmozgása közötti kapcsolatot fejezi ki, és ezért a jól ismert és széles körben érvényes Born–Oppenheimer-közelítés a Jahn–Teller-rendszerekre elveszti érvényességét. A Born–Oppenheimer-közelítés szerint a molekula elektronszerkezete és rezgőmozgása egymástól jól elkülöníthető annak köszönhetően, hogy az atommagok sokkal lassabban mozognak,

mint az elektronok. Az elektronszerkezet ebben a közelítésben úgy írható le, mintha rögzített atommagkonfigurációhoz tartozna [3].

Jahn–Teller-hatás csak akkor várható, ha az elfajult elektronszerkezet szimmetriája és annak a rezgésnek a szimmetriája, amely kimozdítja a molekula atomjait a nagyobb szimmetriájú állapotból, megfelel egymásnak. Lineáris molekulák azért képeznek kivételt a Jahn–Teller-hatás alól, mert ezekben nincs meg ez a megfelelés – például egy háromatomos  $AB_2$  lineáris molekula kétszeresen elfajult hajlító rezgése lenne ilyen rezgőmozgás. A lineáris molekulák esetében is van azonban lehetőség arra, hogy a konfiguráció instabil legyen. Ezt az esetet írja le a Renner–Teller-hatás, amelyről szintén lesz szó az alábbiakban. Bár a Jahn–Teller-hatás a legismertebb elektron–rezgési kölcsönhatás, felfedezését időben megelőzte a Renner–Teller-hatás felismerése, és mindkettőt megelőzte Teller és *Gerhard Herzberg* idevonatkozó közös kutatási eredménye.

Teller és Herzberg, a későbbi Nobel-díjas spektroskopus, egy darmstadti konferencián ismerkedtek meg az 1930-as évek elején és akkor kezdték együttműködésüket. Herzberg akkoriban Darmstadtban dolgozott. Fél évszázaddal később Herzberg így emlékezett vissza közös munkájukra:

„Beszélgetéseinkből együttműködés alakult ki, ami közös dolgozatot eredményezett a többatomos molekulák elektronátmeneteinek rezgési szerkezetéről. A cikket kölcsönös látogatásaink során készítettük el; amikor én Göttingenbe mentem, vagy amikor Teller Darmstadtba látogatott. Szerepemet a bábaasszonyéhoz hasonlítanám: Telleré voltak az ötletek, amelyeket kísérleti eredményeink elmesélésével csalogattam elő belőle, és a cikk első piszkozatát én készítettem el, amit azután Teller kijavított. Tellernek kifogyhatatlan ötletei voltak ezen a területen (mint ahogy más területeken is), és mindig készen állt arra, hogy tudását megossza. A vele való közös munka számomra felejthetetlen élményt jelentett. Bár az ötletek mind tőle származtak, mégis ragaszkodott ahhoz, hogy a szerzők a cikkben ábécé-rendben szerepeljenek [4].”

A fent említett munkáról készült cikkük 1933-ban jelent meg, és az elektronmozgás és a rezgőmozgás elektronátmenetek során megvalósuló kapcsolatáról szól [5]; általában Herzberg–Teller-hatásként hivatkoznak rá. Herzberg és Teller ezen munkáját a Jahn–Teller-hatás előfutárának tekinthetjük. Időben ezt Renner 1934-ben közölt dolgozata követte, amely a széndioxid molekula első gerjesztett  $\Pi$  elektronállapotában fellépő elektron–rezgési kölcsönhatást írja le [6]. A szén-dioxid molekula alapállapota nem elfajult és a molekula, mint tudjuk, lineáris. Az első gerjesztett elektronállapota viszont elfajult. A fentiekben már utaltunk arra, hogy egy olyan molekulában, mint a  $CO_2$  molekula, nincs megfelelés az elektronállapot szimmetriája és a molekulát behajlító rezgés szimmetriája között és ezért nem várható Jahn–Teller-hatás. Azonban az elektron–rezgési kölcsönhatásokat leíró

összefüggésnek lehetnek jelentősebb négyzetes (vagy esetleg még magasabb rendű) tagjai is, és ezek eredményezhetnek bizonyos mértékű hajlítást. A jelenséget Herzberg kezdeményezésére nevezték el Renner–Teller-hatásnak. Erre a hatásra az első kísérleti bizonyítékot csak Renner cikkének megjelenése után negyedszázaddal sikerült szolgáltatni, mégpedig az  $NH_2$  gyök elektronszerkezetének elnyelési spektrumában [7]. Az  $NH_2$  gyök egyik elektronja  $\pi$  pályán tartózkodik, és a  $\Pi$  elektronállapot az alapállapot, amely hajlított. A gerjesztett, nem-elfajult állapot a lineáris konfigurációjú.

Az 1930-as években Teller és a későbbi Nobel-díjas *Lev Landau* többször is beszélgetett a molekulák elektronszerkezte és rezgőmozgása közötti kapcsolatról. Teller szerint ebben a kérdésben komoly viták voltak, de hogy miben is álltak ezek a viták, sajnos nem teljesen egyértelmű. Az alábbiakban Teller idézzük:

„Göttingenben volt egy német diákom, R. Renner, aki cikket írt a lineáris szén-dioxid molekula elfajult elektronállapotairól. Feltételezte, hogy a gerjesztett elfajult állapotban a széndioxid lineáris.

Landauval 1934-ben együtt voltunk *Niels Bohr* intézetében Koppenhágában és sokat beszélünk erről a témáról. Landau nem értett egyet Renner következtetésével és a dolgozat nem tetszett neki. Azt mondta, hogy ha a molekula elfajult állapotban van, akkor szimmetriája sérül, és a molekula nem maradhat lineáris. Landaunak nem volt igaza és erről sikerült is meggyőződnöm. Ez volt valószínűleg az egyetlen eset, amikor nekem lett igazam egy Landauval folytatott vitában [8, 9].”

Ebben a leírásban zavaró, hogy Teller feltételezése szerint a szén-dioxid lineáris az elfajult gerjesztett állapotban, míg Renner dolgozata szerint a szerkezet hajlított. Amint arra a fentiekben már utaltunk, a torzulást az elektron–rezgési kölcsönhatást leíró összefüggés magasabb rendű tagjainak figyelembe vételével lehet értelmezni. Teller megjegyzése csak akkor érvényes, ha elhanyagoljuk a magasabb rendű tagokat. Ebben az esetben a szén-dioxid molekula lineáris lenne még elfajult elektronállapotban is. Renner dolgozatában a kétatomos molekulák példájával magyarázza meg a szimmetriaviszonyok és a mozgások összefüggését. A kétatomos molekulában a forgómozgás és nem a rezgőmozgás kapcsolódik össze az elektronmozgással: „Az okot a két atommagot összekötő vonal magas (hengeres) szimmetriájában kell keresni. Ez a szimmetria megmarad a rezgőmozgás során, ami megakadályozza a rezgési és az elektronmozgás összekapcsolódását [10].” Ugyanakkor, többatomos molekulák esetében a rezgés kapcsolódhat az elektronszerkezettel, és Renner itt idézi Teller és Herzberg cikkét [5]. Noha a  $CO_2$  molekula alapállapotban (nem elfajult  $\Sigma$  állapot) lineáris, a gerjesztett  $\Pi$  állapotban már hajlítottnak várható a kölcsönhatás mátrixának jelentős négyzetes tagjai miatt (lásd feljebb).

Teller szavait többféleképpen is értelmezhetjük. Lehet, hogy Teller nem gondolt a Landauval folytatott



Rudolf Renner (1909–1991) az 1930-as évek elején, © Beate Bauer–Renner (Dorum, Németország), Renner menyének szívességéből.

vitában a négyzetes tagokra, ugyanakkor, ha Landau gondolt erre, nem fejtette ezt ki [11]. Az is lehet, hogy Landau valóban tévedett, mert nem gondolta végig a lineáris szerkezet „másságát”, de ezt Teller sem tartotta nagyon valószínűnek. Ahogy Teller mondta nekünk: „lehet, hogy Landaunak minden esetben igaza van, kivéve a lineáris molekulákat”. Természetesen az is lehetséges, hogy Teller évtizedekkel később már nem emlékezett pontosan a Landauval oly régen folytatott vitákra. Az viszont biztos, hogy Teller már londoni tartózkodása idején megkérte Hermann Jahnt, hogy vizsgálja meg, szisztematikusan „végigjárva” a különböző pontcsoportokat, a szimmetriatorzulás lehetőségét. Ez a munka vezetett közös cikkükhöz [1] és hosszú távon azokhoz az eredményekhez, amelyek ma Jahn–Teller-hatásként ismertek.

## Rudolf Renner

A sziléziai Schweidnitzben született 1909-ben, amely akkor Németország része volt, ma Swidnica néven Lengyelországban található. Hannoverben tanult, majd 1929-től Göttingenben, ahol fizika doktorátust szerzett 1934-ben. Addigra témavezetője *Max Born* professzor és a Renner munkáját konzultánsként segítő Teller is eltávoztak Németországból az 1933-as náci hatalomátvételt követő zsidóellenes intézkedések következtében. Ez is oka lehetett annak, hogy Renner dolgozatán egyedüli szerzőként szerepel, de az is lehet, hogy Born is és Teller is azt tanácsolta volna neki, hogy egyedül legyen szerző.

A doktori cselekmény részeként Rennernek be kellett nyújtania egy önéletrajzot, amely 1933. november elseji dátummal megtalálható a Göttingeni Egyetem levéltárában. A kézzel írott önéletrajzban Renner meleg szavakkal köszöni meg Born támogatását és Teller segítségét [12]. Teller sokáig nem hallott Rennerről, mígnem 1980-ban levelet kapott tőle [13]. Renner leveléből megtudhatjuk, hogy a göttingeni fizika-program szétesésével Renner a doktorátus megszerzése után elvégzett egy tanárképzőt, de álláshoz nem jutott. Végül 1936-ban állást vállalt a Német Birodalmi Meteorológiai Szolgálatnál, és ott dolgozott a háború végéig. Közben megházasodott, felesége az alsó-szászországbeli Dorum város egyik gyógyszerésznének lánya volt. Feleségének két fiútestvére elesett a háborúban és így Renner lett apósa gyógyszerertárában az utód. Ehhez meg kellett szereznie a gyógyszerészi képesítést, és 1950-ben át is vette a gyógyszerertár vezetését. Felesége 1955-ben meghalt és Renner második felesége egy dorumi gyógyszerész lett. Harminc éves gyógyszerészi működés után ment nyugdíjba, 1980-ban.

Teller válaszlevelében kifejezte sajnálatát, hogy Renner nem folytatta fizikusi tevékenységét és azt is megírta, hogy Renner munkáját a Jahn–Teller-hatás előfutárának tekinti, „Ihre Dissertation war der Vorläufer des sogenannten 'Jahn–Teller Effekts' von dem immer noch viel gesprochen wird” [14]. Saját életét „meglehetősen aktívnak” nevezte, amely kifejezés enyhén szólva alulbecsülte a valóságot. Teller azt is megemlítette, hogy a fizika mellett a béke érdekében is fejt ki tevékenységet. Nincs tudomásunk arról, hogy ezen a levélváltáson kívül további kapcsolatuk lett volna egymással. Renner úgy élte le életét, hogy családjának sohasem beszélt a gyógyszerészi pályája előtti tudományos tevékenységéről [15]. 1991-ben halt meg.

## Hermann A. Jahn

Teller és Jahn a Londoni Egyetemen dolgoztak együtt híressé vált dolgozatukon, amely a figyelmet az elektron–rezgési (*vibronic*) kölcsönhatásokra irányította. Teller számára London volt az utolsó európai állomás mielőtt az Egyesült Államokba távozott. Jahnról a legtöbbet abból a nekrológból tudhatunk meg, amelyet korábbi kollégája *P. T. Landsberg* publikált [16]. Az alábbi adatok részben ebből a nekrológból, részben Jahn gyermekeitől származnak.

Jahn német származású volt. Apja az 1890-es években hagyta el Németországot és telepedett le Angliában. Jahn 1907-ben született Colchesterben, Lincolnban nőtt fel, és alapfokozatát kémiában szerezte meg a Londoni Egyetemen 1928-ban. Mivel érdekelt a kvantummechanika, Lipcsében folytatta tanulmányait *Werner Heisenberg* és a holland matematikus *Bartel L. van der Waerden* irányításával. Doktori disszertációját 1935-ben védte meg és ezután visszatért Angliába. A Royal Institution munkatársa lett és a háború



Hermann A. Jahn (1907–1979) az 1930-as évek elején, © Michael Jahn és Margaret May (London), Jahn fiának és lányának szívesességéből.

alatt a Royal Aircraft Establishment munkatársaként vett részt védelmi célokot szolgáló kutatásokban. 1943-ban házasodott meg, felesége a Frankfurtból menekült zsidó tanítónő, *Karoline Schüler* lett. Jahn 1946-tól két évig a Birminghami Egyetem fizika tanszékén dolgozott *Rudolf Peierls* csoportjában. A Southamptoni Egyetem alkalmazott matematika professzorának 1949-ben nevezték ki és ott dolgozott nyugdíjba meneteléig, 1972-ig. 1979-ben halt meg.

Jahn és Teller közös munkájára akkor került sor, amikor Teller a Londoni Egyetem kémia intézetében dolgozott. Közös dolgozatukat a téma folytatásaként Jahn egyedül írt dolgozata követte. Jahn további munkákat is közölt a molekulaszervezet-kutatás, különösen a molekularezgések területén. Matematikai felkészültségét a röntgensugár szórás elméletének egyes vonatkozásaival kapcsolatban is kamatoztatta, valamint magfizikai témákban alkalmazta a csoportelméletet. A rezgések tanulmányozásával szerzett tapasztalata is közrejátszott abban, hogy háborús munkáit nagyobb szerkezetek, így repülőgépek rezgéseinek kutatásában végezte. Ez is okozhatta, hogy sohasem volt hajlandó repülőre szállni. Amikor a háború után állásinterjún vett részt Harwellben, ahol titkos kutatásokat is végeztek a brit atomprogram részeként, Jahn utalt német származására és kifejezte azt a reményét, hogy ez nem lesz akadálya alkalmazásának. A helyzet ironiája abban rejlik, hogy Harwell részéről az állásinterjút az a német származású *Klaus Fuchs* vezette, aki részt vett a Manhattan Tervben, és akit néhány évvel később, mint szovjet kémeket lepleztek le.

Jahn csendes és szerény ember volt, nagyon különbözött Tellertől. Intellektuális érdeklődése széleskörű volt, beleértve az európai irodalmat. Tanítványai mindig bizton számíthattak türelmes segítségére és biztatására.

## Utóélet

Ma már nemcsak Jahn–Teller-hatásról, hanem hatásokról beszélünk. A Jahn–Teller-hatásokról monográfiákat jelentetnek meg, nemzetközi konferenciákon számolnak be az ezekre a hatásokra és alkalmazásukra vonatkozó legújabb eredményekről. A Jahn–Teller-hatás szolgált kiinduló pontul azokhoz a kutatásokhoz, amelyek a magashőmérsékletű szupravezetés felfedezéséhez vezettek. *J. G. Bednorz* és *K. A. Müller* az IBM svájci laboratóriumában 1986-ban tették a felfedezést és 1987-ben már Nobel-díjat kaptak érte. Ez volt a Nobel-díjak történetében az egyik leggyorsabb kitüntetés. A díjazottak bőséges elismeréssel illették a Jahn–Teller-hatást, és Nobel-előadásukban két szép ábrával is illusztrálták felfedezésük és a Jahn–Teller-hatás összefüggését [2].

## Köszönetnyilvánítás

Molekulaszervezet-kutatásainkat az OTKA támogatásával végezzük (K60365 és T046183). Köszönettel tartozunk *Michael Jabn*nak és *Margaret May*-nek (London), Hermann Jahn fiának és lányának, Jahn fényképéért és ugyanígy *Beate Bauer-Renner*nek (Dorum, Németország), Rudolf Renner menyének, Renner fényképéért. Megköszönjük továbbá a Lipcsei Egyetem, a Göttingeni Egyetem, valamint a Stanford Egyetem Hoover Intézménye levéltárának és levéltárosainak szíves segítségüket a vonatkozó dokumentumok felkutatásában. Egyikünk (HD) külön is köszönetet mond az Alfred P. Sloan Alapítványnak (New York) azért a támogatásért, amelyet készülő *Judging Edward Teller: A Closer Look at One of the Most Influential Scientists of the Twentieth Century* című könyvéhez (Amherst, New York: Prometheus, 2010) szükséges kutatásaihoz nyújtott.

## Irodalom

1. H. A. Jahn, E. Teller, *Proc. Roy. Soc. London A* 161 (1937) 220–235.
2. J. G. Bednorz, K. A. Müller: *Nobel Lectures Physics 1981–1990*. World Scientific, Singapore (1993) 424–457.
3. M. Born, R. Oppenheimer, *Annalen der Physik* 84 (1927) 457–484.
4. G. Herzberg: *Molecular Spectroscopy: A Personal History. Annual Review of Physical Chemistry* 36 (1985) 1655–1684; 1664.
5. G. Herzberg, E. Teller, *Z. Phys. Chem. (B)* 21 (1933) 410.
6. R. Renner, *Z. Phys.* 92 (1934) 172.
7. K. Dressler, D. A. Ramsay, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* 251A (1959) 553–602.
8. I. Hargittai, M. Hargittai, *Struct. Chem.* 19 (2008) 181–184.
9. M. Hargittai, I. Hargittai: *Symmetry through the eyes of a chemist*. Third edition, Springer (2009) 305–306.
10. Lásd Renner dolgozatának angol nyelvű fordítását [6]: On the theory of interaction between electronic and nuclear motion for three-atomic, bar-shaped molecules. In *Quantum Chemistry: Classic scientific papers*. (Ed. H. Hettema) World Scientific, Singapore (2000) 61–62.
11. Erről bővebben, M. Hargittai, *Struct. Chem.* 20 (2009) 21–30.
12. R. Renner: *Lebenslauf des cand. phys.* Göttingen, 1. XI. 1933, az Universitätsarchiv Göttingen gyűjteményéből.
13. Rudolf Renner 1980. november 11-i levele Edward Tellerhez; Hoover Institution Archives, Stanford University.
14. Teller (dátum nélküli) levele Rudolf Rennerhez; Hoover Institution Archives, Stanford University.
15. Beate Bauer–Renner közlése, 2009. április 30.
16. P. T. Landsberg, *Bulletin of the London Mathematical Society* 12 (1980) 383–386.