

ACTA ACADEMIAE PAEDAGOGICAE AGRIENSIS XVIII/13.

Szerkeszti: Budai László

974-979

FIZIKA

EGER, HUNGARIA

1987.

ACTA ACADEMIAE PEDAGOGICAE AGRIENSIS XVIII/13.

A szerkesztő bizottság:

PATKÓ GYÖRGY

Bodnár László, Rákos Etelka, Kiss Péter
Orbán Sándor, Vajon Imre, Vass Miklós

Szerkesztő -- Redigit:

BUDAI LÁSZLÓ

Felelős kiadó:

SZÜCS LÁSZLÓ

CSILLAG LÁSZLÓ -- TOROCZKAY ZSOLT

EGYSZERŰ DEMONSTRÁCIÓS KÉSZLET FÉNYTANI ALAPKÍSÉRLETEK BEMUTATÁSÁHOZ
(Elhangzott a "Lézerek demonstrációja -- demonstrációk lézerekkel"
c. szimpóziumon 1984. augusztus 25-én Egerben)

Abstract: (A simple demonstration kit for basic optical experiments) A demonstration kit without optical benches, fine adjustment screws and special optical surfaces has been developed, on the basis of applying a He-Ne laser beam which uses only small surfaces and shows always the right alignment. Multi-purpose mechanical elements (dia-holders, mounts etc.), simple glass surfaces and photographically made slits, diaphragms etc. are applied.

The basic phenomena of geometrical optics can be demonstrated on a Hartl-disk placed in a plexi smoke-box, while demonstration of the basic interference and diffraction phenomena can be achieved with the aid of 20 additional simple optical elements (mirrors, slits etc.) placed in standard dia frames. With these elements, among others, the Young and Michelson interference experiments can be shown.

I. A demonstrációhoz használt lézerek

A lézer is elektronmágneses sugárforrás, lényegét tekintve tehát nem különbözik hagyományos fényforrásainktól; sugárzásának jellemzői azonban azokénál lényegesen kedvezőbbek. A lézerekből irányított, keskeny fénynyaláb lép ki, mely monokromatikus, időben és térben koherens, intenzív -- s bizonyos esetekben polarizált. Említésre méltó viszont, hogy e kedvező tulajdonságok az egyes lézertípusoknál és üzemmódoknál igen eltérő mértékben jelentkeznek. Az optikai demonstrációnál jelenleg szinte kizárólag a vörös színű fényt sugárzó, kis teljesítményű, folytonos üzemű hé-

limumeon gázlézereket alkalmazták. Demonstrációs készletünket mi is ehhez, mégpedig a KFKI által kidolgozott két alaptípushoz terveztük. Ezek fő jellemzőit az 1. táblázatban foglaltuk össze.

1. Táblázat

A KFKI He-Ne lézereinek főbb adatai

Típus	He-Ne 400	He-Ne 1200
Sugárzási hullámhossz (nm)		632,8
Teljesítmény (mW)	5	30
Nyalábméret $(1)e^2$ pontok között a kimenetnél (mm)	0,74	1,30
Divergencia (mrad)	1,4	0,6
Módusszerkezet		TEM ₀₀
Axiális módusszám	2-3	15-16
Módustávolság (MHz)	385	125
Oscillációs tartomány (MHz)	1200	1800

A hagyományos fényforrásokkal való összehasonlításnál célszerű a sugárzást a lézernyalábéval azonos térszögre és sáv szélességre vonatkoztatni. Így pl. egy kis He-Ne lézer is több nagyságrenddel felülmúlhatja a nagyteljesítményű Hg-lámpát (2. táblázat).

2. Táblázat

Hg-lámpa és He-Ne lézer összehasonlítása

Fényforrás	Hg 546 nm-es vonala	He-Ne 400 lézer
------------	---------------------	-----------------

P	teljesítmény (W)	10	$5 \cdot 10^{-3}$
	sávszélesség (nm)	10^{-1}	10^{-3}
	térszög (steradián)	1	10^{-6}
		10^{-2}	$5 \cdot 10^{-6}$

Érdemes figyelni az 1. Táblázatban arra, hogy a kisebb teljesítményű lézer nyalábátmérője a kilépésnél a nagyobbénak csak kb. a fele, s így teljesítménysűrűsége a lézerhez közel majdnem eléri a nagy lézerét. Ugyanakkor a kis lézer divergenciája kb. kétszer nagyobb, s ezért a lézertől távolodva a nagyénál gyorsabban szélesedik.

Említésre méltó továbbá, hogy tökéletes keresztkoherencia csak térbeli alaplómódus (TEM_{00} haranggörbe-alakú radiális intenzitáseloszlás) esetén várható, az időbeli (hosszirányú) koherenciát pedig a több axiális módus léte, illetve a tényleges működési sávszélesség néhányszor tíz cm-re korlátozza, még a lézer esetén is. (Tovább növelni csak u.n. "egymódusú" lézerrel lehet.)

II. A lézerjellemzők demonstrációs lehetőségei

Az **irányítottság** ill. **keskenység** érzékeltethető azáltal, hogy bemutatjuk a **nyaláb méretet** nagyobb távolságban, illetve cigaretta füstön, vagy a levegőben lévő porszemeken fellépő **fényszórás** révén láthatóvá tesszük a fénysugár útját. (Mie-szórás, legerősebben a nyalábhöz képest **kis szögek** alatt látszik!).

A **monokromatikusság** és a nagy relatív intenzitás (spektrális teljesítménysűrűség) Hg-lámpával való spektrum-összehasonlítással mutatható jól meg. (Bontóelem lehet: transzmissziós optikai rács). A **térbeli koherencia** Young-f. kettős diafragmával, a hosszirányú (időbeli) koherencia Michelson interferométerrel érzékeltethető. (Sajnos a lézer hosszirányú módusainak

közvetlen bemutatása egyszerű eszközökkel nem oldható meg: (Fabry-Perot interferométer kell hozzá, üres felületekkel. Az **intenzitás** és a lézer szemre **gyakorolt hatásának** érzékeltetésére 30 mW-os lézerrel bemutatható a gyufagyújtás: kb. 3 cm-es fókusz távolságú lencsével fókuszálva a lézerfényt a befeketített fejű gyufa -- kb. 25 mW lézerteljesítmény felett -- meggyullad. (Foltméret a gyufán 20 m, telj.sűrűség 3 kW/cm²!)

A lineáris **polarizáltság** demonstrációja polarizációs szűrővel, vagy üveglemez reflexiója szögfüggésének bemutatásával (Brewster-törvény) valósítható meg. (Figyelem: az u.n. "belsőtükrös" lézerek fénye általában nem polarizált!)

Említésre méltó végül a He-Ne lézeres demonstráció balesetvédelmi alaptörvénye: **SOHA NE NÉZZÜNK A DIREKT NYALÁBBA!**

III. Az optikai alapjelenségek demonstrációja

Előrebocsájtjuk, hogy hagyományos módon is gyönyörűen be lehet mutatni az optikai jelenségeket, de sokkal több fáradsággal és eszközzel, mint a lézer segítségével.

Mi a lézer előnyeit akartuk kihasználni az eszközök egyszerűsítésére. Minthogy a keskeny és intenzív nyaláb mindig megmutatja a pillanatnyi beállítást, ezért elhagyható az optikai pad, és a mechanikus finomállítók helyett elegendő az emberi kéz. A kis nyalábméret miatt általában nem kellene jóminőségű optikai felületek -- megfelel pl. a közönséges tükör is. A nagy koherencia miatt pedig nincs szükség segédresekre, diafragmákra, szűrőkre stb. az interferencia és elhajlási jelenségek egyszerű eszközökkel is intenzívek, jól láthatók.

Az általunk kidolgozott eszközkészlet egy kb. 45 cm x 35 cm x 20 cm-es fadobozban elfér. A geometriai optika, illetve a fizikai optika alapvető jelenségeinek bemutatására szolgál, de lehetőséget nyújt egyszerűbb mérésekre is. A doboz tartalmát a 3. és 4. Táblázatban adtuk meg.

3. Táblázat

Optikai demonstrációs eszközkészlet

1/ Felső tárolólapon:

- 3 db lencse ($f = 40$ cm, $f = 10$ cm, $f = 3$ cm)
- 4 db diatartó állvány
- 2 db szár-közdarab
- 1 db A alaplemez
- 4 db A talp
- 20 db diakeret (lásd 4. Táblázat)
- 1 db fényvezető szálköteg

2/ Középen:

- Hartl korongos füstdoboz
(korong $\varnothing 24$ cm, doboz: $38 \times 27 \times 6$ cm)

3/ Alsó tárolólapon:

- Optikai testek a Hartl-koronghoz
plexi: félhenger, II lemez, 60° -os prizma, 90° -os prizma, domború lencse, homorú lencse, levegőlencse (2 elem)
- A : síktükrő, homorú-domború tükör
- Összerakható nyalábterelő és osztó
- Hármás nyalábosztó

4. Táblázat

Diakeretekbe foglalt elemek

- | | |
|-----------------------|-----------------------|
| 1/ Köralakú nyílások | 11/ Fresnel zónalemez |
| 2/ Köralakú tácsák | 12/ Üveglemez |
| 3/ Köralakú lyukpárok | 13/ szimmetriájú ábra |

4/ Rések	14/ 30 % tükör
5/ Sávok	15/ 50 % tükör
6/ Réspárok	16/ 100 % tükör
7/ Ötösrécek	17/ 100 % tükör
8/ Optikai rács	18/ 100 % tükör
9/ Keresztrács	19/ Fresnel biprizma
10/ szimmetriájú rácsozat	20/ Hengerlencse

Geometriai optikai alapjelenségek

Itt arra törekedtünk, hogy a kísérletek egyszerű eszközökkel, könnyen összeállíthatók, ugyanakkor a jelenségek minél jobban láthatók legyenek.

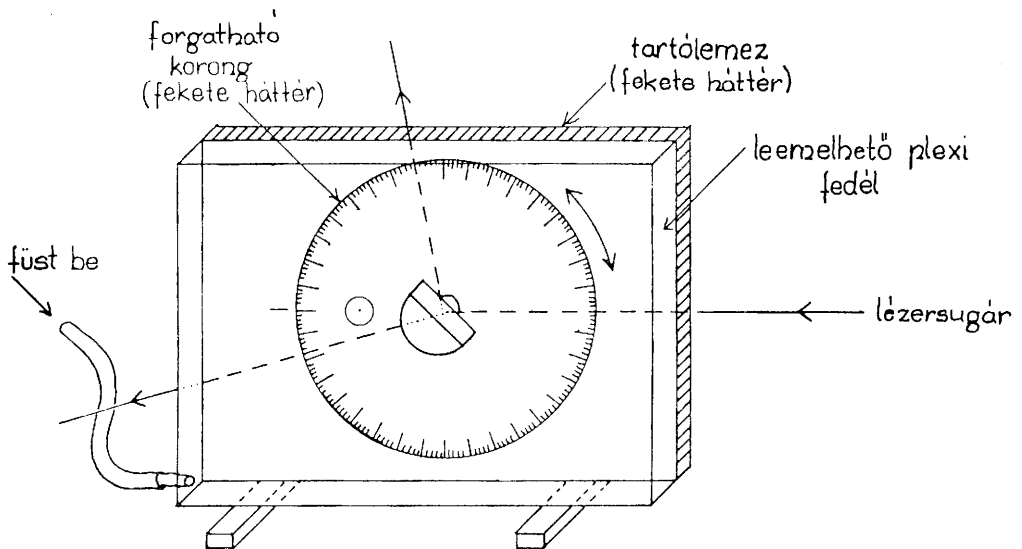
Az alapeszköz egy nagyméretű (átmérő 24 cm) 1° osztású, függőleges helyzetű Hartl-korong, mely hátulról vízszintes tengelye körül körbeforgatható. Előlről a korong és tartólemez átlátszó (plexi) fedővel borítható be, s az így kialakuló zárt térbe egy gumicsövön keresztül cigarettafüst fújható be, mely órákon át megmarad, s a fényszórás segítségével jól láthatóvá teszi a fénysugarak útját. A plexiből készült törő-testek, illetve az Al-ból készített tükörtestek csere-szabatosan helyezhetők be a korong középpontjába vagy egyik szélére (1. ábra).

A készletből összeállítható külső nyalábterelő, illetve nyalábosztó segítségével egyetlen, illetve három sugár vezethető rá a mintatestekre (2. ábra). a képalkotási alapkísérletekben e három sugár metszheti is egymást. A plexi dobozfedélre fóliát felerősítve felrajzolható a sugármenet, az optikai testek kontúrja, a beesési merőleges stb., s így kvantitatív mérések is végezhetők.

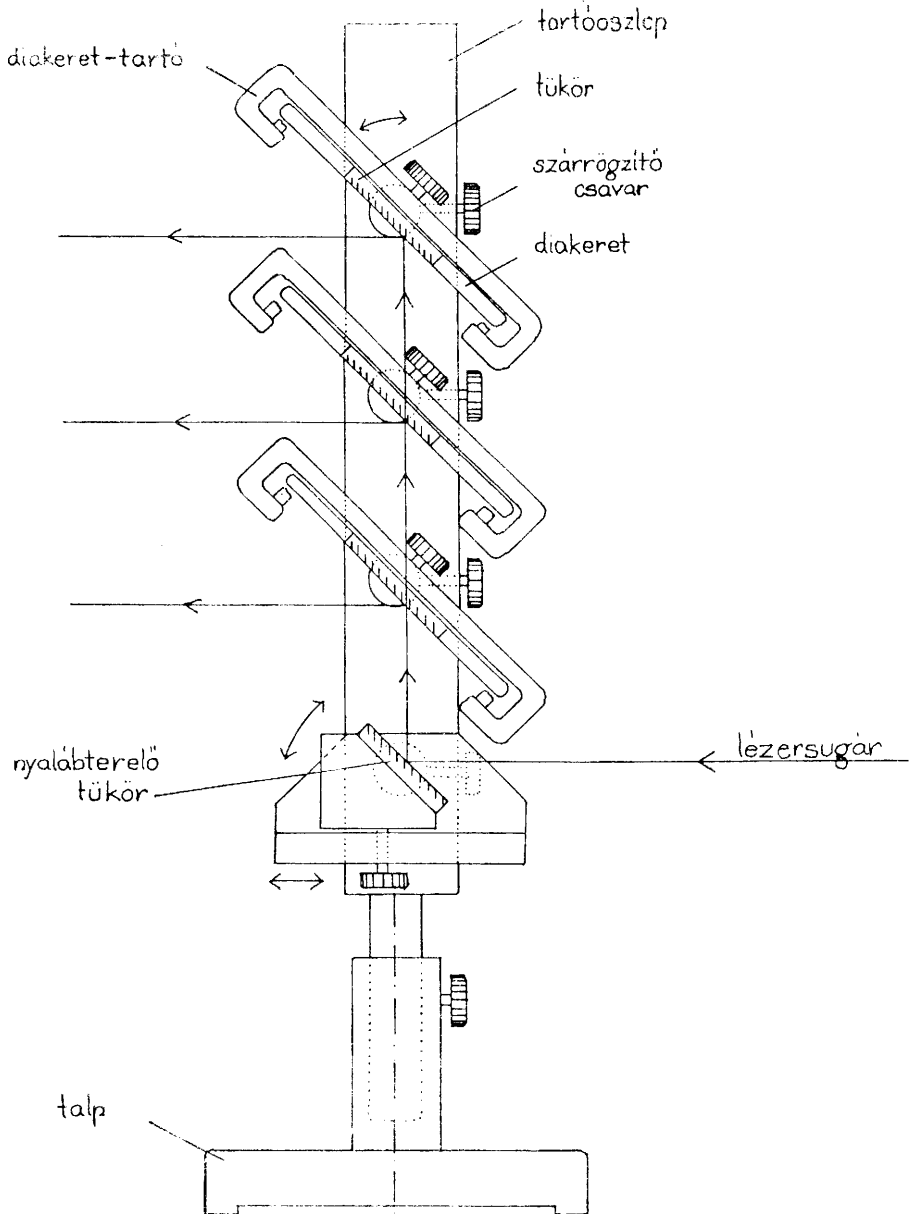
Az előadás során példaként bemutattuk a következő kísérleteket:

- a fénytörés alaptörvényei (törésmutató, totálreflexió)
plexi félhengeres optikai testtel;

- homorú tükör fő sugarai és képalkotási törvénye
Al-fémtestekkel; valamint
- homorú levegőlencse fókuszáló sugármenete.



1. ábra Hartl-korongos füstdoboz. Az ábrán a fénytörés demonstrációja látható



2. ábra A háromsugaras nyalábosztó felépítése. A nyalábosztó tükrök reflexiója rendre kb. 30 %, 50 %, 100 %. Ha csak egy sugárra van szükség, akkor az első és harmadik diakeret tartó hiányzik, s a középsőbe kerül a 100 %-os tükör.

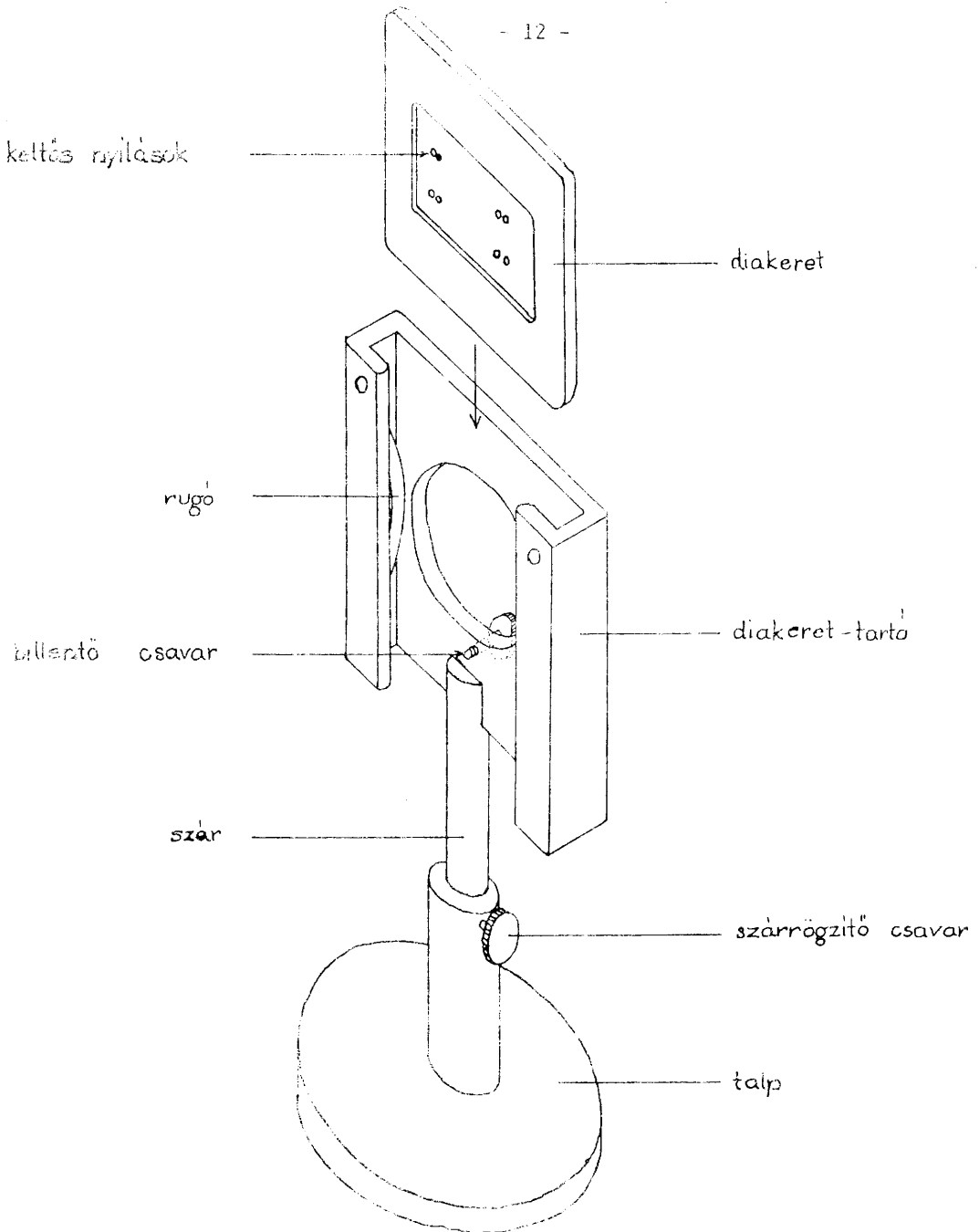
A fizikai optika alapjelenségei

Itt is egyszerűsége törekedtünk: a rések, nyílások stb. fotografikus technikával (rajzolt ábráról fényképezve) készültek, az optikai felületek egyszerű üveglemezek. Kivétel a Fresnel biprizma, mely optikailag polirozott, az optikai rácás, mely készen kapható és a részben áteresztő tükrök, melyek bevonata dielektrikus rétegrendszer. A nyaláb-módosító elemek beállítása az asztalon, egyszerű tologatással oldható meg, semmilyen precíziós állítóelemre nincs szükség. (Kivétel a Michelson interferométer, ahol a tükrök függőleges tengely körül forgatása még kézzel megoldható, de a vízszintes tengely körüli billentéshez a diatartóba egy kis csavart kellett beépíteni, (3. ábra) továbbá ugyanitt az elhelyezés megkönnyítése és a stabilitás növelése érdekében a tartóelemeket egy közös A -alapllemezen helyeztük el.)

A diakeretekben lévő nyalábmódosító eszközök -- a kiegészítő többcélú optikai és mechanikai elemekkel együtt -- lehetővé teszik a **fényinterferencia** és **fényelhajlás** alapjelenségeinek kvalitatív bemutatását és egyszerűbb kvantitatív mérések elvégzését (pl. nyílásméretetek, hullámhossz, rácásállandó stb. meghatározását). A fotografikus technika speciális előnye, hogy a nyílások mellett azok negatívjai is (környílás-tárcsa, rés-sáv) könnyen elkészíthetők.

Az előadásban bemutatásra kerültek a következő kísérletek:

- Fényinterferencia Fresnel biprizmával
(ékszőg-meghatározás, átfedési tartományban csíkok, intenzitáseloszlás szerepe)



3. ábra A diakeret-tartóállvány felépítése. A diakeret felülről az állványba csúsztatható. A billentő csavarnak a Michelson interfero- méter beállításánál van szerepe. Az ábrán a diakeretben a Young-féle kettős környílások láthatók.

- Fényelhajlás környíláson (átmérőfüggés)
- Fényinterferencia kettős környíláson -- Young-interferométer (geometriafüggés, hullámhossz-meghatározás, kontraszt és a lézerkoherencia kapcsolata)
- Michelson interferométer (gyűrűs interferencia kép bemutatása lencsével divergennsé tett (gömbhullám) nyalábbal, egyenlő karhossznál; csíkokból álló interferencia különböző karhosszaknál (10-20 cm úthosszkülönbség), kapcsolat a lézerkoherenciával.

A készlet természetesen más kísérleteket is lehetővé tesz (pl. a Fresnel-féle elhajlási jelenségek, az interferenciakép és az elhajlító elemek szimmetriája közötti kapcsolat, további interferencia-jelenségek pl. Newton-gyűrűk bemutatása stb.).

Végül megjegyezzük, hogy az eszközkészletet nem tekintjük befejezettnek. Az eddigi tapasztalatok azt mutatják, hogy valamivel több variálható elemre lenne szükség (pl. még egy lencsére + tartóelemre), kisebb kiegészítésekkel pedig újabb jelenségköröket is be lehetne mutatni (pl. holográfia).



GREGUSS PÁL

HORDOZHATÓ HOLOKAMERÁK KOHERENSOPTIKAI ÉS
FIZIOLÓGIAI ALAPKÍSÉRLETEKHEZ*

Abstract: (Portable Hologram Cameras to Coherent- Optical and Physiological Experiments) The hologram camera systems developed at the Laboratory for Applied Biophysics of the Technical University of Budapest make demonstrations of experiments possible in the field of coherent optical phenomena involving preparations of holograms everywhere even if at primary or secondary schools.

Simple psychophysical experiments connected with the coherence of radiation can be demonstrated by using these hologram camera systems.

A holográfia a "holosz" = minden és a "grafein" = leírni, azaz "mindent leírni" görög szavakból származik. Ezt a nevet adta Gábor Dénes 1946-ban képalkotó eljárásának, amelyért (több más mellett) Nobel díjjal jutalmazták 1971-ben. De mit is jelent ez a "minden"?

Általában azt szokás mondani, hogy minden fény által hordozott információt, tehát mind a fényhullám amplitúdójához, mind pedig a fázisához köthető. Pedig ez így nem egészen igaz. A hologram nem információt, hanem "csupán" jelmentát rögzít; a többi stimmel.

* Elhangzott a "Lézerek demonstrációja - demonstrációk lézerekkel" c. szimpóziumon 1984. augusztus 25-én Egerben.

E látszólag csak szavakkal való játszás mögött a vlóságban alapvető kérdés húzódik meg, amit röviden úgy fogalmazhatunk meg, hogy a hírközlés folyamatának első lépésében sohasem információt, hanem jelmintát dolgozunk fel, s ez a feldolgozott jelminta a feldolgozás mikéntjétől függően jelenti az információt. Ezt a fogalomponosítást jól szemlélteti az 1. ábra sorozata. A baloldalsó jelminta "semmit sem mond", nem jelent információt. A középső és a jobb szélső minta már modana valamit, de egyikük sem igazán információ még, mert vajon merre repül a madár a középső jelmintában, s vajon idős férfiról vagy fiatal nőről informál-e a jobboldali jelminta?

Ahhoz tehát, hogy egy jelmintából információ lehessen, a feldolgozás folyamatában valamiféle a priori háttérismeretre van szükség. Bizonyos értelemben véve a kétdimenziós hologram felületén is hasonlóképpen "háttérismeretek" segítségével rögzítődnek szinte minden veszteség nélkül a háromdimenziós jelminták is. A térbeli képrögzítés esetében a "háttérismereteket" a tárgyról származó jelmintákat hordozó hullámfront amplitúdó- és fázisviszonyainak ismerete jelenti.

Holografikus képrögzítés és képalkotás

Ahhoz, hogy egy N térbeli pontból álló tárgyat le tudjunk írni, N^2 adatra van szükség, amely adatmennyiséget egyetlen kétdimenziós felületen azonban nem lehet tárolni, kivéve, ha az N térbeli pontról a jelmintát koherens hullámfront szállítja, mert ilyenkor térbeli pontonként csak egy amplitúdó- és egy fázisadatra, azaz $2N$ számú adatra van szükség. Ennek ismeretében most már csak olyan kétdimenziós adatrögzítő felületre van szükség, amely egyidejűleg érzékeny az öt erő hullámfrontok amplitúdó- és fázisviszonyaira. Ilyen anyagok azonban nem léteznek, tehát meg kell találni a módját, hogy pl. a fázishoz kötődő jelmintákat rögzítés céljából úgy lehessen amplitúdóhoz kötődő jelmintákká -- amit a rögzítő felület már tárolni képes -- átalakítani, hogy az így nyert új jelmintából az eredeti, amplitúdóhoz és fázishoz kötődő jelminták mindenkor hiánytalanul visszanyerhetők legyenek. Ezt a problémát oldotta meg technikailag is Gábor Dénes, amikor a háromdimenziós jelmintát hordozó hullámfronthoz egy koherens hátteret adott olymódon, hogy minden egyes pontról a rögzítés

síkjában egy Fresnel-zónalemeznek megfelelő interferenciaminta jöjjön létre, mint ahogyan azt a 2. ábra is szemlélteti.

Az ilyen interferenciaminták jellegzetes tulajdonsága ugyanis, hogy megfelelően megvilágítva ugyanolyan hullámfrontokat gerjesztenek, mint amilyenek őket létrehozták, azaz minden egyes térbeli pontra vonatkozó amplitúdó- és fázisérték rekonstruálódik (sőt annak konjugáltja is), vagyis térbeli kép keletkezik.

Mivel az összes jelminta egyidejű rögzítésének feltétele, hogy a kialakult interferenciaminta a rögzítés időtartama alatt ne változzék, általános a hiedelem, hogy hologramot vagy csak nagyteljesítményű, igen rövid megvilágítású impulzuslézerekkel lehet készíteni, vagy pedig rezgésmentes környezetet kell a hologramkészítés időtartamára biztosítani. Ez a hiedelem azonban a hologramképződési folyamat nem kellő megértésén alapszik, ugyanis csupán a jelmintát hordozó hullámfront és a referencia-hullámfront viszonylagos helyzetének nem szabad a rögzítés ideje alatt változnia. Ha ez a feltétel teljesül, úgy kisteljesítményű, folyamatos üzemmódú lézerrel is lehet -- akár robogó járműben is -- hologramot rögzíteni. Az ismertetésre kerülő holokameráink ennek a feltételnek megfelelnek.

HOLO-35 kamera

A Budapesti Műszaki Egyetem Alkalmazott Biofizikai Laboratóriumában kidolgozott HOLO-35 kamera, amelyet a 3. ábrán mutatunk be, azáltal, hogy közvetlenül a lézerre csavarható, azzal egyetlen egységet képez, így a kamera külön rezgésmentesítéséről gondoskodni nem kell. A hologram kialakítása abból a megfontolásból indul ki, hogy amikor a lézersugár éppen a hologramot rögzítő fényérzékeny réteg síkjához ér, széttartóvá válik (azáltal, hogy a lézersugarat egy mikroszkópobjektívvel erre a síkra fókuszáljuk, és a filmet a fókuszpontban előre kilyukasztjuk), és mielőtt a tárgyat megvilágítaná, egy része a film síkjával párhuzamosan elhelyezett féligáteresztő tükörről visszavert sugárzás szolgál referenciaháttérként. Ilyen elrendeződés esetén a tárgy- és a referenciahullámfront egymáshoz viszonyítva nem mozdulhat el, tehát különösebb rezgésmentesített környezetre nincsen szükség.

Az így készült hologram jellegzetessége -- azon kívül, hogy a közepén egy lyuk van -- az, hogy pontszerű monokromatikus fényforrással is elég jó minőségű rekonstrukciót szolgáltat. Az 5. ábrán a 6. ábrán látható tárgyról készült hologram rekonstrukcióját mutatjuk be.

HOLOSIX kamera

A HOLO-35 kamerával csak egészen kisméretű tárgyakról lehet hologramokat készíteni. A MEDICOR megbízásából az ABFL-ben a 7. ábrán látható holokamera-rendszert fejlesztettük ki, amellyel bármilyen, a kamerába behelyezett tárgyról -- a kialakított sugármenettől függően -- lehet ugyancsak különösebb rezgésmentesítés nélkül, akár lézerrel, akár fehérfényvel is rekonstruálható hologramokat készíteni. A kamera kiképzése olyan, hogy egy és ugyanazon tárgyról akár három különböző irányból is lehet max. 9x12 cm-es hologramot egyidejűleg készíteni.

A hatszögletűen kialakított kamerában (innen a HOLOSIX elnevezés) -- mint ahogyan a 8. ábrán látható vázlat jól szemlélteti -- egyszerű optikai elemek variációjával érhető el, hogy a kamerával összeépített lézer sugara vagy csak a kamera középvonalában, vagy csak a kamera alsó negyedében, vagy pedig mindkét magasságban egyszerre léphessen be a kamera belsejébe. Az ide jutott sugárnyalábot a mindenkori feladat megkívánta konfigurációnak megfelelően lehet részben a kamera falán belül elhelyezkedő, három csavarral kívülről állítható elsőfelületű tükör segítségével, részben pedig a kamera talapzatán elhelyezhető optikai elemekkel kialakítani. Ez a kiképzés lehetővé teszi -- többek közt -- egy hologram-mikroszkóp megkívánta sugármenet kialakítását is, mely esetben kisebb nagyítású (kb. 80-100x) hologramfelvételek készíthetők különböző mikroszkópiai metszetekről.

A HOLOSIX kamera felépítése lehetővé teszi, hogy aránylag egyszerűen lehessen vele valósidejű holográfiás interferometriai vizsgálatokat végezni. Erre a célra a 9. ábrán látható, 35 mm-es perforált hologramfilm befogadására alkalmas feltét használandó. A hologramfelvételek elkészítése után az előhívott filmet a feltétbe visszahelyezzük, és a feltét hátlapján látható tárcsát lecsavarjuk úgy, hogy a referenciasugárral történő megvilágításkor a tárgy rekonstruált képe láthatóvá váljon. Mivel perfo-

rált filmet használunk, a felvételkor elfoglalt helyre való visszaállítás -- vagyis hogy a rekonstruált kép és a tárgy egybeessen -- viszonylag egyszerű feladat.

Pszichofizikai kísérletek

A HOLOSIX kamera nemcsak hologramok készítésére, illetve azok rekonstrukciójára alkalmas, hanem olyan pszichofizikai kísérletek elvégzésére is, ahol a fény koherenciájának szerepe van. Ismeretes ugyanis, hogy lézerrel megvilágított olyan érdekes felületeken, amelyeknek érdekessége a fény hullámhosszával összemérhető, a felület közelében létrejövő interferencia következtében sötétebb és világosabb foltok láthatók, míg az átlagos fénysűrűség nem változik; a felület ezen szemcsézettsége -- amit speckle-nek vagy hangyás zajnak is neveznek -- mozogni látszik, ha a megfigyelő a fejtét mozgatja. Ezt a látszólagos mozgást a 10. ábra alapján értelmezhetjük. Egészséges -- emmetróp -- szem esetében egy szemcséről érkező fénysugár a renehártyának egy, a szemlencse törésmutatója által meghatározott a pontjába érkezik. Ha mármost a fej felfelé elmozdul, a szem és a fénysugár relatív helyzete megváltozik, de ez a sugár továbbra is az a pontba esik és így mozgásérzet nem alakul ki. Ha azonban a szem rövidlátó -- mióp -- a szemcséről érkező sugár ugyan ilyenkor is a retina a pontjára esik, de amikor a fej felfelé elmozdul, mivel a mióp szem lencséjének fókuszpontja a retina elő esik, a szem és a fénysugár relatív helyzetének megváltozásakor a sugár már nem az a pontban, hanem a b pontban éri a retinát. A szemcséről érkező fénysugár tehát a retinán felfelé mozdul el, de mivel az agy a retinára érkező képet fordítva értelmezi, egy lefelé irányuló mozgásérzet keletkezik a rövidlátóban. A távollátó - hiperóp -- szem esetében értelemszerűen ennek fordítottja következik be. Asztigmatizmus esetében ez a mozgás az asztigmia mértékétől függően, kisebb vagy nagyobb mértékben ferde irányúvá válik. A leírt jelenség természetesen akkor is észlelhető, ha nem a fej mozog, hanem a diffúz felület, hiszen a jelenség érzékelése a relatív elmozduláson alapszik.

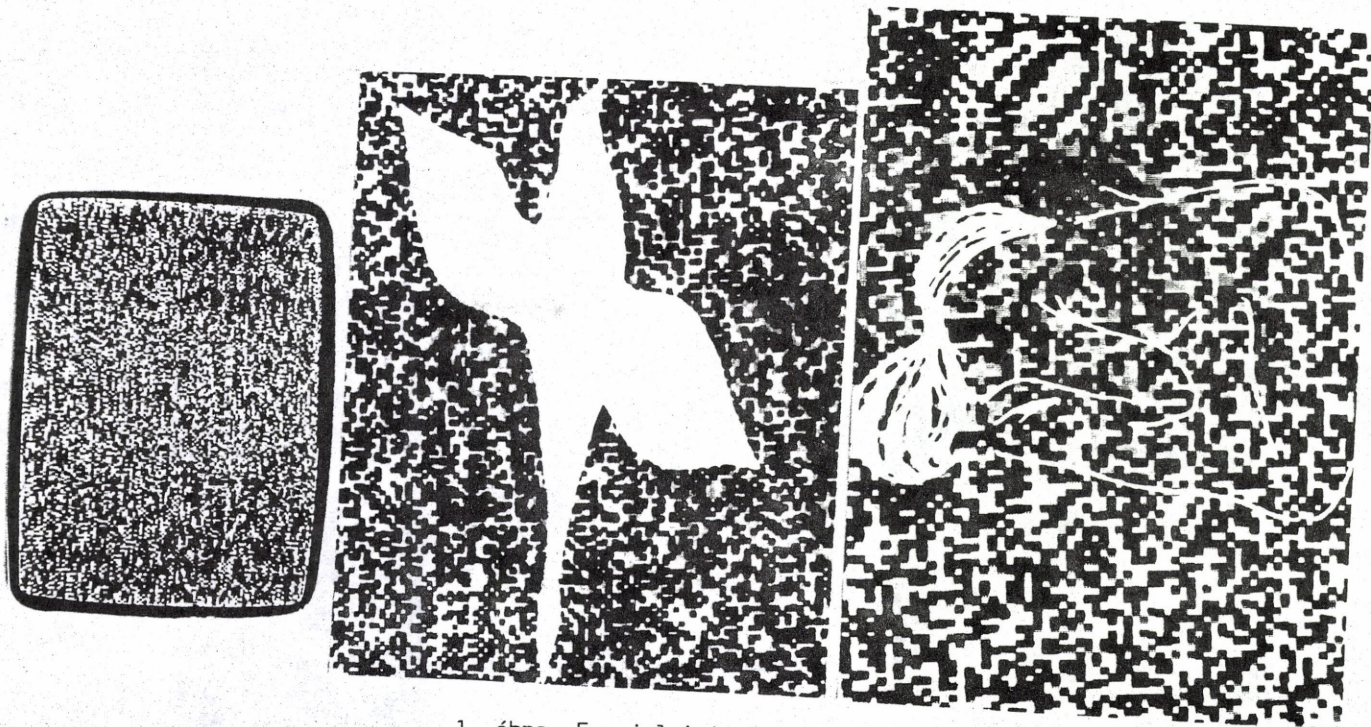
A fent leírt jeleséget a HOLOSIX kamerával igen könnyen be lehet mutatni, csupán az egyik oldalablakba kell a 11. ábrán látható egységet betolni. Ez az egység egy kb. 150 mm átmérőjű, lassan forgó, diffúzan

visszaverő korongot tartalmaz, amelyet a holokamera belsejében elhelyezett tükör segítségével úgy világítunk meg, hogy a megvilágított felület mindkét ablakon keresztül látható legyen. A szemlélő vagy szemlélők kb. 3-5 m távolságból figyelik a hengerfelületen megjelenő szemcsézettség viselkedését: egyhelyben nyüzsögnek-e a szemcsék, jobbra vagy balra, vízszintesen vagy ferde irányban látszanak-e futni. A válaszokból kiderül, hogy

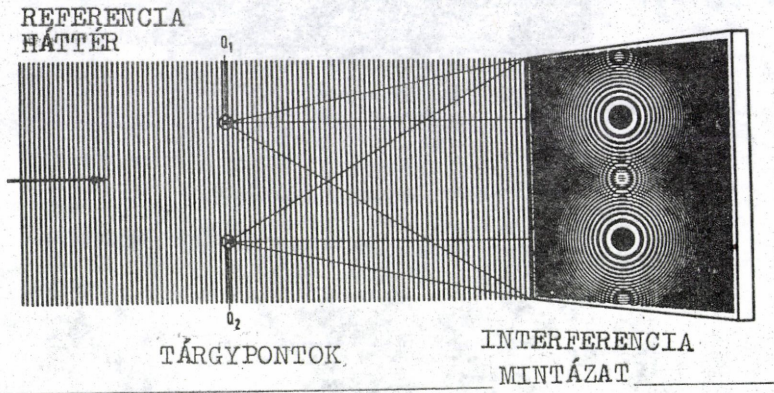
- a/ a szemlélő emmetróp, mióp vagy hiperóp-e, és van-e asztigmatizmus, illetve
- b/ ha szemüveget vagy kontaktlencsét visel, megfelelő-e a szóbanforgó korrekció.

Összefoglalás

A Budapesti Műszaki Egyetem Alkalmazott Biofizikai Laboratóriumában kifejlesztett holokamera rendszerek lehetővé teszik, hogy koherensoptikai kísérleteket, beleértve különböző típusú hologramok készítését is, gyakorlatilag bárhol, így iskolai tanítási körülmények közt is el lehessen végezni. Ugyanakkor lehetőséget nyújtanak arra is, hogy a sugárzás koherenciájával összefüggő egyszerű pszichofizikai kísérleteket is be lehessen velük mutatni.

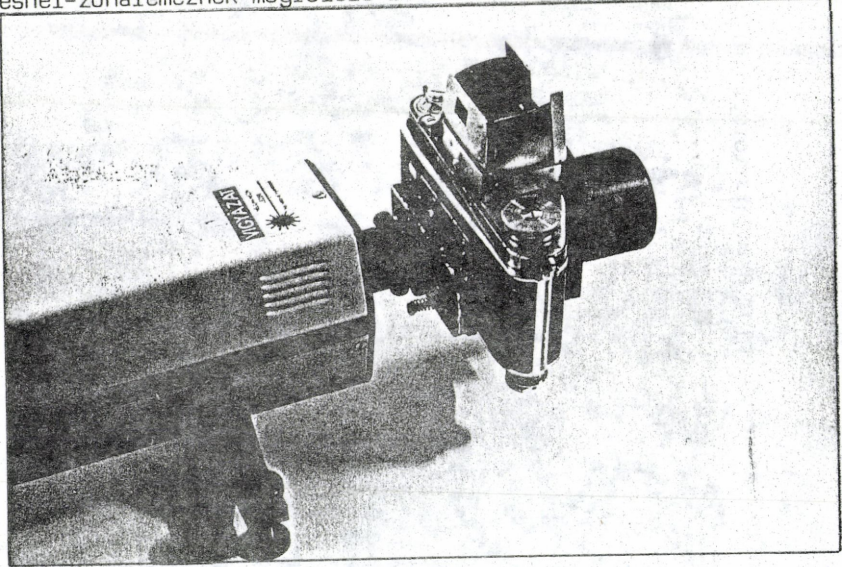


1. ábra Egy jelminta információtartalma a feldolgozás mikéntjétől függ



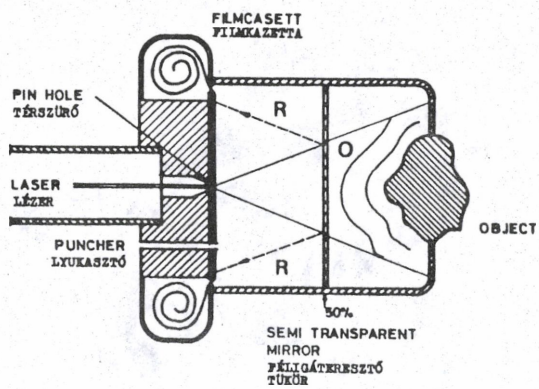
2. ábra

A hologramrögzítés elve, hogy minden egyes tárgypontról egy Fresnel-zónalemeznek megfelelő interferenciamintát alakítanak ki.



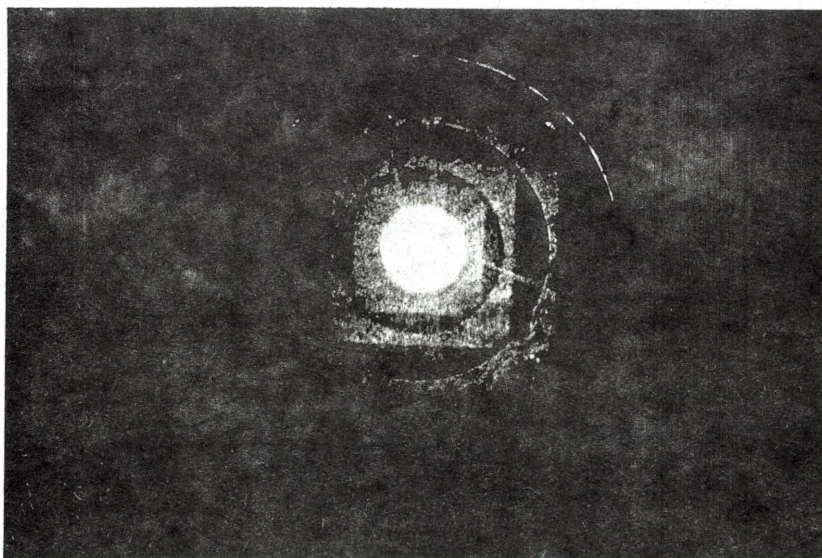
3. ábra

A Budapesti Műszaki Egyetem Alkalmazott Biofizikai
Laboratóriumában kidolgozott Holo-35 kamera.



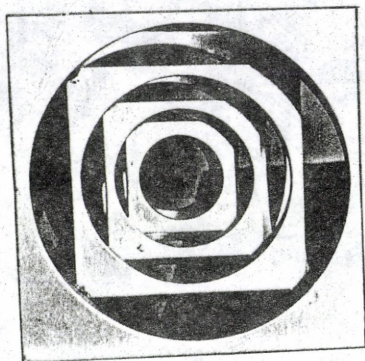
4. ábra

A HOLO-35 kamera elvi felépítése.



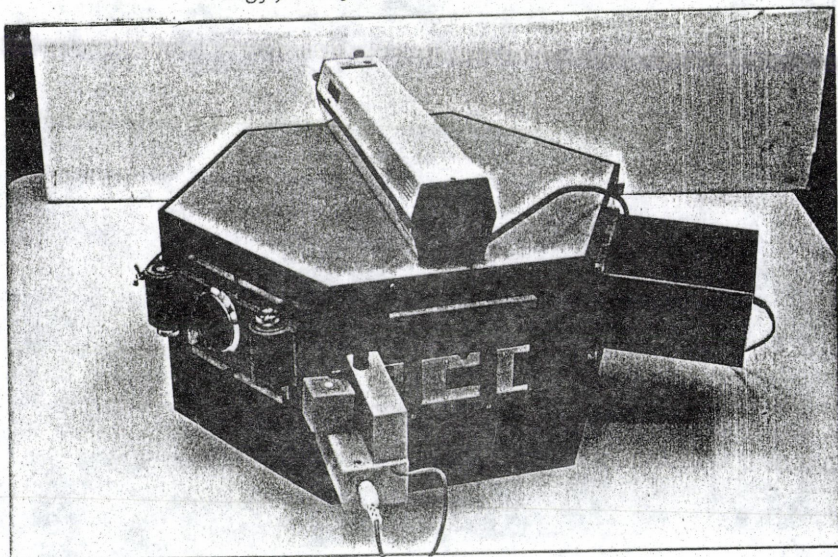
5. ábra

A 6. ábrán látható tárgyról a HOLO-35 kamerával készített hologram rekonstrukciója.



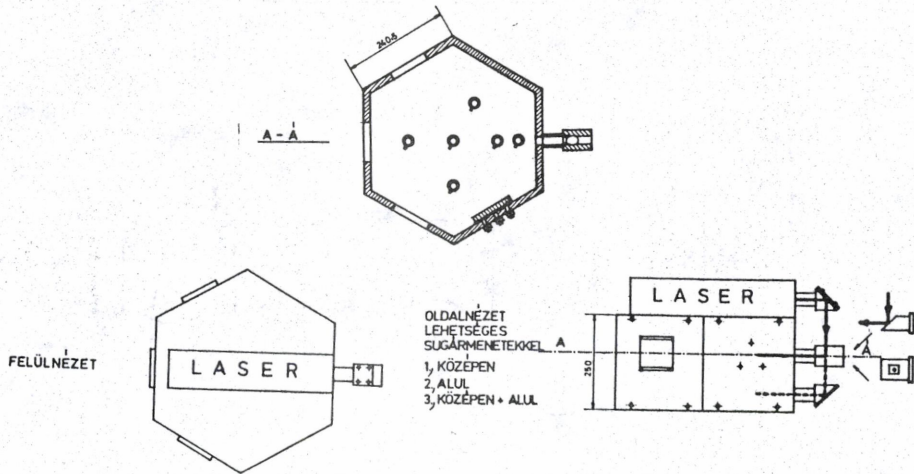
6. ábra

Tárgy, melyről a hologram készült.



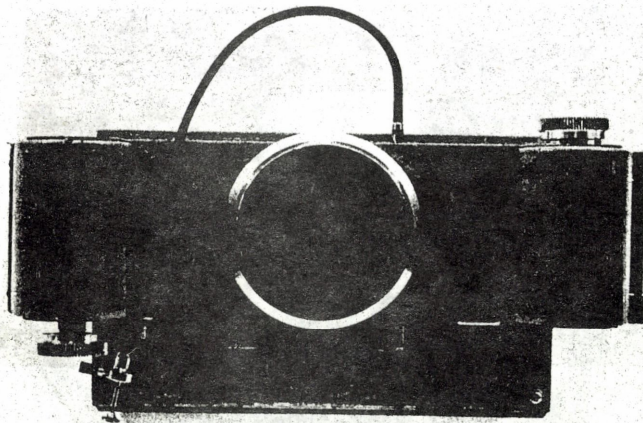
7. ábra

A MEDICOR megbízásából kidolgozott HOLOSIX kamera.



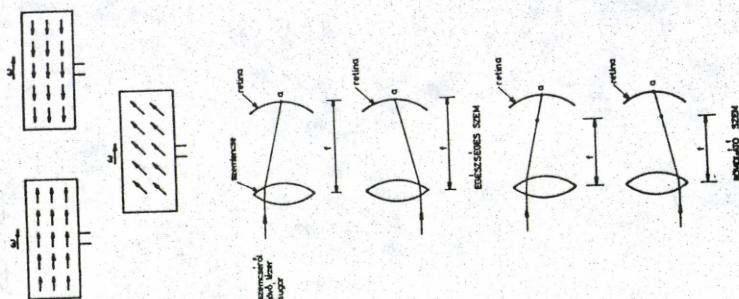
8. ábra

A HOLOSIX kamera elvi felépítése.



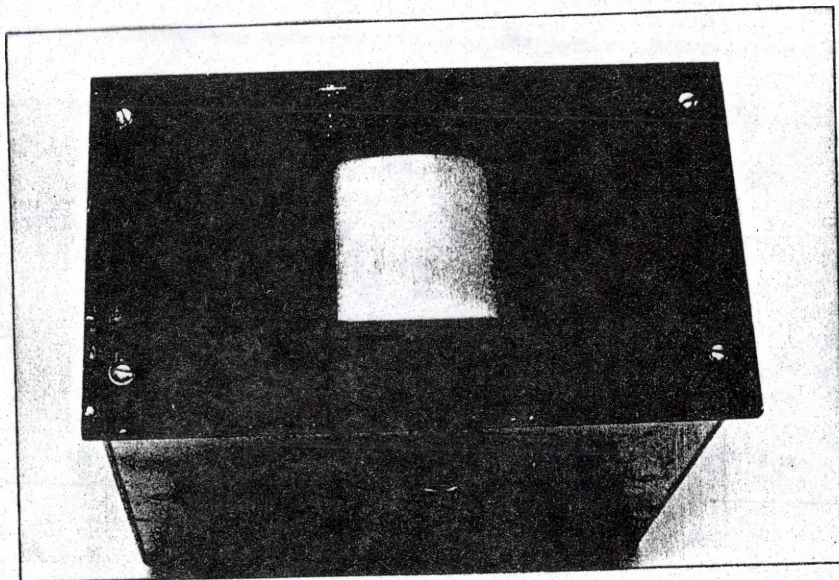
9. ábra

A HOLOSIX kamerához csatlakoztatható, valós idejű holográfiás interferometria elvégzéséhez szükséges feltét.



10. ábra

A szemcsézettség látszólagos mozgásának értelmezése.



11. ábra

A HOLOSIX kamerához csatlakoztatható, pszichofizikai kísérleteket lehetővé tevő feltét.

TAMÁS FRAN CZIA

AN ANALYTICAL METHOD FOR CALCULATING MULTICENTRE
INTEGRALS BUILT UP FROM GTF-S I.

Abstract: In this paper we explain the principles of an analytical method for calculating multicentre potential integrals built up from Gaussian basis functions. The method is based upon the theory of complex variable functions and the Fourier series form solutions of the two dimensional Laplace-equation. The multicentre integrals built up from Slater-type basis functions will be treated in the second part of the paper.

Note before the introduction: As almost each work from [3] to [12] in the referred literature contains the principles of the main part of the introduction in details we refer to books or articles only in a few cases in order to avoid the interruption of the text with references in many instances.

Received on the 20-th of January 1986.

Introduction: Let us consider a pair of two valence electrons a quantum mechanical system, which is the chemical bonding pair of a diatomic molecule. Let other valence electrons not be in the above-mentioned chemical bond. It is possible to construct the Hamilton operator of this electron pair if we choose the following work-hypotheses of the suitable ones. If the other electrons of the molecule are not valence electrons but so called core electrons belonging to either one or the other nucleus their effect on either of the valence electrons can be taken into account together with the influence of that nucleus they belong to. The effective potential of a system consisting of a nucleus and its core electrons can be expressed approximately with the aid of many pseudopotentials. [1]

These pseudopotentials can be derived from the statistical theory of atoms or from the wave mechanics. [1],[2],[3]

In the case of a valence electron mentioned above the effect of a nucleus and its core electrons on the valence electron can be given - among others - with the following pseudopotential form:

$$V(\mathbf{r}) = V_{l,r}(\mathbf{r}) + V_{s,r}(\mathbf{r}),$$

$$V_{l,r}(\mathbf{r}) = -\frac{Z_c}{r} - \frac{\alpha_d}{2(r^2+d^2)^2} - \frac{\alpha_q}{2(r^2+d^2)^3}$$

$$V_{s,r}(\mathbf{r}) = \sum_l A_l r^p \exp[-\xi_l r^q].$$

In these formulas $v_{lr}(\mathbf{r})$ given by Bardsley[4] is a "long range" pseudo-potential while V_r is a "short range" one. The "r" variable means the distances between the nucleus and the points of the three-dimensional space. Z_c is the effective number of the elementary positive charges in the system of the nucleus and its core electrons. The $d, \xi_l, \alpha_d, \alpha_q, \Delta_l$ quantities are atomic constants, p and q are integers.

The first member of v_{lr} is the effective potential of the nucleus and its core electrons affecting on the valence electrons of the atom, when it is not chemically bound to another one. The second and third members of $v_{lr}(\mathbf{r})$ are the consequences of the fact that the atoms chemically bound to each other and having different electronegativities polarize the atomic cores of each other, in consequence of which the atomic cores take effect on the valence electrons not with a pure Coulomb-type pseudopotential, but with a modified potential compared to the Coulomb-type one. If we put the origin of the system of co-ordinates in the nucleus of the first atom the Hamilton operator of the system of the two valence electrons has the following form in atomic units:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z_c(1)}{r_1} - \frac{Z_c(1)}{r_2} - \frac{Z_c(2)}{|\bar{R}_2 - \bar{r}_1|} - \frac{Z_c(2)}{|\bar{R}_2 - \bar{r}_2|} + \\ & + \frac{1}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} - \frac{\alpha_d(1)}{2(r_1^2 + d_1^2)^2} - \frac{\alpha_d(1)}{2(r_2^2 + d_1^2)^2} - \frac{\alpha_d(2)}{2[(\bar{R}_2 - \bar{r}_1)^2 + d_2^2]^2} - \\ & - \frac{\alpha_d(2)}{2[(\bar{R}_2 - \bar{r}_2)^2 + d_2^2]^2} - \frac{\alpha_q(1)}{2(r_1^2 + d_1^2)^3} - \frac{\alpha_q(1)}{2(r_2^2 + d_1^2)^3} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{\alpha_q (2)}{2 \left[\left(\bar{R}_2 - \bar{r}_1 \right)^2 + d_2^2 \right]^3} - \frac{\alpha_q (2)}{2 \left[\left(\bar{R}_2 - \bar{r}_2 \right)^2 + d_2^2 \right]^3} + \\
 & + \sum_l A_l (1) r_1^{p_1} \exp \left[-\xi_l (1) r_1^{q_1} \right] + \sum_l A_l (1) r_2^{p_1} \exp \left[-\xi_l (1) r_2^{q_1} \right] + \\
 & + \sum_l A_l (2) \left| \bar{R}_2 - \bar{r}_1 \right|^{p_2} \exp \left[-\xi_l (2) \left| \bar{R}_2 - \bar{r}_1 \right|^{p_2} \right] + \\
 & + \sum_l A_l (2) \left| \bar{R}_2 - \bar{r}_2 \right|^{p_2} \exp \left[-\xi_l (2) \left| \bar{R}_2 - \bar{r}_2 \right|^{p_2} \right] \quad (1)
 \end{aligned}$$

where $\bar{R}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ is the position vector of the second nucleus, $r_1 = |\bar{r}_1|$, $r_2 = |\bar{r}_2|$ where $\bar{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$,

$$\bar{r}_2 = (x_2, y_2, z_2),$$

that are the position vectors of the corresponding electrons.

When the two-electron system is in the n-th stationary state its state-function having the \bar{r}_1, \bar{r}_2 position-vectors, the S_1, S_2 spin-co-ordinates and the t time-variable as arguments can be written in the following form according to the non-relativistic quantum-mechanical theory of the many-body problem:

$$\psi_n \left(\bar{r}_1, \bar{r}_2, s_1, s_2, t \right) = \psi_n \left(\bar{r}_1, \bar{r}_2, s_1, s_2 \right) \exp \left[- \frac{2\pi\sqrt{-1}}{h} E_n t \right], \quad (2)$$

where h is the Planck-constant, E_n is the energy of the system satisfying the following equation too:

$$E_n = \int_{\infty} \psi_n^* \left(\bar{r}_1, \bar{r}_2, s_1, s_2 \right) \hat{H} \psi_n \left(\bar{r}_1, \bar{r}_2, s_1, s_2 \right) d\tau, \quad (3)$$

where $d\tau$ is the volume element in the configuration space of the system including the spin-co-ordinates of the electrons. The integral in (3) must be taken over the complete domain of all the variables. In the integration there is always included also a summation on the spin coordinates. $\psi_n \left(\bar{r}_1, \bar{r}_2, s_1, s_2 \right)$ is to be expressed with a linear combination of innumerable Slater-determinants of the second order built up from one-electron functions of $\psi(\bar{r}, s)$ type:

$$21. \quad \psi_n \left(\bar{r}_1, \bar{r}_2, s_1, s_2 \right) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \Phi_i \left(\bar{r}_1, \bar{r}_2, s_1, s_2 \right), \quad (4a)$$

$$22. \quad \Phi_i = \begin{vmatrix} \psi_{iI} \left(\bar{r}_1, s_1 \right) & \psi_{iII} \left(\bar{r}_1, s_1 \right) \\ \psi_{iI} \left(\bar{r}_2, s_2 \right) & \psi_{iII} \left(\bar{r}_2, s_2 \right) \end{vmatrix} \quad (4b)$$

where i denotes the i -th repetitionless second-class combination of an innumerable discrete sequence of one-electron $\psi(\bar{r}, s)$ functions, and the I, II indeces denote the first and the second member of the i -th combination of the $\psi(\bar{r}, s)$ one-electron functions

As $\psi_n(\bar{\mathbf{r}}_1, \bar{\mathbf{r}}_2, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, t)$ has to be normalized with the norm 1, $\psi_n(\bar{\mathbf{r}}_1, \bar{\mathbf{r}}_2, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ must also be normalized with the same norm. That is why the Φ_i determinants are to be built up from normalized $\psi(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{s})$ functions. The most general form of these $\psi(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{s})$ functions is the following:

$$\psi(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{s}) = \psi_+(\bar{\mathbf{r}})\alpha + \psi_-(\bar{\mathbf{r}})\beta, \quad (5)$$

where $\psi_+(\bar{\mathbf{r}})$ and $\psi_-(\bar{\mathbf{r}})$ have to satisfy the

$$\int_{\infty} \left[\psi_+^*(\bar{\mathbf{r}})\psi_+(\bar{\mathbf{r}}) + \psi_-^*(\bar{\mathbf{r}})\psi_-(\bar{\mathbf{r}}) \right] d^3\bar{\mathbf{r}} = 1 \quad (6)$$

condition, α and β are the basic spin-functions forming an orthonormal function-system. In the spinor representation given by Pauli

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

The $\psi_+(\bar{\mathbf{r}})$ and $\psi_-(\bar{\mathbf{r}})$ functions of (4a) are usually unknown. In order to reduce the number of the unknown functions in (4a) the $\psi(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{s})$ ones are frequently written in the following forms that are less general and flexible than the form of $\psi(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{s})$ in (5):

$$\psi(\bar{r}, s) = \begin{cases} \varphi_{\alpha}(\bar{r})\alpha \\ \varphi_{\beta}(\bar{r})\beta \end{cases}$$

Let each determinant in (4b) be built up from the $\psi(\bar{r}, s)$ functions of the form given in (7). Thus the sum in (4a) can contain - among others- such determinants in which $\varphi_{\alpha}(\bar{r}) \equiv \varphi_{\beta}(\bar{r})$. Let Φ_j and Φ_k be such determinants:

$$\Phi_j = \begin{vmatrix} \varphi_j(\bar{r}_1)\alpha(1) & \varphi_j(\bar{r}_1)\beta(1) \\ \varphi_j(\bar{r}_2)\alpha(2) & \varphi_j(\bar{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix}, \quad (8a)$$

$$\Phi_k = \begin{vmatrix} \varphi_k(\bar{r}_1)\alpha(1) & \varphi_k(\bar{r}_1)\beta(1) \\ \varphi_k(\bar{r}_2)\alpha(2) & \varphi_k(\bar{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix}. \quad (8b)$$

According to (3) and (4a):

$$\begin{aligned}
 E_n &= \int \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* \Phi_i^* \hat{H} \sum_{l=1}^{\infty} c_l \Phi_l \, d\tau = \\
 &= \int \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} c_i^* c_l \Phi_i^* \hat{H} \Phi_l \, d\tau = \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} c_i^* c_l \int \Phi_i^* \hat{H} \Phi_l \, d\tau = \quad (9)
 \end{aligned}$$

Let us examine the $\int \Phi_i^* \hat{H} \Phi_l \, d\tau$ integral in that case when $i=j$, $l=k$ from (8a) and (8b).

$$\begin{aligned}
 \int_{\infty} \Phi_j^* \hat{H} \Phi_k \, d\tau &= \int_{\infty} \begin{vmatrix} \varphi_j(\bar{r}_1)\alpha(1) & \varphi_j(\bar{r}_1)\beta(1) \\ \varphi_j(\bar{r}_2)\alpha(2) & \varphi_j(\bar{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix} \hat{H} \begin{vmatrix} \varphi_k(\bar{r}_1)\alpha(1) & \varphi_k(\bar{r}_1)\beta(1) \\ \varphi_k(\bar{r}_2)\alpha(2) & \varphi_k(\bar{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix} d\tau = \\
 &= \int_{\infty} \left[\varphi_j(\bar{r}_1)\varphi_j(\bar{r}_2)\alpha(1)\beta(2) - \varphi_j(\bar{r}_1)\varphi_j(\bar{r}_2)\alpha(2)\beta(1) \right]^* \cdot \\
 &\cdot \hat{H} \left[\varphi_k(\bar{r}_1)\varphi_k(\bar{r}_2)\alpha(1)\beta(2) - \varphi_k(\bar{r}_1)\varphi_k(\bar{r}_2)\alpha(2)\beta(1) \right] d\tau =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{\infty}^{\infty} \left[\varphi_j(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) \alpha(1)\beta(2) \right]^* \hat{H} \left[\varphi_k(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) \alpha(1)\beta(2) \right] d\tau - \\
 &- \int_{\infty}^{\infty} \left[\varphi_j(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) \alpha(1)\beta(2) \right]^* \hat{H} \left[\varphi_k(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) \alpha(2)\beta(1) \right] d\tau - \\
 &- \int_{\infty}^{\infty} \left[\varphi_j(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) \alpha(2)\beta(1) \right]^* \hat{H} \left[\varphi_k(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) \alpha(1)\beta(2) \right] d\tau + \\
 &+ \int_{\infty}^{\infty} \left[\varphi_j(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) \alpha(2)\beta(1) \right]^* \hat{H} \left[\varphi_k(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) \alpha(2)\beta(1) \right] d\tau
 \end{aligned} \tag{10}$$

Taking into account the fact that the $\alpha(1), \beta(1)$ and $\alpha(2), \beta(2)$ spin-function pairs are separately orthonormal function-systems we get from (10):

$$\int_{\infty}^{\infty} \hat{H} \Phi_k d\tau = 2 \int_{\infty}^{\infty} \int_{\infty}^{\infty} \varphi_j^*(\vec{r}_1) \varphi_j^*(\vec{r}_2) \hat{H} \left[\varphi_k(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) \right] d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \tag{11}$$

H being a sum of operators the right-hand side of (11) is a sum of integrals. Let us consider the following member of this sum satisfying the undermentioned equation:

$$\int_{\infty}^{\infty} \int_{\infty}^{\infty} \varphi_j^*(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) \frac{\alpha_d(2)}{\left[\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_1 \right)^2 + d_2^2 \right]^2} \varphi_k(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 =$$

$$= \int_{\infty} \varphi_j(\bar{r}_1) \frac{\alpha_d(2)}{\left[\left(\bar{r}_2 - \bar{r}_1 \right)^2 + d_2^2 \right]^2} \varphi_k(\bar{r}_1) d^3 \bar{r}_1 \cdot \int_{\infty} \varphi_j(\bar{r}_2) \varphi_k(\bar{r}_2) d^3 \bar{r}_2 \quad (12)$$

Let us investigate the first integral-factor in the right-hand side of (12). Let $\varphi_j(\bar{r}_1)$ and $\varphi_k(\bar{r}_1)$ be real functions. $\varphi_j(\bar{r}_1)$ and $\varphi_k(\bar{r}_1)$ can be written in the form of the linear combination of Gaussian-functions:

$$\varphi_j(\bar{r}_1) = \sum_p c_{j p} \left(\frac{2\alpha_{j p}}{\Pi} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left[-\alpha_{j p} \left(\bar{r}_1 - \bar{R}_p \right)^2 \right] \quad (13a)$$

$$\varphi_k(\bar{r}_1) = \sum_q c_{k q} \left(\frac{2\alpha_{k q}}{\Pi} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left[-\alpha_{k q} \left(\bar{r}_1 - \bar{R}_q \right)^2 \right] \quad (13b)$$

where $c_{j p}, c_{k q}, \alpha_{j p}, \alpha_{k q}$ are real constants. Putting (13a) and (13b) in the first integral-factor of (12) we get:

$$\begin{aligned} & \int_{\infty} \varphi_j(\bar{r}_1) \frac{\alpha_d(2)}{\left[\left(\bar{r}_2 - \bar{r}_1 \right)^2 + d_2^2 \right]^2} \varphi_k(\bar{r}_1) d^3 \bar{r}_1 = \\ & = \int_{\infty} \sum_p c_{j p} \left(\frac{2\alpha_{j p}}{\Pi} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left[-\alpha_{j p} \left(\bar{r}_1 - \bar{R}_p \right)^2 \right] \frac{\alpha_d(2)}{\left[\left(\bar{r}_2 - \bar{r}_1 \right)^2 + d_2^2 \right]^2} \cdot \\ & \cdot \sum_q c_{k q} \left(\frac{2\alpha_{k q}}{\Pi} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left[-\alpha_{k q} \left(\bar{r}_1 - \bar{R}_q \right)^2 \right] d^3 \bar{r}_1. \end{aligned} \quad (14)$$

This integral is also equal to a sum of integrals. The general member of this sum is the following:

$$\int_{\infty} c_{j p} c_{k q} \left(\frac{4 \alpha_{j p} \alpha_{k q}}{\pi^2} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left\{ - \left[\alpha_{j p} \left(\bar{R}_p - \bar{r}_1 \right)^2 + \alpha_{k q} \left(\bar{R}_q - \bar{r}_1 \right)^2 \right] \right\} \cdot \frac{\alpha_d(2)}{\left[\left(\bar{R}_2 - \bar{r}_1 \right)^2 + d_2^2 \right]^2} d^3 \bar{r}_1. \quad (15)$$

In this part of the paper we want to give a method for the beginning of the calculation of this integral.

Treatment: First let us express the exponent with the components of the $\bar{R}_p, \bar{R}_q, \bar{r}_1$ vectors:

$$- \left[\alpha_{j p} \left(\bar{R}_p - \bar{r}_1 \right)^2 + \alpha_{k q} \left(\bar{R}_q - \bar{r}_1 \right)^2 \right] = - \alpha_{j p} \left[\left(X_p - x_1 \right)^2 + \left(Y_p - y_1 \right)^2 + \left(Z_p - z_1 \right)^2 \right] - \alpha_{k q} \left[\left(X_q - x_1 \right)^2 + \left(Y_q - y_1 \right)^2 + \left(Z_q - z_1 \right)^2 \right]. \quad (16)$$

It will be sufficient to investigate in details only the members of (15) depending on x_1 because the members depending separately on $x_1, y_1,$

or z_1 have the same structure.

$$\begin{aligned}
 & \alpha_{j_p} (X_p - x_1)^2 - \alpha_{k_q} (X_q - x_1)^2 = -\alpha_{j_p} (X_p^2 - 2X_p x_1 + x_1^2) - \alpha_{k_q} (X_q^2 - 2X_q x_1 + x_1^2) = \\
 & = -\left[\alpha_{j_p} X_p^2 - 2\alpha_{j_p} X_p x_1 + \alpha_{j_p} x_1^2 + \alpha_{k_q} X_q^2 - 2\alpha_{k_q} X_q x_1 + \alpha_{k_q} x_1^2 \right] = \\
 & = -\left[(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}) x_1^2 - 2(\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q) x_1 + \alpha_{j_p} X_p^2 + \alpha_{k_q} X_q^2 \right] = \\
 & = -(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}) \left[x_1^2 - \frac{2(\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q)}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} x_1 + \frac{\alpha_{j_p} X_p^2 + \alpha_{k_q} X_q^2}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} \right] = \\
 & = -(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}) \left[\left(x_1 - \frac{\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} \right)^2 + \frac{\alpha_{j_p} X_p^2 + \alpha_{k_q} X_q^2}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} - \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} \right)^2 \right] = -(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}) \left[x_1 - \frac{\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} \right]^2 + \\
 & + \frac{(\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q)^2}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} - (\alpha_{j_p} X_p^2 + \alpha_{k_q} X_q^2). \tag{17}
 \end{aligned}$$

Now we can see that introducing the

$$\xi = x_1 - \frac{\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} \tag{18a}$$

$$\eta = y_1 - \frac{\alpha_{j_p} Y_p + \alpha_{k_q} Y_q}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} \tag{18b}$$

$$\zeta = z_1 - \frac{\alpha_{j_p} Z_p + \alpha_{k_q} Z_q}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} \quad (18c)$$

arguments in place of X_1, Y_1, Z_1 the exponential function factor in the integrand is to be written in the

$$\exp \left[- \left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right) \left(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 \right) \right] \text{ form.}$$

The integral in (15) expressed with the $\xi, \eta, \zeta,$ arguments gets a constant multiplier in front of the sign of the integration:

$$\exp \left[\frac{\left(\alpha_{j_p} X_p + \alpha_{k_q} X_q \right)^2 + \left(\alpha_{j_p} Y_p + \alpha_{k_q} Y_q \right)^2 + \left(\alpha_{j_p} Z_p + \alpha_{k_q} Z_q \right)^2}{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}} + \right. \\ \left. - \left(\alpha_{j_p} X_p^2 + \alpha_{k_q} X_q^2 \right) - \left(\alpha_{j_p} Y_p^2 + \alpha_{k_q} Y_q^2 \right) - \left(\alpha_{j_p} Z_p^2 + \alpha_{k_q} Z_q^2 \right) \right]$$

rising only from the (17) expression of the exponent because from (18) we get the

$$dx_1 = d\xi \quad (19a), \quad dy_1 = d\eta \quad (19b), \quad dz_1 = d\zeta \quad (19c)$$

equations not giving constant multipliers to be written in front of the sign of the integration.

Introducing the

$$\xi' = \left(\alpha_{jp} + \alpha_{kq} \right)^{\frac{1}{2}} \xi \quad (20a)$$

$$\eta' = \left(\alpha_{jp} + \alpha_{kq} \right)^{\frac{1}{2}} \eta \quad (20b)$$

$$\zeta' = \left(\alpha_{jp} + \alpha_{kq} \right)^{\frac{1}{2}} \zeta \quad (20c)$$

arguments in place of ξ, η, ζ the form of the exponential factor in the integrandus will be simpler:

$$\exp \left[- \left(\xi'^2 + \eta'^2 + \zeta'^2 \right) \right].$$

From (20) we get:

$$d\xi = \left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right)^{-\frac{1}{2}} d\xi' \quad (21a)$$

$$d\eta = \left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right)^{-\frac{1}{2}} d\eta' \quad (21b)$$

$$d\zeta = \left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right)^{-\frac{1}{2}} d\zeta' \quad (21c)$$

Taking into account (18) and (21) we can write:

$$dx_1 = \left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right)^{-\frac{1}{2}} d\xi' \quad (22a)$$

$$dy_1 = \left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right)^{-\frac{1}{2}} d\eta' \quad (22b)$$

$$dz_1 = \left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right)^{-\frac{1}{2}} d\zeta' \quad (22c)$$

(21) gives another constant multiplier accompanying to the first one mentioned between (17) and (18):

$$\left(\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q} \right)^{-\frac{3}{2}}$$

Now let us transform the "polarizational" part of the integrandus. Its original form is:

$$\frac{\alpha_d(2)}{\left[\left(\bar{R}_2 - \bar{r}_1\right)^2 + d_2^2\right]^2} = \frac{\alpha_d(2)}{\left[\left(X_2 - x_1\right)^2 + \left(Y_2 - y_1\right)^2 + \left(Z_2 - z_1\right)^2 + d_2^2\right]^2} \quad (23)$$

Applying the

$$\xi' = \left(\alpha_{jp} + \alpha_{kq}\right)^{\frac{1}{2}} \left[x_1 - \frac{\alpha_{jp} X_p + \alpha_{kq} X_q}{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}} \right] \quad (24a)$$

$$\eta' = \left(\alpha_{jp} + \alpha_{kq}\right)^{\frac{1}{2}} \left[y_1 - \frac{\alpha_{jp} Y_p + \alpha_{kq} Y_q}{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}} \right] \quad (24b)$$

$$\zeta' = \left(\alpha_{jp} + \alpha_{kq}\right)^{\frac{1}{2}} \left[z_1 - \frac{\alpha_{jp} Z_p + \alpha_{kq} Z_q}{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}} \right] \quad (24c)$$

formulas rising from (18) and (20) in (22) we get for the right side of

(23):

$$\frac{\alpha_d(2)}{\left\{ \left[X_2 - \frac{1}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \left(\xi' + \frac{\alpha_{jp} X_p + \alpha_{kq} X_q}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \right) \right]^2 + \left[Y_2 - \frac{1}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \left(\eta' + \frac{\alpha_{jp} Y_p + \alpha_{kq} Y_q}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \right) \right]^2 \right\}}$$

$$\alpha_d (2) \quad (25)$$

$$+ \left[Z_2 - \frac{1}{\sqrt{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}}} \left[\xi' + \frac{\alpha_{j_p} Z_p + \alpha_{k_q} Z_q}{\sqrt{\alpha_{j_p} + \alpha_{k_q}}} \right] \right]^2 + d^2 \Bigg\}^2$$

Multiplying (25) with $\exp \left[- \left(\xi'^2 + \eta'^2 + \zeta'^2 \right) \right]$ we get the form of the integrandus expressed with the ξ', η', ζ' arguments and not containing any constant multipliers in front of the sign of the integration. Further on we will disregard the constant multipliers because it is possible to expound the principles of the beginning of the calculation disregarding them.

The integration in (15) was $\int_{\infty} f(\bar{r}_1) d^3 \bar{r}_1$ - type and we have

transformed it to the $\int_{\infty} F(\bar{\rho}) d^3 \bar{\rho}$ form, where $\bar{\rho} = (\xi', \eta', \zeta')$, $d^3 \bar{\rho} =$

$d\xi' \cdot d\eta' \cdot d\zeta'$. The $\int_{\infty} F(\bar{\rho}) d^3 \bar{\rho}$ integration means simple integrations on the ξ', η', ζ' arguments from $-\infty$ to $+\infty$ in each case. It is allowed to begin the integration with that variable we want to, because the limits of the three single integrations are constants. So let us begin with the integration on ξ' . In this case the two other variables are to be considered as constants. The form of the integral on ξ' is the

following:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha_d(2) \exp[-(\eta'^2 + \zeta'^2)] \exp[-\zeta'^2]}{\left\{ \left[X_2 - \frac{1}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \left(\zeta' + \frac{\alpha_{jp} X_p + \alpha_{kq} X_q}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \right) \right]^2 + d'^2 \right\}^2} d\zeta' \quad (26)$$

where

$$d'^2 = \left[Y_2 - \frac{1}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \left(\eta' + \frac{\alpha_{jp} Y_p + \alpha_{kq} Y_q}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \right) \right]^2 + \left[Z_2 - \frac{1}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \left(\zeta' + \frac{\alpha_{jp} Z_p + \alpha_{kq} Z_q}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \right) \right]^2 + d^2 \geq d^2 \quad (27)$$

Let us introduce the following notations:

$$\Gamma \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{1}{\sqrt{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}}} \quad (28a),$$

$$\Gamma_x \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{\alpha_{jp} X_p + \alpha_{kq} X_q}{\alpha_{jp} + \alpha_{kq}} \quad (28b)$$

Using these notations the integral in (26) has the following form:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha_d(2) \exp[-(\eta'^2 + \zeta'^2)] \exp[-\xi'^2]}{[(X_2 - \Gamma \xi' + \Gamma_x)^2 + d'^2]^2} d\xi' \quad (29)$$

Let us introduce the ϑ notation with the following definition:

$\vartheta = X_2 + \Gamma_x$. With this notation the integral in (29) can be written in the following form:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha_d(2) \exp[-(\eta'^2 + \zeta'^2)] \exp[-\xi'^2]}{[(\vartheta - \Gamma \xi')^2 + d'^2]^2} d\xi' \quad (30)$$

First we have to solve the problem of the calculation of the integral of the following-type:

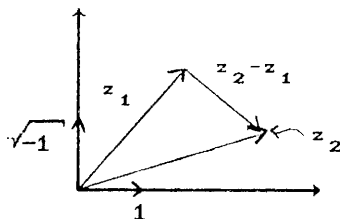
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-\xi'^2]}{[(\vartheta - \Gamma \xi')^2 + d'^2]^2} d\xi' \quad (31)$$

If we solve the problem of the calculation of this integral, then multiplying the result with $\exp[-(\eta'^2 + \zeta'^2)]$ we can continue the integration on η' or in the other case on ζ' . Now let us deal with the

integral in (31). This integral can be calculated approximately with the method of the numerical analysis. In this case we ought to apply the Hermite-Gauss integration formula approaching the value of the integral with a sum. With this technique we could calculate the original $\int_{-\infty}^{\infty} \dots d^3\vec{r}$ integral applying the Hermite-Gauss-formula three times. But in this article we want to explain the beginning of an analytical method.

In mathematics one of the methods for calculating definite real integrals is based upon the so-called residuum-theorem of the theory of complex variable functions. In some cases we can use a simpler form of this theorem, the Cauchy-theorem. Let us begin with showing the possibilities and the conditions of applying Cauchy's theorem for calculating definite real integrals.

Let $z = x + \sqrt{-1} \cdot y \equiv x + iy$, where x, y are real numbers. x is the real part of z while iy is the imaginary one. Consisting of two parts z is called a complex number. The complex numbers can be described as the vectors of the complex Gauss-Argand number-plane:



If $z_1 = x_1 \pm iy_1$, $z_2 = x_2 \pm iy_2$, then

$$z_1 \pm z_2 = (x_1 \pm x_2) + i(y_1 \pm y_2), \quad (32a)$$

$$\begin{aligned} z_1 \cdot z_2 &= (x_1 + iy_1) \cdot (x_2 + iy_2) = \\ &= x_1x_2 + ix_1y_2 + iy_1x_2 - y_1y_2 = \\ &= (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_1y_2 + x_2y_1) \end{aligned} \quad (32b)$$

according to the definitions of the summation and the multiplication of complex numbers.

Let $f(z)$ be a function of z projecting the complex number-plane onto itself. As the values of $f(z)$ are complex numbers $f(z)$ consists of a real and an imaginary part:

$$f(z) = u(x,y) + iv(x,y), \quad (33)$$

where $u(x,y)$ and $v(x,y)$ are real functions.

$\int_a^b f(z) dz$ means a complex integral of the $f(z)$ function that must be taken on the complex number-plane along the G curve between its a and b points:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(z) dz &= \int_a^b [u(x,y) + iv(x,y)] d(x+iy) = \\ &= \int_a^b [u(x,y) + iv(x,y)] dx + \int_a^b [u(x,y) + iv(x,y)] d(iy) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_a^b u(x,y)dx + i \int_a^b v(x,y)dx + i \int_a^b u(x,y)dy - \int_a^b v(x,y)dy = \\
 &= \int_a^b [u(x,y)dx - v(x,y)dy] + i \int_a^b [u(x,y)dx + v(x,y)dy], \quad (34)
 \end{aligned}$$

where we have used (32a) and (32b).

It is to be seen that a complex integral of a complex variable function can be calculated with the aid of real integrals.

Let G be a closed curve of the complex number-plane and let $f(z)$ be analytical on the set consisting of all points of the closed G curve and also in all points of the region of the plane bordered by this curve. In this case

$$\oint_{(G)} f(z)dz = 0. \quad (35)$$

This is Cauchy's theorem. The analyticity of $f(z)$ on a set means that

$$\left| f'(z) \right| = \left| \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(z+h) - f(z)}{h} \right| < + \infty \quad (36)$$

exists in each point of the set, where h means complex numbers. The operation defined in (36) is called the complex derivation of $f(z)$.

Cauchy and Riemann have proved that $f'(z)$ exists in the z point only in that case if the $\frac{\partial u}{\partial x}$, $\frac{\partial u}{\partial y}$, $\frac{\partial v}{\partial x}$, $\frac{\partial v}{\partial y}$, partial derivatives exist in this point and satisfy the so-called Cauchy-Riemann equations:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} \quad (37)$$

How can we calculate $\int_a^b f(x)dx$ using Cauchy's theorem? First we have to

write z in place of x in $f(x)$ then we have to form the $\oint f(z)dz$ integral

along a closed G curve containing the $[a, b]$ interval of the x -axis. If $f(z)$ is analytical along G and within the region of the plane bordered by G we can write using (35) and the $z=x, y=0$ equation:

$$\begin{aligned} \oint_{(G)} f(z)dz &= \int_{z_1}^{z_2} f(z)dz + \int_{z_2}^{z_3} f(z)dz + \dots + \int_{z_k}^{z_{k+1}} f(z)dz + \\ &+ \int_a^b f(x)dx + \dots + \int_{z_{n-1}}^{z_n} f(z)dz = 0, \end{aligned} \quad (38)$$

where $G_1 \cup G_2 \cup \dots \cup G_k \cup \dots \cup [a, b] \cup \dots \cup G_{n-1} = G$.

(\cup is the sign of forming the union of sets.)

If we can calculate the values of the integrals of the sum in the

right-hand side of (36) except $\int_a^b f(x) dx$ with simple analytical methods,

the (38) equation gives us an analytical formula for the value of
 $\int_a^b f(x) dx$.

The application of this method and that of the two-dimensional Laplace-equation for the calculation of the integral in (31) will be treated in the second part of this paper.

LITERATURE

- [1] P. Gombás: Pseudopotentiale, Springer Verlag, Wien, 1967.
- [2] P. Gombás: Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer Verlag, Wien, 1949.
- [3] H. Hellmann: Einführung in die Quantenchemie, Deuticke, Leipzig 1937.
- [4] J. N. Bardsley: Case Studies Atomic Physics 1974. 4. 299.
- [5] P. Gombás: Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Birkhäuser Verlag, Basel 1950.
- [6] G. Heber - G. Weber: Grundlagen der modernen Quantenphysik, Teubner Verlag, Leipzig 1956.
- [7] G. Marx: Quantum Mechanics, Technical Publishing House Budapest 1957., 1971. (in Hungarian)
- [8] R. Gáspár: Matrix Elements of Symmetrical Operators with Slater Determinants I. Acta Physica et Chimica Debrecina Debrecen, Hungaria 1962.
- [9] J. Ladik: Quantum Chemistry, Technical Publishing House Budapest 1969., (in Hungarian)
- [10] E. Kapuy - F. Török: The Quantum Theory of Atoms and Molecules Publishing House of the Hungarian Academy of Sciences, Budapest 1975. (in Hungarian)
- [11] K. Nagy: Quantum Mechanics Publishing House of Text Books Budapest 1978. (in Hungarian)
- [12] G. Náray-Szabó: Applied Quantum Chemistry Technical Publishing House Budapest 1979. (in Hungarian)
- [13] A. Ralston: A First Course in Numerical Analysis. Mc. Graw - Hill. Book Company 1965.
- [14] J. Duncan: Elements of Complex Analysis John Wiley & Sons.



FRANCZIA TAMÁS

A KVANTUMMECHANIKAI IMPULZUS ELTOLÁSI SZIMMETRIÁVAL
TÖRTÉNŐ BEVEZETÉSÉRŐL II.

Abstract: In this paper we continue building up the system of the axioms, theorems and definitions necessary to introduce the quantum-mechanical momentum with the method of moving symmetry. As the theorems given in this paper are well-known from the literature their verifications are omitted and the reader is referred to the corresponding literature. We introduce the wave-function the norm of which is equal to the Dirac-delta function with a new, axiomatic method.

Ez a dolgozat egy tanulmány második részé*, mely tanulmány célja egy lehetséges módszert adni a kvantummechanikai impulzusnak a címben jelzett úton történő bevezetéséhez az egyetemi oktatás szemináriumai számára.

* Francia Tamás: A kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriával történő bevezetéséről I. Tudományos Közlemények, Eger, 1985.

A fizikai mennyiségek szimmetriákkal történő bevezetésekor a kvantummechanikai axiómák, tételek és definíciók sorrendje valamelyest el kell, hogy térjen az egyetemi oktatásban megszokottól, esetenként új axiómákat, tételeket és definíciókat kell alkotnunk, a hagyományos felépítés néhány axiómája pedig tétellé válik. (Pl.: A Heisenberg-féle felcserélési relációk). Bizonyos axiómák kimondását pedig éppen a szimmetriák motiválják.

A tanulmány első részében a kvantummechanikai impulzus szimmetriával való bevezetéséhez szükséges axióma-, definíció- és tételrendszer első részét közöltük, az alábbiakban folytatjuk a szükséges axiómák, tételek és definíciók megadását.

A tanulmány első részében bevezettük az 1-re normált ψ - függvényt, melyet a továbbiakban állapotfüggvénynek nevezünk, és ennek birtokában az (1) egyenletet, melyet állapotegyenletnek, másképpen időtől függő Schrödinger-egyenletnek hívunk. Jelen munkában viszont az (1) egyenlet segítségével adjuk meg az 1-re nem normálható ψ -függvény fogalmát. Ehhez előrebocsátjuk az első rész néhány következményét.

Ha a III. axiómában létezőnek posztulált részhalmazok közül kiválasztunk egy tetszőleges részhalmazt, akkor teljesül az, hogy a részhalmaz minden egyes elemének tetszőleges konfigurációs térbeli ponthoz, tetszőleges időpillanathoz tartozó megtalálási valószínűsége egyenlő az adott részhalmazhoz a III. axióma alapján rendelt ψ -függvényből képzett

$\psi^* \psi dv_{\text{konf.}}$ kifejezésnek a tetszőlegesen választott konfigurációs térbeli pontban és a tetszőlegesen választott időpontban felvett értékével. Ha most a részhalmazon belüli elemek megtalálási valószínűségeit az

egyes elemekhez, azaz magukhoz a kvantummechanikai rendszerekhez rendelt ψ_k -függvényekkel akarjuk kifejezni, ez megtehető, ha a ψ_k -k csak egy-egy egységnyi abszolút értékű komplex szorzótényezővel különböznek a részhalmazhoz rendelt ψ -től, és így egymástól is. Mivel a $\psi^* \psi$ és így a $\psi_k^* \psi_k$ kifejezések valószínűségi sűrűségfüggvények, határozatlan konstansokat, határozatlan függvényeket a tetszőleges egységnyi abszolút értékű komplex szorzótényezőtől eltekintve nem tartalmazhatnak. Mivel a IV. axióma következtében ki kell, hogy elégítsék az (1) egyenletet, ezen egyenlet egy tetszőleges egységnyi abszolút értékű szorzótényezőt tartalmazó, folytonos és egyértékű, valamint egységre normált megoldásainak tekinthetők. A pusztán egységnyi abszolút értékű szorzótényezőben való eltérés miatt az (1) egyenletet ugyanazzal a

$$V(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N, t)$$

függvénnyel elégíti ki mindegyikük, hiszen egy tetszőleges, valós $\varphi -t$ tartalmazó $e^{i\varphi} \psi$ alakú megoldásban foglalhatók össze, mely megoldás az unicitási tétel következtében nem lehet folytonos, egyértékű és egyre normált megoldása egy másik V függvényt tartalmazó, egyébként (1)-alakú egyenletnek. Mindezek miatt az (1) egyenlet bal oldalán lévő operátor nemcsak a részhalmazhoz, hanem annak minden egyes eleméhez is változtatás nélkül, ugyanazzal a $V(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N, t)$ függvénnyel hozzárendelhető. Ennek következtében nevezhetjük az (1) egyenlet bal oldalán lévő operátort egyetlen rendszer Hamilton-operátorának az 5. definícióban.

Ezután hasonlítsuk össze a különböző részhalmazokhoz tartozó 1-re normált állapotfüggvényű rendszerek Hamilton-operátorait. Két kü-

lönböző részhalmazból származó rendszer Hamilton-operátorai lehetnek megegyezők, hiszen egy Hamilton-operátorhoz a parciális differenciálegyenletek elmélete szerint az (1) egyenletnek végtelen sok folytonos, egyértékű és egyre normálható megoldása tartozik. Ugyanakkor a két Hamilton-operátor lehet különböző is, ami triviális. Mivel a II. axióma rendszerei részecsketípusonként egyenlő számú részecskét tartalmaznak, a II. axióma halmazainak Hamilton-operátoraiban egyforma a parciális deriváltakat tartalmazó operátorösszeg és a részecskék közötti kölcsönhatás következtében fellépő $V_I(x_i - x_k, y_i - y_k, z_i - z_k)$ tag. ($i, k = 1, 2, \dots, N$; és $i \neq k$).

A különbözőséget a külső erőtér hatása miatt fellépő $V_j(x_j, y_j, z_j, t)$ tagok különbözősége okozhatja csak.

V. axióma: A II. axióma szerint létező halmaznak meghatározott feltétel teljesülése esetén vannak olyan valódi részhalmazai is, melyek elemeinek létezik ugyan egyértelműen meghatározott megtalálási valószínűsége a konfigurációs tér minden egyes pontjában bármelyik időpillanatban, azonban ez a valószínűség nem adható meg $\psi^* \psi dv$ alakban. A meghatározott feltétel a következő. Ha a részecskék mágneses momentumától, mint az eddigiekben, továbbra is eltekintünk -- így egy rendszer részecskéi csak elektromos töltésük következtében vannak kölcsönhatásban egymással, illetve külső erőterekkel -- s ennek megfelelően megadjuk a halmaz minden egyes egymástól különböző, az egyes rendszerekre vonatkozó klasszikus mechanikai potenciális energiafüggvényét, majd ezt az (1) egyenlet $V(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N, t)$ függvényének helyébe téve meghatározzuk

az (1) egyenlet megoldáshalmazát, e megoldáshalmaznak tartalmaznia kell olyan egymástól lineárisan független függvényeket, melyekre $\int_{\infty} \psi_{k'}^* \psi_k \, d\mathbf{v} = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, ahol $\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ a Dirac-féle deltafüggvény.

7. definíció: Az (1) egyenlet fenti tulajdonságú megoldásait Dirac-deltára normált megoldásoknak nevezzük.

VI. axióma: Az V. axióma Dirac-deltára normált függvényei egyenként hozzárendelhetők az V. axiómában létezőnek posztulált speciális tulajdonságú részhalmazok közül egy-egy részhalmazhoz. A hozzárendelés módja a következő. Valamely részhalmazhoz hozzárendelt, Dirac-deltára normált ψ függvényből képzett $\int \psi^* \psi \, d\mathbf{v}$ kifejezés arányos annak valószínűségével, hogy az adott részhalmaz tetszőlegesen kiválasztott eleme az adott időpillanatban megtalálható a konfigurációs tér adott pontjában. A Dirac-deltára normált és valamely részhalmazhoz a fenti módon hozzárendelt ψ -függvényt az illető részhalmazon belüli rendszerek állapotfüggvényének nevezzük.

8. definíció: Ugyanazon konfigurációs téren értelmezett két állapotfüggvény skaláris szorzatának nevezzük az $\int_{\infty} \psi_1^* \psi_2 \, d\mathbf{v} \equiv (\psi_1, \psi_2)$ integrált.

A skaláris szorzás tulajdonságaira nézve ld. [1] old.

1. tétel: A négyzetesen integrálható állapotfüggvények halmaza megszámlálhatóan végtelen dimenziójú Hilbert-teret alkot. [2]

VII. axióma: Egy N részecskéből álló rendszer egészét jellemző bármilyen fizikai mennyiség lehetséges értékei fizikai mennyiségenként egy-egy meghatározott, a $3N$ -dimenziójú konfigurációs téren és az időn értelmezett állapotfüggvények halmazának elemeire ható lineáris hermitikus operátor sajátértékeivel egyeznek meg.

9. definíció: Az \hat{O} operátor " k_n " sajátértékét $(f_n - 1)$ -szeresen elfajultnak (degeneráltnak) nevezzük, ha e sajátértékhez f_n számú, egymástól lineárisan független sajátfüggvény tartozik.

2. tétel: (Riesz-Fischer-tétel) A megszámlálhatóan végtelen dimenziójú Hilbert-teret kifesztítő függvényeken értelmezett, tisztán diszkrét sajátértéksorozattal rendelkező lineáris hermitikus operátorok sajátfüggvényei teljes rendszert alkotnak, ami azt jelenti, hogy a Hilbert térbe tartozó bármilyen állapotfüggvény felírható e sajátfüggvények lineáris kombinációjaként. Tehát ha $\psi \in$ Hilbert-tér, akkor
$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{f_n} c_{nk} \varphi_{nk}$$

ahol φ_{nk} az illető operátor n -edik, $(f_n - 1)$ -szeresen elfajult sajátértékéhez tartozó k -edik sajátfüggvénye. A kifejtésben szereplő φ_{nk} függvények egymástól lineárisan függetlenek.

3. tétel: Egy csak diszkrét sajátértéksorozattal rendelkező lineáris her-

mitikus operátor sajátfüggvényei, melyek értelmezési tartományául a konfigurációs teret, vagy ezenkívül még az időt tekintjük, kielégítik az alábbi egyenleteket:

$$[\varphi_{ij}, \varphi_{ij}] = \text{véges.}$$

$$[\varphi_{ij}, \varphi_{kl}] = 0, \text{ ha } i \neq k.$$

Itt i és k az i -edik, illetve a k -edik sajátértéket jelöli, j és l pedig azt, hogy ezen sajátértékekhez tartozó melyik sajátfüggvényről van szó.

10. definíció: A $[\varphi_{ij}, \varphi_{kl}] = 0, \text{ ha } i \neq k$ egyenletet kielégítő függvényeket, azaz a két skalárisan összeszorozott függvényt egymásra ortogonálisnak nevezzük, a $[\varphi_{ij}, \varphi_{ij}] = 1$ egyenletet kielégítő függvényeket pedig 1-re normálnak.

4. tétel: A lineáris hermitikus operátorok bármely elfajult sajátértékéhez tartozó, egymástól lineárisan független sajátfüggvények páronként nem feltétlenül ortogonálisak egymásra. (Az egyes sajátfüggvények viszont normáltak, alkalmas szorzótényezővel speciálisan egyre is normálhatók.)
[1] , [2]

5. tétel: Tetszőlegesen adott, $(r_n - 1)$ -szeresen degenerált sajátértékhez tartozó lineárisan független sajátfüggvények összességéből előállítható

pontosan f_n számú olyan lineáris kombináció, mely lineáris kombinációk egymásra páronként ortogonálisak. (Schmidt-féle ortogonalizációs eljárás) [1] 86. o.

6. tétel: Az 1. tételben felírt sorfejtés c_{mk} együtthatóinak értéke abban az esetben, ha a sorfejtéshez olyan sajátfüggvényrendszert használunk, amelyik ortonormált: *

$$c_{mk} = (\varphi_{mk}, \psi),$$

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{f_n} (\varphi_{nk}, \psi) \varphi_{nk}.$$

A tétel igazolásához $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{f_n} c_{nk} \varphi_{nk}$ mindkét oldalát balról skalá-

risan szorozzuk φ_{mk} -val, majd figyelembe vesszük a φ_{nk} -függvények ortonormáltságát.

7. tétel: Ha ψ 1-re normált eleme a Hilbert-térnek, akkor a fenti sorfejtés felhasználásával bebizonyítható, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{f_n} |c_{nk}|^2 = 1, \quad \text{vagy}$$

(2)

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{f_n} |(\varphi_{nk}, \psi)|^2 = 1.$$

* Az egy-, illetve kétindexes φ_{nk} -függvények a továbbiakban is mindenütt ortogonálisak egymásra. (Schmidt-módszer)

Az említett eredmények egyszerűen specializálhatók arra az esetre, amikor az operátorok sajátértékei között nincs elfajult sajátérték.

VIII. axióma: Annak valószínűsége, hogy egy mérés előtt négyzetesen integrálható állapotfüggvényű rendszeren elvégzett mérés az illető fizikai mennyiség értékére a k_n értéket adja, abban az esetben, amikor a fizikai mennyiséghez tartozó operátor sajátértékei diszkrét sorozatot alkotnak, továbbá a k_n sajátérték $(f_n - 1)$ -szeresen degenerált, a következő:

$$\sum_{k=1}^{f_n} |c_{nk}|^2 = \sum_{k=1}^{f_n} \left| (\varphi_{nk}, \psi) \right|^2.$$

Mivel az egyes sajátértékek mérési eredményként való fellépte egymást kizáró események teljes eseményrendszerét alkotja, ezen események összegének bekövetkezési valószínűsége 1. A (2) egyenlet éppen ezt fejezi ki.

Következmény: (A 7. tételé és a VIII. axiómáé) Ha $\hat{O} \psi = k_n \psi$, akkor $\psi \in \{\varphi_{nk}\}$, ahol n a k_n sajátérték sorszáma. Mivel az egyes φ_{nk} függvények ortonormáltak, a (2) összegben csak egy tag lesz zérustól különböző, az melyben $\psi = \varphi_{nk}$. Így az adódik, hogy $\left| (\varphi_{nk}, \psi) \right| = 1$. Ezt összevetve a VIII. axiómával, az adódik, hogy $\hat{O} \psi = k_n \psi$ esetén k_n mérési valószínűsége 1.

8. tétel: Ha valamely fizikai mennyiség lehetséges értékei egy diszkrét sajátértéksorozatú, elfajult sajátértékkel is, vagy csak azokkal rendelkező lineáris hermitikus operátor sajátértékei, akkor e fizikai mennyiség várható értéke feltéve, hogy a mérés előtti rendszerek állapotfüggvénye olyan ψ , mely eleme a Hilbert-térnek, a következő: $\bar{o} = \left(\psi, \hat{O} \psi \right)$, ahol \hat{O} a fizikai mennyiséget leíró operátor.

Bizonyítás: \hat{O} sajátértékeit jelöljük k_n -nel, a k_n sajátérték mérési valószínűségét $W(k_n)$ -nel.

A valószínűségszámítás szerint:

$$\begin{aligned} \bar{o} &= \sum_{n=1}^{\infty} k_n W(k_n) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} k_n \sum_{m=1}^f |c_{nm}|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} k_n \sum_{m=1}^f c_{nm} c_{nm}^* = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} k_n \sum_{m=1}^f \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{f_l} c_{nm} c_{ls}^* (\varphi_{ls}, \varphi_{nm}) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^f \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{f_l} k_n c_{nm} c_{ls}^* (\varphi_{ls}, \varphi_{nm}) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^f \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{f_l} (c_{ls} \varphi_{ls}, k_n c_{nm} \varphi_{nm}) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{f_n} \sum_{s=1}^{f_l} (c_{l_s} \varphi_{l_s}, \hat{O} c_{nm} \varphi_{nm}) = \\
 &= \left[\sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{f_l} c_{l_m} \varphi_{l_m}, \hat{O} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{f_n} c_{nm} \varphi_{nm} \right] = (\psi, \hat{O}\psi),
 \end{aligned}$$

q. e. d. .

Itt a második sorban felhasználtuk a

$$c_{nm}^* = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{f_l} \delta_{ln} \delta_{sm} c_{l_s}^*$$

egyenlőséget, ahol $\delta_{ln} \delta_{sm} = (\varphi_{l_s}, \varphi_{nm})$.

9. tétel: Legyen \hat{O} a $3N$ dimenziós konfigurációs téren és az időn értelmezett állapotfüggvényekre ható, folytonos sajátértékkészletű, lineáris hermitikus operátor. Egy ilyen operátor sajátfüggvényei a következő egyenletet elégítik ki:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_a(\bar{R}) \varphi_{a'}(\bar{R}) d^3\bar{R} = \delta(a-a'),$$

ahol a és a' két sajátérték, $\varphi_a(\bar{R})$ és $\varphi_{a'}(\bar{R})$ az ezeknek megfelelő egy-egy sajátfüggvény, \bar{R} a konfigurációs tér szám $3N$ -ese, δ a Dirac-féle deltafüggvény. [11], [12]

10. tétel: A 9. tételben szereplő függvények kielégítik a következő

egyenletet is:

$$\int_{a_1}^{a_2} \varphi_a(\bar{R}) \varphi_a^*(\bar{R}') da = \delta(\bar{R}-\bar{R}'),$$

ahol a_1 , illetve a_2 a folytonos értékkészletű fizikai mennyiség legkisebb, illetve legnagyobb értéke $[a_1 \leq a \leq a_2]$ "a" a fizikai mennyiség egyik értéke, φ_a a hozzátartozó sajátfüggvény. \bar{R} és \bar{R}' a konfigurációs tér pontjai, melyek speciálisan meg is egyezhetnek, δ a Dirac-féle deltafüggvény. [11],[2]

11. tétel: Levezethető, hogy egy tetszőleges állapotfüggvény előállítható az alábbi alakban:

$$\psi = \int_{a_1}^{a_2} \left(\sum_{k=1}^{f_a} c_k(a) \varphi_{ak} \right) da ,$$

ahol φ_{ak} a ψ -hez tartozó konfigurációs térrel azonos konfigurációs téren értelmezett, folytonos sajátértékkészletű, elfajult spektrumú operátornak az "a", (f_a-1) -szeresen elfajult sajátértékéhez tartozó k-adik sajátfüggvénye, és $a_1 \leq a \leq a_2$.

Nem elfajult spektrum esetén következik, hogy $\psi = \int_{a_1}^{a_2} c(a) \varphi_a da ,$

ami megtalálható: [1] 222-223. o.. $c_k(a) = (\varphi_{ak}, \psi)$,

illetve nem elfajult spektrum esetén

$$c(a) = (\varphi_a, \psi).$$

12. tétel: Ha ψ négyzetesen integrálható állapotfüggvény, akkor a 11. tételben felírt sorfejtés együtthatói az alábbi összefüggést elégítik ki:

$$\int_{a_1}^{a_2} \sum_{k=1}^{\infty} |c_k(a)|^2 da = 1 ,$$

ill. nem elfajult sajátérték sorozat esetén

$$\int_{a_1}^{a_2} |c(a)|^2 da = 1 .$$

Itt már feltettük, hogy a $c_k(a)$ -kban szereplő φ_{ak} -k a Dirac-deltára vannak normálva. [1], [2]

IX. axióma: Ha egy négyzetesen integrálható állapotfüggvényű kvantummechanikai rendszeren egy folytonos értékészletű fizikai mennyiség mérése zajlik le, (ψ a mérés előtti állapotfüggvény) akkor annak a valószínűsége, hogy a mérés eredménye az a' és a'' lehetséges értékek által meghatározott zárt intervallumba essék:

$$W(a', a'') = \int_{a'}^{a''} \sum_{k=1}^f \left| (\varphi_{ak}, \psi) \right|^2 da ,$$

ahol φ_{ak} a 11. tételben szereplő φ_{ak} -val azonos.

Nem elfajult spektrum esetén következik:

$$W(a', a'') = \int_{a'}^{a''} \left| (\varphi_a, \psi) \right|^2 da .$$

Itt is már feltételezzük, hogy a φ_{ak} illetve φ_a függvények a Dirac-deltára vannak normálva. [1], [2]

X. axióma: Az \hat{O} lineáris hermitikus, folytonos sajátértékkészletű operátorral reprezentált fizikai mennyiség várható értéke egy a mérés előtt ψ állapotfüggvényű rendszeren:

$$\bar{O} = (\psi, \hat{O}\psi) .$$

Következmény: (a X. axiómáé) Ha $(\psi, \psi)=1$, akkor

$$\bar{R} = \int_{\infty} \psi^* \hat{R} \psi dv_{\text{konf.}} ,$$

ahol \bar{R} a rendszer konfigurációs térbeli pontjába mutató $3N$ dimenziós vektor. Mivel a X. axióma szerint $\bar{R} = \int_{\infty} \psi^* \hat{R} \psi dv_{\text{konf.}}$

ezt összehasonlítva $\bar{R} = \int_{\infty} \psi^* \bar{R} \psi \, dv_{\text{konf.}}$ -vel kapjuk,
hogy $\hat{R} = \bar{R}$.

Következmény: \hat{R} sajátfüggvénye a Dirac-féle deltafüggvény: $\delta(\bar{R}-\bar{R}')$.

[11, 221. o., amely ugyan csak 1 dimenzióra bizonyít, de a gondolatmenete lényegileg megegyezik a jelen esetben alkalmazandó gondolatmenettel.

11. definíció: Az \hat{O} operátorral jellemzett fizikai mennyiség szórása a mérés előtt ψ állapotú rendszereken végrehajtott szimultán mérés során:

$$\sigma_{\hat{O}} = \sqrt{[\psi, (\hat{O}-\bar{O})^2 \psi]}.$$

13. tétel: Egy adott fizikai mennyiség valamely ψ állapothoz tartozó szórása akkor és csak akkor nulla, ha ψ (amely a mérés előtti állapotfüggvény) sajátfüggvénye az illető fizikai mennyiség operátorának.

Bizonyítás: $\sigma_{\hat{O}}^2 = [\psi, (\hat{O}-\bar{O})^2 \psi] = [(\hat{O}-\bar{O})\psi, (\hat{O}-\bar{O})\psi] = 0,$

akkor és csak akkor, ha $(\hat{O}-\bar{O})\psi=0$, mivel egy függvény abszolút értéke négyzetének határozott integrálja véges nem nullmértékű integrációs tartományra akkor és csak akkor nulla, ha maga a függvény azonosan nulla. A bizonyítás második egyenlőségjele után felhasználtuk azt a tényt, hogy

$\hat{O} - \bar{O}$ önadjungált operátor. $(\hat{O} - \bar{O})\psi = 0$ miatt
 $\hat{O}\psi = \bar{O}\psi$. Ezzel bebizonyítottuk, hogy ha a szórás nulla, akkor a rendszer mérés előtti állapotfüggvénye sajátfüggvénye a mért fizikai mennyiség operátorának.

A továbbiakban azt kell bizonyítanunk, hogy $\hat{O}\psi = k\psi$ fennállása esetén $\sigma_{\hat{O}} = 0$.

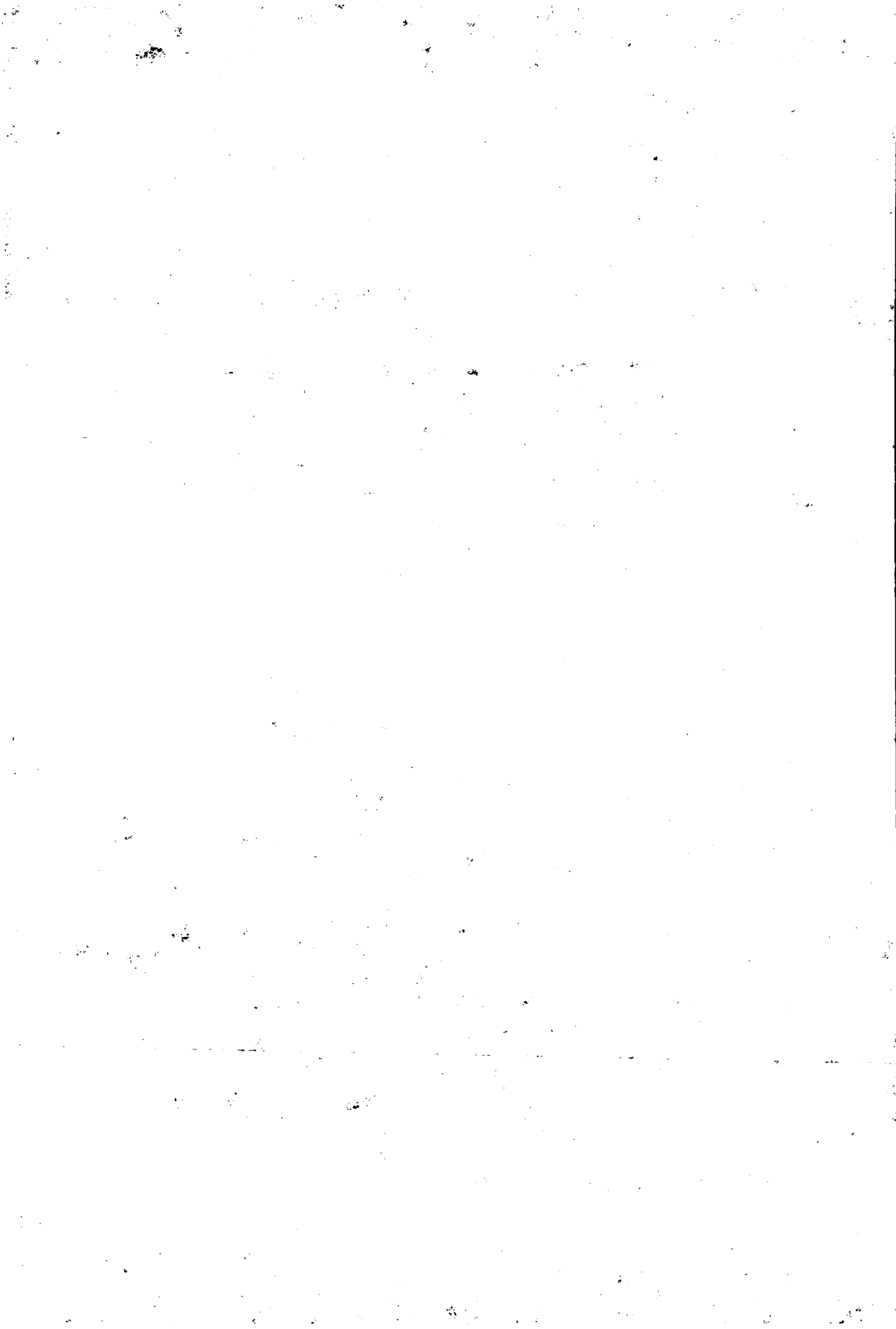
$$\sigma_{\hat{O}}^2 = [\psi, (\hat{O} - \bar{O})^2 \psi] = [(\hat{O} - \bar{O})\psi, (\hat{O} - \bar{O})\psi] = [(k - \bar{O})\psi, (k - \bar{O})\psi],$$

ahol k \hat{O} -nak az adott ψ sajátfüggvényhez tartozó sajátértéke. Mivel a VIII. axióma és ennek, valamint a 7. tételnek a következménye miatt $\hat{O}\psi = k\psi$ esetén k mérési valószínűsége 1^* , \bar{O} szükségképpen egyenlő k -val, s így a fenti skaláris szorzat az azonosan zérus függvény önmagával való skaláris szorzata, ami zérus. q. e. d.

* Figyelembe véve, hogy az egyes sajátértékek mérési eredményként való fellépte -- az összes sajátértékre -- egymást kizáró események teljes rendszere.

IRODALOMJEGYZÉK a II. részhez

1. Marx György: Kvantummechanika, Műszaki Könyvkiadó, Bp. 1971.
2. Kapuy Ede - Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete,
Akadémiai Kiadó, Bp.
3. Franczia Tamás: A kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriával
történő bevezetéséről, Tudományos Közlemények, Eger, 1984.



HIDASÍ KÁROLY

A BOLTZMANN-FÉLE ÁLLANDÓ KÍSÉRLETI MEGHATÁROZÁSA

Abstract: In his study the author writes about the experimental determination of Boltzmann's constant. A short history of colloid chemistry precedes the representation of the mensuration. This mensuration is based upon the law of sedimentation appearing also in Perrin's experiment. It is known, that in gravitational field the density of gases taken as a function of highness decreases exponentially.

$$N = N_0 \cdot e^{-\frac{\rho_0}{p_0} g \cdot z}$$

$$N = N_0 \cdot e^{-\frac{\mu \cdot g \cdot z}{kT}}$$

The $\frac{\rho_0}{p_0}$ relation is to be rewritten on the basis of the state-equation of the gas supposed to be ideal.

Thus k , Boltzmann's constant is to be determined with the help of Z_i and N_i .

The author used a colloidal solution made of cinnabar-green paint to the mensuration. After several revolvings of the colloidal solution the radius, the mass of the particles and at the end k are to be determined on the basis of Stokes's equation and the knowledge of the sedimentational length of time. The experimental results of the article give the value of k within the limit of error.

A főiskolai hőtán oktatásában közismert és gyakran használt a Boltzmann-féle állandó, de kísérleti meghatározására a kétórás gyakorlat miatt nem adódik lehetőség. Éppen ezért az irodalomból [1]; [2] jól ismert módszerek alapján közelítő eljárással meghatároztam a "k" értékét, és ezt ismertetem ebben a cikkben.

A mérési eljárás könnyebb megértése céljából rövid elméleti anyagot szükségesnek tartok ismertetni. A tárgyalás két részre tagozódik:

I. A Boltzmann-féle állandó meghatározásának rövid irodalmi áttekintése.

II. A Boltzmann-féle állandó gyakorlati meghatározása.

I.

1. A kolloidok elméletének alakulása 1749-1861-ig

Kolloid állapotban lévő rendszereknek nevezzük mindazon rendszereket, amelyekben $500 \text{ m}\mu$ és $1 \text{ m}\mu$ között váltakoznak a részecskék méretei. Ezekben a mérettartományokban a részecskék a molekuláris méreteknél még nagyobbak. [10]

A legelső tudományosnak tekinthető irodalmi mű 1749-ben jelent meg. Nagyrészen az arany kolloidoldatának képződésével foglalkozik. A szerző leírja, hogy "ha egy csepp aranyoldatot olyan nagy mennyiségű vízzel elegyítünk, amelyben az aranyat sem látni, sem ízlelni nem lehet, a víz egyetlen egy csepp ónoldattól mégis minden részében vörösre festődik". Ez világosan bizonyítja, milyen rendkívül kicsik lehetnek a részecskék. [4]

A fémszulfidok kolloidadatainak képződésére vonatkozóan 1785-ben tettek először megfigyeléseket. 1789-ben már adatokat találunk arra vonatkozóan, hogy a kénhidrogén vizes oldatainak oxidációja következtében tejszerű oldat keletkezik. Ritter 1804-ben a galvánelemekre megállapítja a redukció folytán történő fémkiválást és oldódást. Davy úgy nyert kolloid bóroldatot 1809-ben, hogy bórsavat káliummal olvasztott össze, és az olvadékot vízzel mosta. Egy évvel később Oberkamf aranykloridot hidrogénnel és foszforhidrogénnel redukált, így különféle színű kolloid aranyoldatokat állított elő.

1824-ben állítják elő a bór kolloidoldatát, egy évvel később a szilícium, szilíciumoxid és molibdénsav kolloidoldatát. Ugyanebben az évben Fischer figyelte meg, a fémek kolloidadatainak képződését más fémekkel

történő redukciója által.

1828 jelentős dátum a kolloidok történetében: Brown felfedezte a róla elnevezett részecskemozgást. A vanádiumpentoxid kolloidoldatának képződésével Berzelius foglalkozott 1831-ben.

Franhehenin [9] a kolloidkémia Graham előtti időszakának kimagasló egyénisége azokat a rendszereket, amelyeket ma kolloidoldatoknak nevezünk, kicsi kristályok, vagy kicsi cseppek szuszpenzióinak tekintette.

Szerinte a kolloidoldatok kétféleképpen keletkezhetnek:

a/ Finoman elporított anyagot folyadékkal összerázunk.

b/ Oldott anyagot oldatából valami módon kiválasztunk.

Faraday nevét kell még megemlíteni, aki 1856-ban behatóbban foglalkozott kolloid aranyoldatok előállításával és azok tulajdonságaival.

2. A kolloidika fejlődése napjainkig

Graham angol vegyész 1861-ben észlelte, hogy a könnyen kristályosodó anyagok diffúzió sebessége eltér a nem kristályosodó anyagok diffúziósebességétől. Pl. ha a sósav diffúzió sebességét egységnyinek vette, akkor a konyhasó 1,33-szor, a cukor 7-szer, a tojásfehérje 99-szer lassabban diffundált.

A viszonylag lassan kristályosodó anyagokat az enyv görög nevéből ($\kappa \omicron \lambda \lambda \alpha$ - kolla) képzett szóval kolloidoknak, a könnyen diffundáló kristályos vegyületeket krisztalloidoknak nevezte. Graham ma is használatos módszert dolgozott ki a kolloidok és a krisztalloid elválasztására. E módszer lényege, hogy a krisztalloid anyagok vizes oldataiból az oldott anyagok hártján keresztül érintkező vízbe, a kolloid anyagok viszont nem hatolnak át a hártján.

Ma már tudjuk, hogy a kristályos -- Graham szerint krisztalloid -- anyagokat átváltoztathatjuk kolloidokká és a kolloidokat krisztalloidokká. A kolloidok tehát nem jelentik az anyagok külön csoportját, hanem csak állapotát, vagyis a kolloid tulajdonság a testek részecskéinek méretétől függ.

3. A Boltzmann-féle állandó meghatározásának két különböző módszere

a/ Perrin mérési kísérlete a kolloidok ülepedésének törvénye alapján.

Az egyensúlyban levő gáz molekuláinak térbeli eloszlása akkor egyenletes, ha a nehézségi erőtér, vagy más erőtér hatásától eltekintünk. A nehézségi erőtérben tudvalevően a gáz sűrűsége (ρ), vagy az ezzel arányos koncentráció (N) a magassággal (Z) exponenciálisan csökken, nevezetesen a barométeres magasságformula szerint:

$$N = N_0 \cdot e^{-\frac{\rho_0}{\rho_0} g \cdot Z} \quad (1)$$

ahol N_0 , ρ_0 , ρ_0 rendre a $Z = 0$ szinthez tartozó koncentrációt, sűrűséget és a nyomást jelentik. Az ideálisnak feltételezett gáz állapotegyenlete alapján:

$$\frac{\rho_0}{\rho_0} = RT = \frac{\mu \cdot RT}{\mu} = \frac{k \cdot T}{\mu} \quad \text{ahol} \quad k = \frac{R}{L}; \quad L \approx 6 \cdot 10^{23}$$

de $\frac{1}{L} = \mu$ s így az (1) módosul:
$$N = N_0 \cdot e^{-\frac{\mu \cdot g \cdot Z}{kT}} \quad (2)$$

A Boltzmann-féle eloszlás a folyadékban lebegő apró, mikroszkóppal megfigyelhető kolloidális részecskék magasság szerinti eloszlása a leülepedési egyensúly bekövetkezése után a (2) szerint alakul.

A mikroszkóp megfelelő beállításával meghatározhatók a különböző Z_1 , Z_2 , ... magasságokhoz tartozó N_1 , N_2 , ... koncentrációk, melyek a mérések szerint a magassággal valóban exponenciálisan csökkennek.

A (2)-ben szereplő μ g egy részecskének az Archimedes-féle felhajtóerővel csökkentett súlyát jelenti, azaz

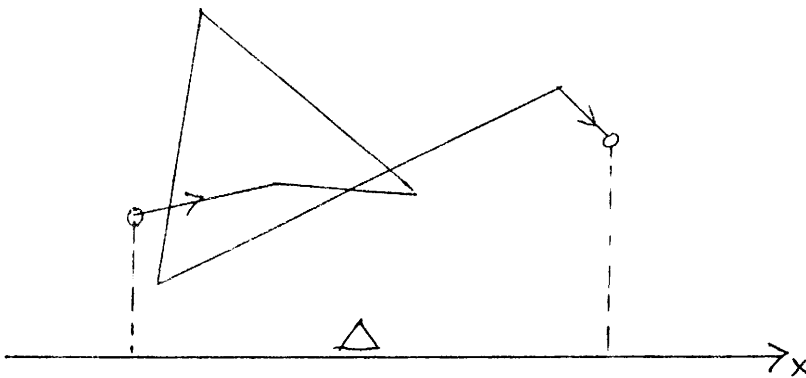
$$\mu = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3 (\rho - \rho^*) \quad (3)$$

a részecske hatásos tömege, amely a gömbalakú részecske r sugarának, ρ sűrűségének és a folyadék ρ^{**} sűrűségének mérésével meghatározható. Ily módon a (2) átalakításával

$$\frac{N}{N_0} = e^{\frac{-\mu \cdot q(z_2 - z_1)}{kT}} \quad (4)$$

csak k marad ismeretlennek, tehát a fenti eljárás alkalmas k meghatározására. Ezzel a módszerrel határozta meg Perrin 1909-ben a k értékét.

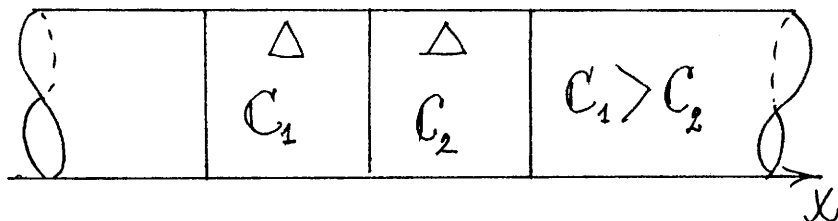
1.1] b/ A másik eljárás lényegét tekintve a Brown-féle mozgásból adódik. A Brown-féle molekuláris mozgás egzakt módon nehezen kezelhető, mert így rövid szabad úthosszokról van szó. Könnyen mérhető azonban egy meghatározott megfigyelési idő alatt a részecskék közepes elmozdulásának vetülete.



1. ábra

Az ábra egy kolloid részecske cikk-cakk mozgását szemlélteti. Δ jelöli a közepes elmozdulásoknak tetszés szerint választott $|x|$ tengelyre való vetületét valamilyen τ időtartam alatt.

Megfontolás céljából egy modellszerű elképzelést használunk.



2. ábra

A cső belsejében elképzelünk a cső tengelyére merőlegesen egy A határfelületet. τ megfigyelési időn belül ezt a tetszőszerint felvett határfelületet csak azok a részecskék tudják átlépni, melyeknek távolsága kisebb, vagy egyenlő a közepes elmozdulás Δ vetületével. A választó faltól (2. ábra) balra a részecskék koncentrációja C_1 , jobbra C_2 . A koncentráció diffúzió közben is állandónak tekinthető. (Első Fick-féle törvény érvényességi határa.)

A határfelüle ten való átlépések száma:

$$z = \frac{1}{2} \cdot A \cdot [C_1 - C_2] \quad (5)$$

Az $\frac{1}{2}$ arányossági tényező azt mutatja, hogy statisztikailag a részecskék fele mozog a határfelület irányába.

Ha a koncentrációesés fogalmát bevezetjük (koncentráció változás x irányba), akkor

$$\frac{dc}{dx} = \frac{C_1 - C_2}{x_2 - x_1} = - \frac{C_1 - C_2}{x_1 - x_2} = - \frac{C_1 - C_2}{\Delta} \quad (6)$$

$$C_1 - C_2 = - \Delta \cdot \frac{dc}{dx}$$

(5)-be behelyettesítve:

$$z = - \frac{1}{2} \cdot A \cdot \Delta^2 \cdot \frac{dc}{dx} \quad (7)$$

Ez τ megfigyelési időre vonatkozik, tehát

$$\frac{z}{\tau} = - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot A \cdot \Delta^2 \cdot \frac{dc}{dx} \quad (8)$$

Az egységnyi idő alatt történő átlépések száma egyenlő az egységnyi idő alatt átlépő mol-ok számával. Így a (8) Fick-féle törvény kinematikailag levezetett alakja:

$$\frac{dN}{d\tau} = - D \quad A \cdot \frac{dc}{dx}$$

ahol D a diffúziós állandó. Ez viszont

$$D = \frac{kT}{6\pi \cdot r \cdot \eta}$$

összefüggéssel egyenlő, ahonnan a Boltzmann-féle állandó

$$k = \frac{6\pi \cdot D \cdot r \cdot \eta}{T}$$

meghatározható. A $6\pi \cdot r \cdot \eta$ a Stokes-féle törvény szerint, a gömbalakú részecskék áramlási ellenállása, η a kolloidrendszer viszkozitása.

II.

A gyakorlati mérés lényegét tekintve a Perrin eljárásnak -- gumigutti helyett -- cinóberzöld kolloidra vonatkoztatott megismétlése.

A (4) egyenletben szereplő μ hatásos tömegnek, a z -hez tartozó N és Z_0 -hoz tartozó N_0 számértékeinek meghatározását kellett elvégezni. Ha

ezen mennyiségek ismertek, akkor k értékének meghatározása numerikus számolással elvégezhető.

1. A részecske sugarának meghatározása

a/ A cinóberzöld szilárd állapotú anyag sűrűségének (ρ) meghatározása. A festékből "téglatest" alakot készítettünk vágással. Az élek meghatározását a gyakorlatokon szokásos hibaszámítással végeztük el. A test térfogata:

$$V = (0,433 \pm 6,51 \cdot 10^{-3}) 1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3$$

lett.

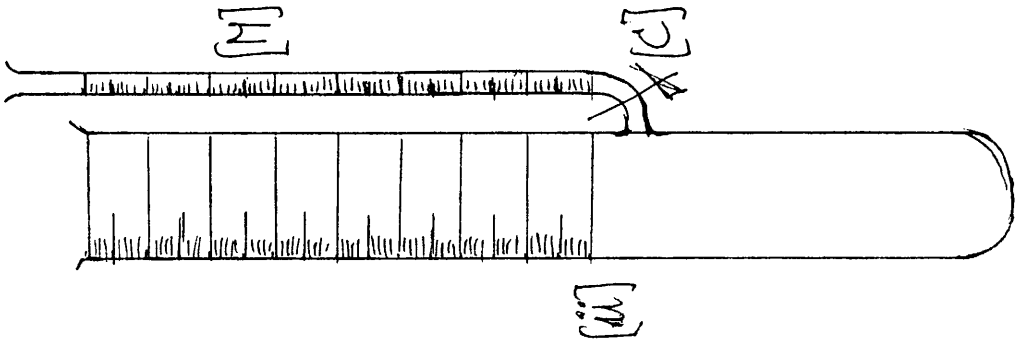
A test tömege:

$$m = (1,58 \pm 0,009) \cdot 10^{-3} \text{ kg.}$$

Így a test sűrűsége:

$$\rho = \frac{m}{V} = (3,648 \pm 7,57 \cdot 10^{-2}) \cdot 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad (9)$$

b/ Az r meghatározása Wiegner készülékkel.



3. ábra

A Wiegner készülék (3. ábra) egy 2-3 cm átmérőjű kb. 70 cm hosszú (ü) ülepitőcsőből és egy ehhez alsó harmadában csatlakozó néhány mm átmérőjű (M) mérőcsőből áll, amely a csatlakozási hely közelében csappal elzárható. A mérés menete a következő:

Az M csövet színültig töltöm az előre elkészített ismert sűrűségű festékoldattal, melynek meghatározása a Mohr-Westphal mérleggel történt. A csőrendszerbe buboréknak nem szabad bekerülni. Ezt úgy érjük el, hogy az oldattal kb. félig töltött (ü) csőből az oldatot (M) csőbe szívjuk át, majd a szükséges mennyiség után a készülék csapját (c) elzárjuk. Ezután az (ü) csövet is feltöltjük H magassáig. A nyílásokat elzárjuk, s 20-25-ször megforgatjuk, hogy az egyenletes keveredést biztosítsuk. A forgatás után a nyílásokat ismét kinyitjuk és az ülepedés nívódifferenciáját $\langle \Delta H \rangle$ mérjük. Az ülepedési idő ismeretében a Stokes egyenlet alapján r kiszámítható.

$$r = \sqrt{\frac{\Delta H}{\lambda \tau}} \quad (10)$$

A (10)-ben szereplő λ értéke:

$$\lambda = \frac{(\rho-1) \cdot 2g}{\xi \cdot \eta}$$

összefüggésből meghatározható.

A számítások elvégzése után

$$\lambda = \frac{2 \cdot 648 \cdot 2 \cdot 9 \cdot 81}{9 \cdot 0,01} = 577,264 \cdot \frac{1}{\text{m} \cdot \text{sec}}$$

adódott.

A kapott eredmény felhasználása után (10) alapján a sugárra ΔH -tól és az ülepedési időtől függően különböző értékeket kapunk (1. táblázat)

Ülepedési idő (sec)	Szintváltozás (cm)	A részecske sugara (cm)
138	$5 \cdot 10^{-2}$	$7,918 \cdot 10^{-5}$
170	$6 \cdot 10^{-2}$	$7,855 \cdot 10^{-5}$
138	$5 \cdot 10^{-2}$	$7,918 \cdot 10^{-5}$
170	$9 \cdot 10^{-2}$	$9,571 \cdot 10^{-5}$
185	$8 \cdot 10^{-2}$	$8,654 \cdot 10^{-5}$

Az r meghatározása hibaszámítás alapján a 2. táblázatban található. (2. táblázat)

N	r (cm)	\bar{r}	Δr	$(\Delta r)^2$
1.	$7,918 \cdot 10^{-5}$	$8,383 \cdot 10^{-5}$	$4,65 \cdot 10^{-6}$	$21,62 \cdot 10^{-12}$
2.	$7,855 \cdot 10^{-5}$		$5,28 \cdot 10^{-6}$	$27,88 \cdot 10^{-12}$
3.	$7,918 \cdot 10^{-5}$		$4,65 \cdot 10^{-6}$	$21,62 \cdot 10^{-12}$
4.	$9,571 \cdot 10^{-5}$		$11,88 \cdot 10^{-6}$	$141,10 \cdot 10^{-12}$
5.	$8,654 \cdot 10^{-5}$		$2,71 \cdot 10^{-6}$	$7,34 \cdot 10^{-12}$
	$41,916 \cdot 10^{-5}$			$219,56 \cdot 10^{-12}$

$$r = (8,383 \pm 0,223) \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

adódott. A részecske hatásos tömege (3) alapján

$$\mu = 2,548 \cdot 10^{-16} \text{ kg.}$$

2. Az N_0 és N részecskék meghatározása

A mikroszkóp tárgylemezére az ismert sűrűségű oldatból vékony réteget helyeztünk el.

Az élesreállításnál leolvasható a Z_0 magassági szint és a vibráló részecske száma N_0 . A mikroszkóp magasságának 0,002 cm-es süllyesztése után ismét meghatározható a részecske száma (N).

A mérést hibaszámítással elvégezve, az alábbi értékeket kaptuk:

a/ Ha a $Z = 0,002 \text{ cm}$ magasság-különbség $N = 3$

$N_0 = 10$, a (4) egyenlet alapján

$$k = 1,41 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

$$N = 1$$

$$N_0 = 4$$

$$k_2 = 1,216 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

$$N = 3$$

$N_o = 14$	$k_3 = 1,09 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 2$	
$N_o = 9$	$k_4 = 1,17 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 3$	
$N_o = 13$	$k_5 = 1,13 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$

átlagosan: $k_I = (1,13 \pm 0,037) \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$

b/ Ha $Z = 0,003$ cm magasság-különbség:

$N = 1$	
$N_o = 10$	$k_1 = 1,108 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 2$	
$N_o = 9$	$k_2 = 1,7 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 2$	
$N_o = 11$	$k_3 = 1,5 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 3$	
$N_o = 15$	$k_4 = 1,59 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 2$	
$N_o = 15$	$k_6 = 1,27 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
	$k_{II} = (1,43 \pm 0,072) \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$

c/ Ha $Z = 0,001$ cm magasság-különbség:

$N = 4$	
$N_o = 9$	$k_1 = 1,04 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 6$	
$N_o = 10$	$k_2 = 1,66 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$

$N = 5$	$N_0 = 11$	$k_3 = 1,03 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 3$	$N_0 = 6$	$k_4 = 1,23 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
$N = 4$	$N_0 = 10$	$k_5 = 0,92 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$

A kapott 3 átlagértéknél a hibakorlát maximumát véve k értékét $1,305 \cdot 10^{-23}$, illetve $1,148 \cdot 10^{-23}$ értékkel adhatjuk meg, mivel

$$k_{III} = (1,17 \pm 0,075) \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$$

3. Összefoglaló megjegyzések

A mérés közben több hibalehetőséggel kellett számolnunk, amelyeket a gyakorlatok során még pontosítani lehet, de az újra ismétlésnél célszerű az alábbiakra ügyelni:

- a/ Az élek meghatározásánál a hibakorlát 10^{-3} cm nagyságrendű, ez nem nagy, s így a k értékének meghatározásánál elhanyagolható.
- b/ A Mohr--Westphale mérleggel csak ezred pontosságig mérhetünk.
- c/ Wiegner-készülék házilag készült, a nívódifferencia leolvasása nem lehet teljesen pontos.
- d/ Az ülepedési idő mérése a "gyors" reakció miatt $\pm (1-2)$ sec-mal eltolódhat.
- e/ A többszöri mérésnél az oldat sűrűségének (kikeverésének) pontos meghatározása, illetve egymástól való eltérése hibákat okozhat. Tapasztalatunk azt, hogy ha sűrűbb az oldat, akkor pontosabb eredményt kapunk, de 1,15-1,16-nál töményebb sem lehet, mert akkor az eltérés rohamosan nő az irodalmi értéktől.

A mérési eredményeink a főiskolai oktatás céljának és módszerének megfelelően alakultak. A cikk összeállításához szükséges mérési adatokban és számításokban V í g h Mária volt főiskolai hallgató nyújtott nagy segítséget.

FELHASZNÁLT IRODALOM

1. Erdey-Grúz Tibor -- Proszk János: Fizikai kémiai praktikum,
Bp. Tankönyvkiadó, 1961.
2. Kolloidkémiai zsebkönyv. Műszaki Kiadó, Bp. 1963.
3. Dr. Buzágh Aladár: Kolloidikai praktikum
4. Dr. Buzágh Aladár: Kolloidika
5. Erdey-Grúz Tibor: Elméleti fizikai kémia
Bp. Tankönyvkiadó, 1964.
6. Mázor László: Szerveskémiai analízis
Műszaki Könyvkiadó, Bp. 1962.
7. Bruckner Győző: Szerves kémia, Egyetemi tankönyv,
Bp. Tankönyvkiadó, 1964.
8. Kuthy Sándor: Szerves kémia
Mezőgazdasági Kiadó, Bp. 1954.
9. Szekeres László: Általános és szervetlen kémia
Mezőgazdasági Kiadó, Bp. 1961.
10. Dr. Szőke Sándorné: A kolloidkémia néhány fontosabb fejezete,
Bp. Tankönyvkiadó, 1962.

Г. Н. БЕСПАЛОВ

ПРИБОР ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОСНОВНЫХ ЯВЛЕНИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

Abstract: (Apparatus for Modelling the Fundamental Phenomena of Statistical Physics) In this paper the author writes about a simple and cheap appliance developed by himself for modelling the following fundamental phenomena of statistical physics: Brown-movement, diffusion of gases, direction of thermal processes, dispersion of gas molecules in gravitational field.

В настоящее время заметен прогресс демонстрационного эксперимента, его ускорение связано с появлением новых научных идей и новых технических средств. Совершенствование экспериментальной техники, повышение эффективности имеющихся и разработка новых демонстрационных приборов, а также создание средств наглядности для случаев, когда демонстрация явления или физического закона в аудиторных условиях невозможна - все это составляет эмпирический базис теории. Поэтому, без фундаментального и наглядно поставленного демонстрационного эксперимента невозможно достаточно научно и логически непротиворечиво изложить теорию молекулярной физики. Так как основные понятия молекулярной физики важны для формирования физических представлений об окружающем мире, необходимо усилить соответствующий демонстрационный эксперимент.

Повышение качества знаний студентов по молекулярной физике и термодинамике неразрывно связано с созданием эффективных средств наглядного обучения и в первую очередь моделирующих приборов. В молекулярной физике мы имеем дело с процессами, которые, несмотря на значительное усовершенствование современной аппаратуры, все еще мало доступны для наблюдения в аудиторных условиях. В связи с этим незаменимую помощь при изучении процессов микромира могут оказать технические средства. Возникает необходи-

мость в более широком использовании различного рода схем и моделей, имитирующих поведение молекул в реальных газах и динамику процессов. Предлагаемый нами прибор, позволяющий моделировать основные явления молекулярной физики, дает возможность наглядного представления ряда физических явлений и законов молекулярно-кинетической теории и термодинамики.

На рис. 1 показан внешний вид прибора. Как видно из рисунка, он представляет собой катушку высотой 40-40 мм. Каркас катушки собирается из текстолита или изготавливается из уплотненного пенопласта. Катушка имеет отверстие в форме прямоугольного параллелепипеда¹. В каркасе катушки с помощью резака прорезаются пазы², по которым могут перемещаться стеклянные пластинки³. Этими пластинками мы имеем возможность закрывать внутреннюю полость катушки (рабочий объем), а также через стеклянные пластинки проецировать внутреннюю полость катушки с помощью графопроектора "Лектор-2000" на экран. На каркас катушки наматывается 500-600 витков провода ПЭЛ-0,8 (4, рис 1).

В нашем приборе молекулы газа заменяем специально изготовленными частицами. Они состоят из небольших керамических магнитов, помещенных во внутрь пенопластовых шариков различных размеров.

Подключая катушку через автотрансформатор к источнику переменного тока, мы получаем переменное магнитное поле, которое имеет наибольшую индукцию в рабочем объеме. Частицы с постоянными магнитами, помещенные в рабочий объем, будут беспорядочно двигаться по всему рабочему объему. Керамические магниты шариков ориентированы хаотично и при взаимодействии с переменным магнитным полем, а также и между собой начинают двигаться по случайным траекториям. Таким образом частицы под действием переменного магнитного поля и взаимодействия между собой приходят в хаотическое движение. Этот прибор может быть использован для проведения ряда демонстраций по молекулярной физике в школе, а также и при чтении лекций в ВУЗе. Приведем описание нескольких демонстраций с использованием прибора.

Моделирование теплового движения молекул.

Молекулы любого вещества находятся в непрерывном хаотическом движении и его интенсивность зависит от температуры вещества. Чем выше температура, тем движение молекул становится более интенсивным. Прибор позволяет наблюдать эту зависимость. Включаем автотрансформатор и частицы, на-

ходящиеся в рабочем объеме катушки, приходят в тепловое (хаотическое) движение. Изменяя напряжение на концах катушки, обнаруживаем изменение поведения частиц. Они ведут себя как молекулы газа при изменении температуры. При увеличении напряжения на катушке частицы начинают двигаться быстрее, а при уменьшении напряжения движение частиц замедляется, что позволяет лучше фиксировать столкновения частиц, а также их движение.

Моделирование броуновского движения.

На предложенном приборе можно продемонстрировать и броуновское движение. Для этого из пенопласта вырезаем две модели броуновских частиц. Диаметр первой частицы 25 мм и высотой 20 мм, диаметр второй частицы 15 мм, а высота 10 мм. Поочередно помещаем броуновские частицы в рабочий объем, где уже находятся 40-50 частиц с керамическими магнитами. Интенсивность движения броуновской частицы меньшего размера значительная, так как при хаотическом движении частиц импульсы, передаваемые ими броуновской частице справа и слева, неодинаковы. Поэтому отлична от нуля результирующая сила давления, которая вызывает изменение движения броуновской частицы. Чем больше поверхность броуновской частицы, тем менее значительные изменения силы давления, действующие на броуновскую частицу.

Моделирование диффузии газов.

Прибор позволяет продемонстрировать проникновение одних веществ в объем, занятый другими веществами. Для демонстрации диффузии газа помещаем перегородку, показанную на рис. 2 в рабочий объем. В этой перегородке имеется большое прямоугольное отверстие. Допустим, слева от перегородки в рабочий объем помещаем частицы большого диаметра, а справа - малого. В процессе работы прибора частицы малого размера диффундируют в левую часть объема, а частицы большого размера в правую часть.

Необратимость тепловых процессов.

Все происходящие в природе макроскопические процессы протекают только в одном определенном направлении, в обратном направлении протекать не могут. Необратимость таких процессов выглядит парадоксально, так как все микропроцессы обратимы, что наглядно можно продемонстрировать с данным прибором. Прибор позволяет показать, как обратимые процессы становятся практически необратимыми при увеличении числа участвующих в них частиц.

В первом опыте помещаем в левую часть рабочего объема, допустим четыре частицы. В процессе работы прибора эти частицы будут располагаться

в различных положениях в рабочем объеме, и довольно скоро вновь окажутся все в левой части, что свидетельствует о обратимости процесса с незначительным числом частиц.

Второй опыт проводим с большим количеством частиц (более 30). В этом случае начальное состояние является упорядоченным, когда все частицы находятся в левой части рабочего объема. При включении прибора частицы, находящиеся в центре рабочего объема, начнут двигаться вправо, отразившись от стенки, полетят навстречу остальным и через небольшой промежуток времени первоначальное упорядоченное состояние превратится в беспорядочное состояние. Все частицы, в основном, равномерно распределяются по всему объему и в дальнейшем будет иметь место лишь небольшие отклонения от этого состояния равновесия равновесия. В систем мах состоящих из большого количества частиц возникают новые закономерности, несвойственные одной частице или небольшой их группе, раскрывается статистический характер законов молекулярного движения.

Распределение молекул газа в поле земного тяготения.

Предлагаемый прибор позволяет демонстрировать распределение молекул газа в однородном поле силы тяжести. Для этого нужно изменить положение катушки с горизонтального на наклонное. В этом случае рабочий объем можно проецировать на экран с помощью графопроектора. Получаемая картина иллюстрирует распределение молекул в воздушной оболочке Земли.

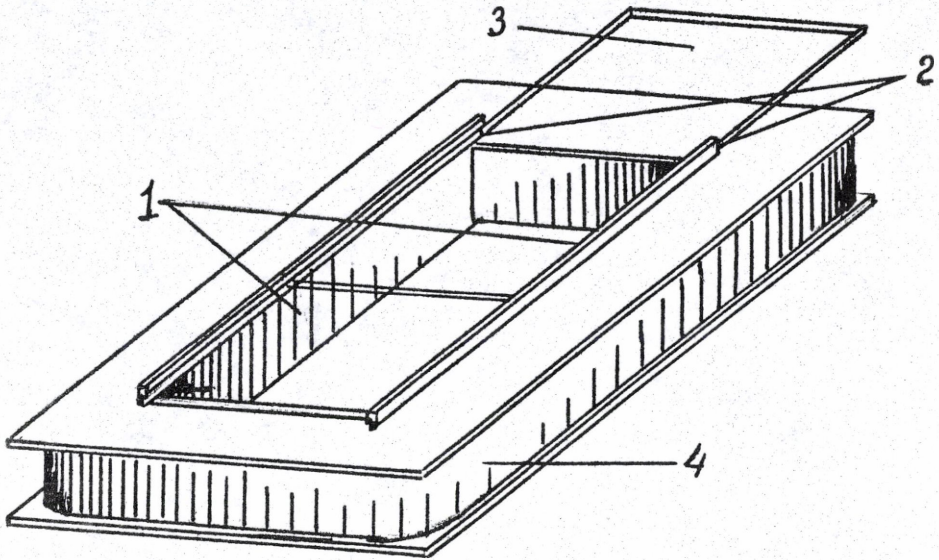


Рис. 1

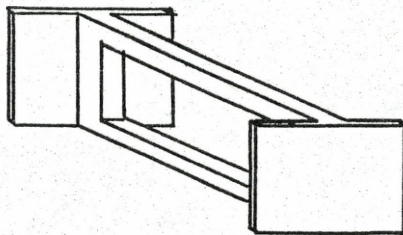


Рис. 2

TARTALOMJEGYZÉK

	Old.
Csillag László -- Toroczky Zsolt: Egyszerű demonstrációs készlet fénytani alapkísérletek bemutatásához	3.
Greguss Pál: Hordozható holokamerák koherensoptikai és fiziológiai alapkísérletekhez	15.
Tamás Francia: An analytical method for calculating multicentre integrals built up from GTF-S I.....	27.
Francia Tamás: A kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriá- val történő bevezetéséről II.....	53.
Hidasi Károly: A Boltzmann-féle állandó kísérleti meghatározása	71.
Г. Н. Беспалов: Прибор для моделирования основных явлений моле- кулярной физики	85.

EXHIBIT

...

...

...

...

A Ho Si Minh Tanárképző Főiskola
Házi Nyomdája

ISSN 0138-9734

