

# Fizikai Szemle

## MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A Matematikai és Természettudományi Értesítőt az Akadémia 1882-ben indította  
A Matematikai és Physikai Lapokat Eötvös Loránd 1891-ben alapította

LXII. évfolyam

1. szám

2012. január

## ATOMMAGOK REZGÉSE ÉS FORGÁSA: FÁZISÁTMENETEK HIDEG KVANTUMRENDSZEREKBE

Cseh József  
MTA ATOMKI, Debrecen

*Napjainkban olyan véges kvantumrendszerek kapcsán is szoktak fázisátmenetéről beszélni, mint az atommag. Ráadásul némelyiket zérus hőmérsékletű fázisátmenetnek nevezik. Ebben az írásban a kvantummechanikai kétestestprobléma és más egyszerű magmodellek példáján próbáljuk érzékeltetni e meglepő szóhasználat mögött megbúvó fogalmakat és fizikai tartalmat.*

Fázisátmenetéről általában makroszkopikus testek kapcsán esik szó. Például: a víz hevítés hatására gőzzé alakul. Bevezetésképpen összefoglaljuk e jól ismert fázisátmenet néhány lényeges vonását. Azután röviden példákat említünk az atommagban észlelhető termikus jellegű, vagyis az előzőhöz hasonló fázisátmenetekre. Ezt követően térünk rá a hideg kvantumrendszerek fázisátmeneteinek kérdésére, amit a kétestestprobléma példáján szemléltetünk. A bemutatott modell nagyon egyszerű, és a fizika több területén – legalábbis közelítőleg – alkalmazható. Használatos például a kétatomos molekulák rezgésének és forgásának leírására, az atommagok molekulászerű állapotának tárgyalására, valamint a mezonspektrum (kétkvarkrendszer) értelmezésére. Röviden szót ejtünk a realisztikusabb modellel járó bonyodalmakról is.

A víz-gőz fázisdiagramot az 1. ábra mutatja vázlatosan. Eleveintsük fel a fázisátmenet néhány jellemzőjét, amelyek hasznosak lesznek későbbi összehasonlításunkban! A görbe mentén a két fázis egyensúlyban van, azonos a nyomásuk ( $p$ ) és hőmérsékletük ( $T$ ). Azonos továbbá a kémiai potenciáljuk ( $\mu$ ) is. Mi a kémiai potenciál jelentése és szerepe?

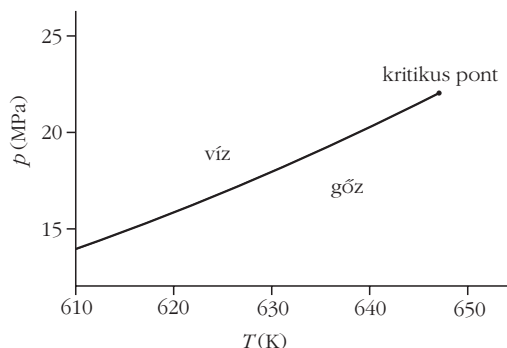
Az egyensúly feltételét, vagy a folyamatok irányát a termodinamika második főtétele határozza meg. Egy olyan rendszer esetében, amelynek hőmérsékletét és nyomását a környezetéhez való csatolás rögzíti a

$$G \equiv E - TS + pV = \mu N$$

szabadentalpia minimuma tünteti ki az egyensúlyt. Itt  $E$  a belső energiát,  $S$  az entrópiát,  $V$  a térfogatot jelöli,  $\mu$  a kémiai potenciál,  $N$  pedig a részecskeszám. (Egyszerűség kedvéért egykomponensű rendszert tekintünk.) A kémiai potenciál tehát az egy részecskére jutó szabadentalpia. Az egyensúlyi állapotban ezért ennek is minimuma van [1].

Szoktunk beszélni a fázisátmenetek rendjéről, a következő értelemben. Adott nyomáson a kémiai potenciál a hőmérsékletnek folytonos függvénye. A fázisátmeneti pont két oldalán a megfelelő állapotegyenletekből nyerhető [2]. A fázisátmenet ugyan az állapotegyenlet változását jelenti, de az egyensúly megköveteli a két fázis kémiai potenciáljának azonoságát; tehát értéke a forrásponton áthaladva is

1. ábra. A víz-gőz fázisdiagram vázlatosan.



Az írásban bemutatott munka az OTKA (K72357) és az MTA-JSPS (119) együttműködés támogatásával folyt.

folytonosan változik. Törése azonban lehet, vagyis a deriváltjának lehet szakadása. Ha az elsőrendű deriváltjának ugrása van, akkor elsőrendű fázisátmenetről beszélünk. Ha az elsőrendű derivált is folytonos, de a másodrendű már nem, akkor másodrendű a fázisátmenet. Amikor a deriváltak minden rendben folytonosak, akkor analitikus (cross-over) átmenetről van szó.

Nyilvánvalóan a legmarkánsabb fázisátmenet az elsőrendű. Ilyen a víz forrása 22,1 MPa nyomás alatt. Ezen a nyomáson a fázisátmenet másodrendűvé válik. Nagyobb nyomásoknál pedig analitikus. Analitikus átmenetekben is érzékelhetünk hirtelen változást például a fajhő vagy a sűrűség viselkedésében, de ez simább függvényt írható le.

## Termikus fázisátmenetek az atommagban

Az atommag mikroszkopikus objektum, protonokból és neutronokból (összefoglaló névvel: nukleonokból) épül fel. Elméleti leírása a kvantummechanika feladata. Az alkotóelemek száma általában sokkal nagyobb annál, semhogy egyenként tekintetbe vehessük őket (nem tudjuk megoldani például a száztestproblémát), de sokkal kisebb annál (nem éri el még a háromszázat sem), hogy rájuk statisztikus megfontolásokat lehessen alkalmazni. Következésképpen az atommagok tárgyalásában alapvető fontossága van a modelleknek.

A nukleonok között erős kölcsönhatás működik, amelynek jellege nagyban hasonlít a Van der Waals-típusú erőhöz [3], ami például a vízmolekulák között hat. Ezért nem meglepő, hogy a magfizika – szinte születésétől kezdve – egyik legfontosabb modellje a cseppmodell, vagyis úgy képzeljük el az atommagot, mint mikroszkopikus méretű folyadék-cseppet. Ennek alapján már a 30-as években sikerült értelmezni a magok kötési energiáját. A kvantummechanikai folyadék-csepp rezgő és forgó mozgása alapján – az 50-es évektől kezdődően – pedig kvantitatívan is helyesen tudjuk leírni nagyszámú atommag energiaspektrumát.

Alapállapotuk környezetében tehát folyékonyan gondoljuk az atommagokat. Felmerül a kérdés, hogy a hőmérséklet növelésével átmehetnek-e gáz halmazállapotúba. Úgy tűnik, hogy erre a régóta vizsgált kérdésre a 2000-es évek kutatásai igenlő választ adtak [4]. A hőmérsékletet ütközési folyamattal (magreakcióval) növelték, és kiderült, hogy az atommagokban is bekövetkezik a folyadék-gáz fázisátmenet. Ez az átmenet szintén elsőrendűnek bizonyult. Mindkét fázisban nukleonok alkotják a vizsgált magot, vagyis az észlelt jelenség a nukleonikus maganyag fázisátmenete. A víz-gőz rendszerrel mutatott nagyfokú hasonlóság arra utal, hogy a fázisátmenetek természete nem nagyon függ az azokat okozó kölcsönhatásoktól (elektromágneses a makroszkopikus rendszerben, erős a magokban).

A hőmérséklet további növelése újabb alapvető változásra vezet. A nukleonok nem elemi, hanem

összetett részecskék, kvarkokból és gluonokból állnak. A közöttük működő erős kölcsönhatás természete miatt azonban a magfizikában használatos energiáknál ezek az alkotóelemek nem szabadulnak ki a nukleonokból. Bennük, mint valamiféle zsákokban aránylag szabadon mozognak, de a különböző zsákok tartalma nem keveredik. Kellően magas hőmérsékleten viszont ez is bekövetkezik: a mag a nukleonikus fázisból átmegegy a kvark-gluon fázisba. (Érdekes, hogy ez a nagyon markáns fázisátmenet analitikusnak bizonyult a korai Univerzumot és a nagyenergiájú magreakciókat jellemző körülmények között [5], ellentétben az elsőrendű átmenetre vonatkozó várakozással.)

Noha az itt említett fázisátmenetek sok tekintetben emlékeztetnek a makroszkopikus rendszerekben megismertekhez, mégis rá kell mutatnunk egy különbségre. Az atommagok véges méretűek, és ebből fakadóan a viselkedésüket jellemző függvények simább menetet tanúsítanak. (Véges rendszer fajhője például nem válik végtelenné, ami tipikus jellemzője a makroszkopikus testek elsőrendű fázisátmenetének.) Mégis, azt lehet mondani, hogy a végesméret-effektus által okozott bonyodalom ellenére, az eddig említett fázisátmenetek nagyban hasonlítanak a makroszkopikus testek esetében megismertekhez.

## Nem-termikus fázisátmenetek

Másfajta fázisátmenetek is megfigyelhetők az atommagokban, amelyek léte kifejezetten a magok véges ségéből fakad. Ezek a mag alakjával, vagy a mag egészének a viselkedésével (például forgásával és rezgésével) függenek össze. Természetesen ebben az esetben az analógia a makroszkopikus testek fázisátmeneteivel még inkább áttételes, mint amit az előző fejezetben láttunk. Mindazonáltal, távolról sem elhanyagolható – és nem marad meg kvalitatív szinten –, ezért honosodott meg ezekkel a jelenségekkel kapcsolatban is a termodinamikára emlékeztető névhasználat. Külön érdekességet ad e vizsgálatoknak, hogy fogalmaik és módszereik más területeken is alkalmazhatók, beleértve a véges kvantumrendszerek fázisátmeneteinek elvi tisztázását éppúgy, mint azok előfordulásának feltérképezését.

Bonyolult problémák megoldásában sokszor segítségünkre vannak a szimmetriamegfontolások. Célszerű ezért olyan modellt szerkeszteni, hogy az jól láthatóvá tegye a rendszer (távolról sem mindig nyilvánvaló) szimmetriáit. Az algebrai modellek különösen alkalmasak erre a célra.

A következőkben a kvantummechanikai kéttest-probléma egyszerű modelljében próbáljuk szemléltetni a hideg kvantumrendszerek fázisátmenetét. Ez a fejtegetés természetesen általános érvényű, de jól meghatározott magfizikai tartalommal is rendelkezik. Ennek megvilágítása érdekében érdemes madártávlatból egy pillantást vetnünk az atommagok szerkezetmodelljeire.

A soknukleonrendszer struktúrájának értelmezésében a már említett folyadékcepp-analógián kívül két további fizikai kép van a segítségünkre, azaz még két alapvető modellről szokás beszélni. Az egyik a héliummodell. Ennek alapfeltevése az, hogy a mag olyan mint egy parányi bolygórendszer vagy egy kicsi atom: a nukleonok egy vonzó erőterben mozognak, amit az összes többi nukleon hatása hoz létre. E modell azáltal tudja lényegesen egyszerűsíteni a problémát, hogy – mint az a részletekből kiderül – a nukleonok nagy része zárt törzset alkot, és az átlagpotenciálhoz való hozzájárulásán kívül lényegében semmilyen szerepet nem játszik. Valójában tehát csak a kevés számú valencianukleon mozgását kell vizsgálni.

A fűrtmodell (vagy klasztermodell) pedig olyanakkal festi le a magot, mint amit kisebb, egymással lazán összefüggő magok (klaszterek, vagy nukleoncsomók) alkotnak (például erősen kötött  ${}^4\text{He}$ -magok), miként szőlőszemek a fűrtöt. E modell szerint a mag szabadsági fokai két csoportba oszthatók: egyesek a klaszterek belső szerkezetéhez tartoznak, míg mások azok relatív mozgását jellemzik. Most azáltal egyszerűsítjük a soktestproblémát, hogy feltételezzük: a klaszterek belső állapotjaiból csak kevés jut szóhoz.

A kéttestprobléma a magok kétklaszter-állapotainak leírására alkalmazható, vagyis olyan esetben, amikor egy nagyobb mag két kisebb mag együtteseként áll elő, tehát olyan szerkezettel van dolgunk, mint egy súlyzó, vagy egy kétatomos molekula. Abból fakadóan, hogy ezek a kisebb magok vagy klaszterek maguk is összetett objektumok, természetesen további megfontolásokra is szükség van, ezekről később még szót ejtünk. Először az egyszerű problémát vesszük szemügyre, amelyben a két test csupán rezgő és forgó mozgásra képes.

Mielőtt rátérünk a konkrét problémára, érdemes összefoglalni az algebrai modellezés legfontosabb elemeit az impulzusmomentum-algebra jól ismert példáján.

## Az algebrai modellezés

Egy modellt akkor nevezünk algebrainak, ha a benne szereplő fizikai operátorok kifejezhetők egyetlen Lie-algebra elemeivel, bázisállapotai pedig ezen operátorok sajátfüggvényei.

A Lie-algebra operátoroknak egy olyan halmaza, ami a felcserélési relációra, mint műveletre nézve zárt. Legismertebb példája az impulzusmomentum-algebra, amelyet az  $L_x$ ,  $L_y$  és  $L_z$  operátorok, valamint lineárkombinációik alkotnak. Matematikai nevén ez az  $O(3)$  algebra (mivel elemei generálják a 3-dimenziós valós tér ortogonális forgatásait). A részalgebra az operátorok egy olyan részhalma, ami szintén zárt a felcserélési relációra nézve. Az  $O(3)$  algebra  $O(2)$  részalgebráját alkotja  $L_z$  és tetszőleges valós számmal megszorított értéke. (Ezek a 2-dimenziós tér, vagyis az  $x$ - $y$  sík forgatásait generálják.) Az  $O(3) \supset O(2)$  tartalmaz(kod)ást leíró összefüggést algebrai láncnak nevez-

zük. Minden algebra elemeiből szerkeszthető(k) olyan operátor(ok), amely(ek) felcserélhető(k) az algebra összes elemével. Ez(eke)t invariáns operátor(ok)nak nevezzük. Az  $O(3)$  és  $O(2)$  esetében csak egy lineárisan független invariáns operátor van:  $L^2$ , illetve  $L_z$ .

Az algebraik a rendszer szimmetriatulajdonságait jellemzik. Az a tény, hogy az állapotok jól meghatározott impulzusmomentummal rendelkeznek a forgásszimmetriából következik. Azt mondjuk, hogy a vizsgált probléma egzakt  $O(3)$  szimmetriával rendelkezik, ha Hamilton-operátora felcserélhető az  $O(3)$  minden elemével. Ez teljesül, ha felcserélhető  $L_x$ -szel,  $L_y$ -nal és  $L_z$ -vel. Ilyenkor a kölcsönhatások az impulzusmomentum-operátorokat nyilvánvalóan csak az  $L^2$  invariáns operátoron keresztül tartalmazhatják, például:  $H = \alpha L^2$ . Az ilyen Hamilton-operátor sajátérték-problémája analitikusan (zárt képletek formájában) megoldható, sajátfüggvényei az impulzusmomentum-sajátfüggvények, sajátértéke pedig az adott példánkban  $E = \alpha L(L+1)$ .

Ha szimmetriasértő kölcsönhatás lép fel, akkor dinamikai szimmetriasértésről beszélünk. Ez teljesen le is rombolhatja a szimmetriát, de nem szükségszerűen. Például, ha a gömbszimmetrikus rendszert egy homogén külső (mondjuk mágneses) térbe helyezzük (mint történik az a Zeeman-effektus kapcsán), akkor fellép egy olyan kölcsönhatás, ami sérti a gömbszimmetriát. Egyszerű példánk Hamilton-operátora  $H = \alpha L^2 + \beta L_z$ -re módosul. Ennek sajátérték-egyenlete még mindig analitikus megoldással rendelkezik: sajátfüggvényei változatlanul az impulzusmomentum-sajátfüggvények, sajátértékei pedig:  $E = \alpha L(L+1) + \beta M$ . A megoldás jó tulajdonságai annak köszönhetőek, hogy a Hamilton-operátor egyetlen algebrai lánc, jelesen az  $O(3) \supset O(2)$  lánc invariáns operátoraival van kifejezve. Ilyen esetben az  $O(3)$  szimmetriát dinamikaileg sérült szimmetriának nevezzük. Sérült, hiszen a kölcsönhatás nem forgásinvariáns. És dinamikai, mert a rendszerben ható erőkre vonatkozik. Megemlítendő, hogy a szimmetriasértő kölcsönhatás erősségére nincs semmilyen kikötés (nem kell neki gyengének lennie). Figyelemre méltó, hogy a sérült dinamikai szimmetria esetében a  $H$ -operátor nem  $O(3)$ -szimmetrikus, de sajátfüggvényei igen.

A dinamikaileg sérült szimmetria nagyon fontos szerepet játszik a fizika számos ágában. Nyilvánvalóan sokkal általánosabb (kölcsönhatások leírására alkalmas), mint az egzakt szimmetria, mégis: nagyon könnyen kezelhető elméleti leírást ad.

## A kéttestprobléma

A kéttestprobléma (egyik) algebrai modellje  $U(4)$ -es szerkezetű, vagyis ezen algebra elemeivel fejezhető ki az összes fizikai mennyiség operátora. A dolog megértésében segíthet, ha meggondoljuk, hogy egy egyszerű kéttestproblémának, a harmonikus oszcillátornak  $U(3)$ -as szimmetriája van, ami azzal függ össze,

hogy a mozgás a háromdimenziós térben zajlik [6]. Jelölje  $x_i$  és  $p_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  a tér- és impulzuskoordinátákat, és vezessük be az

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_i - p_i) \quad \text{és} \quad a_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_i + p_i)$$

oszcillátorkvantum-keltő és -eltüntető operátorokat (az oszcillátorparamétert 1-nek választottuk). Akkor a

$$H = \sum_{i=1}^3 a_i^\dagger a_i + \frac{3}{2}$$

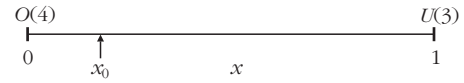
Hamilton-operátor felcserélhető a 9 darab  $a_i^\dagger a_j$  operátorral, és ezek alkotják az  $U(3)$  szimmetriaalgebrát. E szimmetria segítségével az azonos energiájú, vagyis degenerált állapotokat tudjuk osztályozni. Ha különböző energiájú állapotokat is le akarunk írni, akkor a spektrumgenerálás érdekében szükség van még egy dimenzióra, így adódik az  $U(4)$ .

Az  $U(4)$  algebrának 16 lineárisan független eleme van  $a_i^\dagger a_j$ ,  $i, j = 0, 1, 2, 3$ , ez tágabb, mint az  $U(3)$ , vagy  $O(3)$ ; azokat részalgebraként tartalmazza:  $U(4) \supset U(3) \supset O(3)$ . A fizikai operátorokat, így a kölcsönhatást is a  $b_{ij} \equiv a_i^\dagger a_j$  részecskeszám-megőrző operátorokkal fejezzük ki. A legegyszerűbb esetben csupán  $b_{ij}$ -ben lineáris és négyzetes tagokat vesznek tekintetbe. Ezt a közelítést hívjuk vibron modellnek.

A rendszer határozott impulzusmomentummal rendelkezik, ezért az  $O(3)$  impulzusmomentum-algebrának nyilván szerepelni kell leírásunkban. Más szimmetriák is rejtőzhetnek a problémában, ezért célszerű megkeresni mindazokat az algebrákat (matematikakönyvek fellapozása révén), amelyek a legáltalánosabb  $U(4)$ -től indulva előfordulhatnak, amíg elérkezünk az impulzusmomentum  $O(3)$ -jához. Az derül ki, hogy még egy további részalgebra van, az  $O(4)$ , és ennek megfelelően egymásba skatulyázott részalgebráknak egy másik lánc is létezik:  $U(4) \supset O(4) \supset O(3)$ . Vagyis két, az  $U(3)$  és  $O(4)$  algebrák által jellemzett sérült dinamikai szimmetriája van a kéttestproblémának.

Modellünk határesetként tartalmazza az oszcillátor ismert tankönyvi példáját, sőt a Kepler-problémát is, ha a kölcsönhatás kifejezésében  $b_{ij}$ -nek általánosabb (adott esetben reciprok) függvényt is megengedünk. Az oszcillátor esetében az  $U(3)$ , a Kepler-problémában pedig az  $O(4)$  a rendszer *egzakt* dinamikai szimmetriája [7]. Modellünk tehát olyan kéttestrendszert ír le, amelyben sokféle kölcsönhatás működhet, speciális esetként magában foglalja a rugóerő, vagy a Coulomb-erő esetét is. A rendszer állapotainak száma (az  $U(4)$  algebra reprezentációjának dimenziója) véges, azt jellemezhetjük egy egész számmal:  $N$ . Fizikailag ez – a vibron modell esetében – a rendszer rezgési kvantumainak maximális számát jelenti.

Amint azt az algebrai modellezés módszeréből tudjuk, ha a Hamilton-operátor csak az egyik vagy másik algebrai lánc invariáns operátorait tartalmazza, akkor a sajátérték-probléma megoldása zárt képlettel kifejezhető. Általános esetben mindkét láncnak van járuléka,



2. ábra. A kéttestprobléma diagramja.

ekkor numerikus megoldásra vagyunk utalva, nevezetesen az energiamátrix diagonalizálására van szükség. Az általános eset vizsgálata előtt azonban fontos megemlíteni, hogy a két dinamikai szimmetria szemléletes fizikai tartalmat hordoz.

A molekulafizika szótárát alkalmazva, a vibron modellben az  $U(3)$ -as dinamikai szimmetria puha vibrátornak, az  $O(4)$ -es pedig merev rotátornak felel meg. (Valójában mindkét esetben jelen van rezgő és forgó mozgás is; ezért pontosabb szóhasználatul beszélhetnénk akár kemény rotátor-vibrátorról, és puha vibrátor-rotátorról, de az egyszerűbb elnevezést követjük.) Rezgő-forgó rendszerünk mozgásának keménységét kvantitatív módon a nemrigiditási paraméterrel jellemezhetjük:

$$R = \frac{2 E_{rot}}{E_{vib}},$$

ahol  $E_{rot}$  az első rotációs gerjesztés,  $E_{vib}$  pedig az első vibrációs gerjesztés energiája. Ha  $R \approx 1$ , akkor puha vibrációról, ha pedig  $R \ll 1$ , akkor kemény rotációról beszélünk.

Az általános Hamilton-operátort a következő alakban írjuk:

$$H = x H_{U_3} + (1 - x) H_{O_4} + a H_{O_3}.$$

Ekkor az  $x = 0$  határeset az  $O(4)$ , az  $x = 1$  határeset pedig az  $U(3)$  dinamikai szimmetriát adja. A rendszert tehát egy egydimenziós ábrán tudjuk elhelyezni, amelynek pontjait  $0 \leq x \leq 1$  értékei jellemzik (2. ábra). (Később részletezett okok miatt ezt hívjuk a rendszer fázisdiagramjának.)

## Fázisátmenet

A kéttestrendszer (például molekula, vagy atommag) egyensúlyi állapotát az energia minimuma tünteti ki. Ez az extrémum-feltétel éppúgy a termodinamika második főtételének kifejeződése, mint amit a víz-gőz rendszerrel kapcsolatban említettünk a bevezetőben.

A  $H$  Hamilton-operátor birtokában kiszámíthatjuk az energia  $E_r(x)$  várható értékét. Növeljük  $N$  értékét igen nagyra:  $N \rightarrow \infty$ . Ebben a határesetben a számítás analitikusan és egyértelműen elvégezhető. Az energia két dologtól függ. Egyrészt a rendszer geometriai alakjától, ez adott esetben egyetlen paraméterrel, a két tömegközéppont egymástól való  $r$  távolságával jellemezhető. Függ továbbá a különböző szimmetriájú kölcsönhatások relatív erősségét megszabó  $x$  kontrollparamétertől. Keressük meg  $r$  függvényében az energia minimumát, ez határozza meg a rendszer egyensúlyi állapotát (alakját)! Vizsgáljuk e minimum viselkedését az  $x$  változtatásával! Azt tapasztaljuk,

hogy a függvény értéke, sőt annak elsőrendű deriváltja is folytonosan változik, ám a kontrollparaméter egy jól meghatározott  $x_0$  értékénél az elsőrendű deriváltnak törése van, a másodrendű derivált szakadást mutat [8]. A klasszikus fázisátmenettel mutatott nagyfokú hasonlósága miatt ezt a jelenséget másodrendű fázisátmenetnek nevezzük.

Az analógia tehát a következő. A rendszer egyensúlyi állapotát egy fizikai mennyiség minimuma szabja meg (kémiai potenciál, illetve alapállapot energiája). Ez folytonosan változik egy (vagy több) kontrollparaméter függvényében (adott nyomás mellett a hőmérséklet, illetve a különböző dinamikai szimmetriájú kölcsönhatások relatív súlya). E függvény viselkedése a kontrollparaméter egy értékénél megváltozik, ezért fázisátmenetről beszélünk. Jelesen: valamilyen rendű deriváltja szakadást mutat, és e derivált rendje határozza meg a fázisátmenet rendjét.

A kvantummechanikai példánkban a fázisátmenet hideg állapotok között ment végbe, ezért néha  $T=0$  fázisátmenetnek is nevezik.

Véges  $N$  esetben numerikusan oldjuk meg az energia sajátérték-problémáját. Az alapállapot energiája (és más fizikai mennyiségek) viselkedését tanulmányozzuk az  $x$  kontrollparaméter függvényében. Ilyenkor azt tapasztaljuk, hogy noha a kérdéses függvények simább viselkedést mutatnak (a végesméret-effektus következtében), de jelentős változások észlelhetők a kontrollparaméter kritikus értéke körül. Ilyenkor azt mondhatjuk, hogy fázisátmenetre emlékeztető viselkedést mutat a rendszer, hasonlóan ahhoz, ahogyan termikus fázisátmenet is megmutatkozott a végesméret-effektus ellenére.

A véges kvantumrendszerek fázisátmenetének értelmezése tehát két lépésben történt egy olyan elméleti leírás keretében, aminek van nagy részecskeszámú határeset. Az első lépésben, a nagy  $N$  határesetben a makroszkopikus testekéhez hasonló viselkedést észlelünk, amelyekre alkalmazhatók a termodinamikai fogalmak. A második lépésben pedig ugyanazon elméleti leírás véges részecskeszámhoz tartozó esetében konstatáltuk a fázisátmenet tüneteinek megjelenését.

Az alapállapot energián kívül más fizikai mennyiségek kontrollparaméter-függése is árulkodik a fázisátmenetről. Például elektromágneses átmenetek, valamint az energia sajátfüggvényének átfedése az  $U(3)$  bázisállapotokkal [9].

## Véges kvantumrendszer fázisa

Eddig a hasonlóságot hangsúlyoztuk a makroszkopikus testek és a véges kvantumrendszerek fázisdiagramjai között. Ez a hasonlóság azonban nem teljes, logikai szempontból van egy nagy hiányossága. Nézzük a fázisátmeneti pont vagy görbe egyik vagy másik oldalán elhelyezkedő állapotok halmazát, vagyis a fázist. Mit mondhatunk ezekről a két esetben? A vízgőz rendszerre nézve tudjuk, hogy azonos állapot-egyenlet köti össze őket. Vagyis a fázist az egységes fizikai viselkedés határozta meg, amit egyenletek

alakjában lehet felírni. Kvantumrendszerünkkel más a helyzet. A fázisdiagram két végpontját definiálta egy-egy (sérült) dinamikai szimmetria. És valahol a kettő között észleltük a fázisátmenetet. Azt mondhatjuk tehát, hogy a fázist a fázisdiagram végpontja és fázisátmeneti pontja határozza meg. De van-e benne valami közös fizikai tartalom? Valóban jogos az elnevezése? Erre a kérdésre még nincs meg az egyértelmű végső válasz, de már körvonalazódik.

A véges kvantumrendszerekre végzett numerikus számolások azt mutatták (az itt bemutatott példánk esetében is [10] és más hasonló problémákban is [11]), hogy van közös fizikai jellemzője a kérdéses fázisoknak. Ez a kvázidynamikai szimmetria.

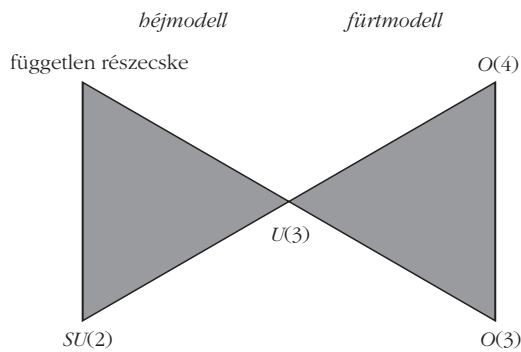
A kvázidynamikai szimmetria a kvantummechanika egyik (ha nem a) legáltalánosabb szimmetriafogalma. Azt a helyzetet jellemzi, amelyben sem az operátor, sem sajátfüggvényei nem szimmetrikusak, mégis a szimmetria jelen van [12]. (Emlékeztetőül: az eddig emlegetett sérült dinamikai szimmetria esetében az operátor ugyan nem szimmetrikus, de sajátfüggvényei igen.) Az, hogy érvényes lehet a szimmetria olyankor is, amikor sem az operátor, sem sajátfüggvénye nem szimmetrikus, meglepő ugyan, de előfordulhat. Ilyenkor az energia sajátfüggvénye különböző szimmetriájú bázisállapotok lineárkombinációja, de olyan speciális módon, hogy az algebra operátorainak e lineárkombinációkkal számolt mátrixeleme (az állapotok egy részalalmazára) megegyezik azzal a mátrixelemmel (közelítőleg, vagy akár pontosan), amit az egzakt szimmetria esetében kapunk. (Az impulzusmomentum-algebra esetében a kvázidynamikai szimmetria annak felel meg, hogy az energia-sajátállapot különböző  $L$ -ű bázisfüggvények lineárkombinációja.) A kvázidynamikai szimmetria helytállósága egy numerikus számolás esetében természetesen közvetlen módon ellenőrizhető.

Az említett példánkban a kérdéses szimmetriák az  $U(3)$ -as és  $O(4)$ -es kvázidynamikai szimmetriák. A szimmetriát jellemző kvantumszámok ugyan pontról pontra változhatnak, de egy fázison belül ugyanahhoz az algebrahoz tartoznak. Például az  $U(3)$ -as kvázidynamikai szimmetria érvényes a 2. *ábra*  $x_0$  és 1 pontjai között.

Úgy tűnik tehát, hogy véges kvantumrendszerek esetében a kvázidynamikai szimmetria lehet az a közös fizikai tartalom, ami a fázist jellemzi, vagy egyenesen annak definiálására szolgálhat. Ha a további vizsgálatok is helyben hagyják ezt a sejtést, akkor a helyzet emlékeztet arra, amit *Landau* elmélete mond a fázisokról: azokat a szimmetriájuk jellemzi, a fázisátmenet pedig a szimmetria megváltozását jelenti (ami a fázisok általános tankönyvi definíciójaként is olvasható [13]).

## Bonyolultabb rendszerek

A kéttestprobléma előbb említett modellje aránylag jó közelítéssel képes leírni a kétatomos molekulák rotációs-vibrációs spektrumát [14]. Alkalmazták a mezon-spektrum (kétkvarkrendszer) értelmezésére is, de

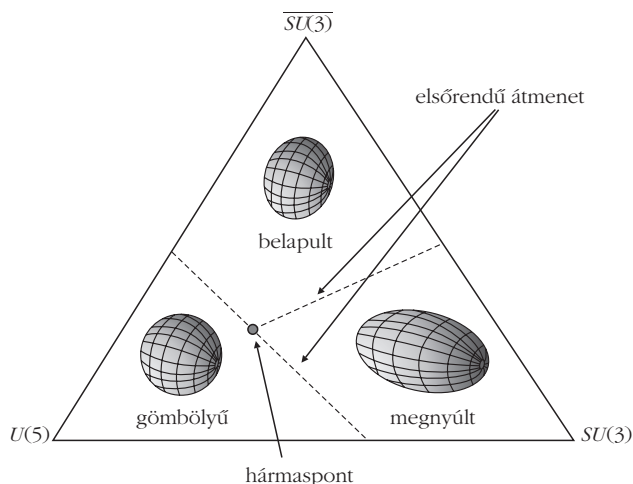


3. ábra. A héjmodell és a fürtmodell fázisdiagramja.

ebben az esetben már tekintetbe kell venni azt, hogy a kvarkoknak egyéb szabadsági fokai is vannak, nem csak azok, amelyek a térbeli mozgáshoz tartoznak. Még bonyolultabb a helyzet, ha a magok klaszterállapotait vizsgáljuk. Ekkor ugyanis azon kívül, hogy azoknak is vannak belső szabadsági fokai, még azt is figyelembe kell vennünk, hogy a klasztereket nukleonok alkotják, amelyekre érvényes a Pauli-féle kizárási elv; gondoskodnunk kell arról, hogy ezt az elvet ne sértsek meg a különböző klaszterekben lévő nukleonok sem. Ennélfogva a magok algebrai fürtmodellje lényegesen összetettebb, mint a kétatomos molekulák  $U(4)$ -es modellje. Ez utóbbi csupán a két klaszter relatív mozgásának leírására szolgál, a klaszterek belső szerkezetéről pedig héjmodellel adunk számot [15]. A héjmodellnek is jól meghatározott algebrai struktúrája van:  $U_i^{st}(4) \otimes U_i(3)$ , ahol az  $i$  index a klaszter sorszám, az  $s, t$  kvantumszámok a nukleonok spinjére és izospinjére (proton- vagy neutron-voltára) vonatkoznak (mindkettő kétértékű, ezért az összesen 4 szabadsági fok), az  $U(3)$  pedig a héjmodell térbeli részének szimmetriája.

Az algebrai fürtmodell természetesen a fázisátmeneteknek is gazdagabb tárházát kínálja, mint az egyszerű  $U(4)$ -es modell. Létezik benne nem csak másodrendű, hanem elsőrendű fázisátmenet is [16]. Az algebrai modellezesnek a Pauli-elv szempontjából külön érdekessége van. Könnyen szerkeszthetünk ugyanis két olyan modellt amelyekben teljesen azonosak a klaszterek, azonos a közöttük működő kölcsönhatás is (azonos a modellek algebrai szerkezete); csupán abban különböznek, hogy az egyikben nem vettük tekintetbe a kizárási elvet (ezt hívjuk teljesen fenomenologikus leírásnak), a másikban pedig igen (félmikroszkopikus leírás) [10]. Ilyen módon képesek vagyunk mintegy ki- vagy bekapcsolni a Pauli-elvet, és vizsgálni hatását a fázisátmenetekre.

A magfizikai fürtmodell fázisdiagramja sem egydimenziós, hanem kettő, ugyanis nem két, hanem három dinamikai szimmetriája van. Ebből kettőt már ismerünk. Az egyik az  $U(3)$ -as puha vibrátor határeset, amit a nukleonok nyelvén héjmodell-szerű klaszterizációnak nevezünk (mert olyan fürtmodell-állapotot ír le, amelyik igen egyszerűen kifejezhető héjmodellbázisban is). A másik az  $O(4)$ -es merev rotátor, vagy molekulaszerű klaszterizáció (amit csak nagyon sok héjmodell-bázisállapotból tudunk kikombi-



4. ábra. A folyadékcseppmodell fázisdiagramja.

nálni). A harmadik pedig az  $O(3)$  dinamikai szimmetria, amit a relatív mozgás és a belső szabadsági fokok közötti gyenge csatolás jellemez.

Kézenfekvő egy ilyen kétdimenziós fázisdiagramot egy háromszöggel szemléltetni, amelynek csúcsában a három dinamikai szimmetria helyezkedik el. A héjmodell esetére szintén javasoltak egy ilyen háromszög-diagramot, és annak is van egy  $U(3)$  csúcsa, épp úgy, mint a fürtmodellének. A két fázisdiagram ebben a pontban csatlakozik egymáshoz [17], amint azt a 3. ábra szemlélteti. Érdekes megvizsgálni, hogy ezen a térképen hol helyezkednek el a valódi magállapotok, mennyire héjmodellszerűek vagy fürtösödöttek, és milyen természetűek a fentebb említett osztályozás szerint. Az első ilyen jellegű tanulmányok a héjmodellszerű klaszterizáció fontosságára utalnak [18], összhangban az  $U(3)$ -as dinamikai szimmetria korábról is ismert helytállóságával.

Eddigi fejtegetéseink középpontjában a kéttest-probléma állt. Ezt egyrészt annak egyszerűsége, másrészt sokoldalú alkalmazhatósága indokolta. Az atommagok fázisairól beszélve azonban meg kell említenünk, hogy sokkal kiterjedtebb vizsgálatokat végeztek a cseppmodell keretében. A rezgő-forgó folyadék-csepp alakját leginkább a gömbszimmetrikushoz képest belapult vagy megnyúlt ellipszoid jellemzi, amit kvadrupólus alaknak nevezünk. Emiatt szokásos az alakfázis elnevezés is az általánosabb kvantumfázis mellett.

A folyadék-cseppmodell algebrai megfelelőjének [19] fázisdiagramja szintén háromszög alakú. Az egyik sarokban a gömbszimmetrikus alaknak megfelelő ( $U(5)$ -ös szimmetriájú) puha (kvadrupólus) vibrátor helyezkedik el (4. ábra), a másikban a megnyúlt alakú ( $SU(3)$ -as szimmetriájú) merev rotátor, a harmadikban pedig a belapult egyensúlyi állapotú (az előzőtől különböző  $SU(3)$ -as szimmetriájú) szintén merev rotátor [20]. Ezek között a fázisok között elsőrendű átmenet észlelhető, ahol pedig az elsőrendű fázisátmenetek egyenesei metszik egymást, ott másodrendű fázisátmenetnek megfelelő hármaspont helyezkedik el (Landau elméletével összhangban).

## Összefoglalás és kitekintés

Írásunkban azt próbáltuk bemutatni, hogy milyen megfontolások alapján beszélnek véges kvantumrendszerek viselkedéséről a fázisátmenetek nyelvén. Alapvetően egy kétlépéses fogalmi általánosításról van szó, amit olyan modellek keretében lehet legkönnyebben elvégezni, amelyeknek van nagy részecskeszámú határeset. Határesetben a termodinamikai fogalmak aránylag könnyen illeszthetők a problémához, véges részecskeszám esetére pedig azáltal vihetők át, hogy az előzővel teljesen azonos elméleti leírást alkalmazunk. Ezek a fázisátmenetek nem feltétlenül termikus jellegűek, végbemehetnek hideg állapotok között is.

Az ilyen jellegű problémák vizsgálatában nagyon hasznosnak bizonyultak az algebrai modellek; bemutatott példánk is ezek közül került ki. Egyik nagy erényük, hogy kiválóan feltárják a probléma (gyakran rejtett) szimmetriatulajdonságait. Ilyen vizsgálatok alapján fogalmazódott meg az a sejtés, hogy véges kvantumrendszerek fázisát jellemző fizikai tartalom a kvázidinamikai szimmetria lehet.

Szemléltető példánk közül a legnagyobb hangsúlyt az atommagok fűrtösödött (klaszterizált) állapotai kapták. Az ilyen állapotok fázisainak és fázisállapotainak vizsgálata csak a legutóbbi időben kezdődött el. Tekintettel arra, hogy a nukleonikus maganyag folyadék-gáz fázisátmenetére nemrég derült fény, a hadronanyag-kvarkanyag átmenetet pedig jelenleg – mind a kísérleti, mind elméleti oldalról – nagy erővel tanulmányozzák, az is igen érdekes kérdésnek tűnik, milyenek a fűrtösödött maganyag fázisai és azok átmenetei.

Végezetül érdemes megemlíteni, hogy azok a fogalmak és módszerek, amelyeket az atommagok fázisátmenetének tanulmányozására fejlesztettek ki egészen más területeken is hasznosak. Példaként említünk egy biológiai problémát.

A fehérjék a sejtben való felépülésükkor gyakorlatilag lineáris láncnak tekinthetők. Élettani funkciójuk szempontjából viszont alapvető fontosságú az a tény, hogy háromdimenziós alakjuk van, pontosabban, hogy éppen milyen háromdimenziós alakjuk van. Az nagyon izgalmas kérdés, hogy ez az alakváltozás (hideg fázisátmenet) hogyan következik be. Sokan úgy tartják, hogy a genetikai kód megfejtése után ez az élet legnagyobb rejtélye. A probléma természetesen nagyon bonyolult, és kutatása eléggé újkeletű. E kérdés vizsgálatához egyes kutatók olyan fogalmakat és módszereket alkalmaznak, amelyeket (részben) a magszerkezet-kutatásból kölcsönöztek [21].

## Irodalom

1. Fényes I.: *Termostatika és termodinamika*. Műszaki Kiadó, Budapest, 1968.
2. Sailer K.: *Statisztikus fizika és termodinamika*. KLTE, Debrecen, 1991.
3. Lovas I., Schramm Zs., Vibok Á., *Europhys. Lett.* 21 (1993) 433.
4. Elliott J. B. és tsai., *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002) 042701.
5. Fodor Z., Katz S., *Fizikai Szemle* 56 (2006) 393.
6. Györgyi G., *Fizikai Szemle* 17 (1967) 88.
7. Györgyi G., *Fizikai Szemle* 18 (1968) 142.
8. Van Roosmalen O. S., Dieperink A. E. L., *Ann. Phys. NY* 139 (1982) 198; Leviatan A., Kirson M., *Ann. Phys. NY* 188 (1988) 142; Cejnar P., Iachello F., *J. Phys. A* 40 (2007) 581.
9. Zhang Y. és tsai., *Phys. Rev. C* 78 (2008) 024314.
10. Yopez-Martinez H., Cseh J., Hess P. O., *Phys. Rev. C* 74 (2006) 024319.
11. Rowe D. J., *Nucl. Phys. A* 475 (2004) 47.
12. Cseh J., *Fizikai Szemle* 54 (2004) 165.
13. Geszti T.: *Termodinamika*. ELTE, Budapest, 2001.
14. Iachello F., Cseh J., Lévai G., *APH NS Heavy Ion Phys.* 1 (1995) 1.
15. Cseh J., *Phys. Lett. B* 281 (1992) 173; Cseh J., Lévai G., *Ann. Phys. (NY)* 230 (1994) 165.
16. Yopez-Martinez H., Parra-Rodriguez L., Hess P. O., Cseh J., Lévai G., *J. Phys. Conf. Ser.* 239 (2010) 012005.
17. Cseh J., *J. Phys. Conf. Ser.* 205 (2010) 012021.
18. Itagaki N., Cseh J., Ploszajczak M., *Phys. Rev. C* 83 (2011) 014302.
19. Cseh J.: *Az atommagok kollektív gerjesztései*. szerk.: Lovas I., Akadémiai Kiadó (1968) 281.
20. Warner D., *Nature* 420 (2002) 614.
21. Broglia N. A., Tiana G., Provasi D., *J. Phys. Cond. Matt.* 16 (2004) R111.

# RUTHERFORD-KÖZELÍTÉS AZ ELEKTRONOK SZÓRÁSÁNAK LEÍRÁSÁRA

Pozsgai Imre  
Richter Gedeon R.T.

A *Fizikai Szemle* 2011/6 számában *Bencze Gyula Rutherford* tevékenységét méltatta abból az alkalomból, hogy Rutherford száz évvel ezelőtt fedezte fel az atommagot. E kimagasló tudós tevékenysége *Szalay Sándoron* keresztül közvetlenül és gyorsan hatott a magyarországi magfizikai kutatásokra. Ennek részleteire és Rutherford aktualitására *Berényi Dénes* világított rá a *Fizikai Szemle* ugyanennek a számában közölt második cikkben. Bár az első írásban meglepően sok Rutherford-tanítvány nevét olvashatjuk, a másodikban azt írja Berényi Dénes Szalay Sándorról: „Nem túlzunk,

akkor, ha azt állítjuk, hogy munkatársairól, együttműködő partnereiről nem sokkal rövidebb névsort lehetne összeállítani, mint Rutherford esetében.”

A debreceni fizikusképzésről már egyszer megemlékeztem a *Fizikai Szemle*ben Berényi Dénes tevékenysége kapcsán [1], de most újra megteszem, mert mély nyomokat hagyott bennem és valamennyi évfolyamtársamban. Szalay Sándor radioaktivitást és atomfizikát oktatott nekünk fizikushallgatóknak a Debreceni Egyetem Kísérleti Fizikai Intézetében. Ezen túlmenően *Raics Péterrel* tudományos diákköri munkát is végeztem nála.