is igen nagy fontosságra tett szert a kiegészítő potenciál két alakja.[1] Az alkáli és földalkáli fémek kötésének tisztázása után a több valenciás fémek kötésének vizsgálata és szerkezetének tisztázása van soron. Ebben az irányban a baráti népi demokratikus Csehszlovákiában egy egész kutató gárda dolgozik *Z. Mátyás* irányítása mellett *(E. Antoncik, L. Valenta, M. Trlifaj)*[4]. Igen jelentős alkalmazása volt ezeknek a kiegészítő potenciáloknak egy nagyobb rendszámú elemekre is alkalmazható variációs módszer kidolgozásánál, valamint egy, az atomokra vonatkozó Hartree-féle „self consistent field" módszerből kiinduló analitikus közelítő módszer felépítésénél is[5]. További alkalmazási lehetőségek egész sokasága áll fenn és remélhetőleg kerül kidolgozásra a közel jövőben.

Általában a statisztikus atomfizika egy viszonylagos lezártság elérése után az utóbbi fél évtizedben új fejlődésnek indult és mint a tiszta hullámmechanikai módszerek kiegészítője és segítő társa tör újabb sikerek felé. *J. C. Slater* a Hartree—Fock-egyenleteket egyszerűsíti egy a statisztikus atomfizikában már jól ismert kicserélődési potenciállal. *S. R. de Groot* és *C. A. Ten Seldam* az összenyomott argon atom belső kinetikus energiáját és polarizálhatóságát számítják a Gombás-féle statisztikus modell alapján. A Szovjetunióban *D. Ivanenko* és *Sz. Larin, V. M. Klecskovszkij* és még mások alkalmazzák a statisztikus elméletet atomfizikai problémák megoldására[6]. Új lépéseket tettek a többatomos molekulák statisztikus elmélete felé is. Általában mind többen jönnek rá arra a közismert, de sohasem eléggé figyelembe vett mondás igazságára, hogy egy fizikai probléma megoldásánál egy fizikailag jól megalapozott gondolat sokszor többet ér a legmodernebb számolóberendezésnél is, s ilyen gondolatok felkeltésére a statisztikus módszer igen alkalmas.

## IRODALOM

[1] Irodalomra vontkozóan lásd pl. *P. Gombás*: Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer Vlag, Wien, 1949.

[2] *P. Gombás*, Acta Phys. Hung. I. 285, 1952.

[3] Részletesebben lásd *R. Gáspár*, Acta Phys. Hung. II., 31, 1952.

[4] Lásd pl. *E. Antoncik*, Cs. Cas. Fys., **2**, 49, 1952.

[5] *P. Gombás* és *R. Gáspár*, Acta Phys. Hung. I. 317, 1952; *R. Gáspár*, Acta Phys. Hung. II. 151, 1952; *R. Gáspár* és *P. Gombás*, Acta Phys. Hung. II. 335, 1953.

[6] *J. C. Slater*, Phys. Rev. **81**, 385, 1951; *A. Ten Seldam* és *S. R. de Groot*, Physica, 18, 910, 1952; *D. Ivanenko* és *Sz. Larin*, Dokladi, Akad. Nauk SSSR. Tom. 88, **6**, 45, (1953); *V. M. Klecskovszkij*, Dokladi, Akad. Nauk SSSR. Tom. 86, **4**, 691 (1952).

RÉNYI ALFRÉD lev. tag:

Tisztelt III. Osztály! A III. Osztály nagygyűlési programmjának egyik legfőbb célkitűzése, hogy elősegítse a fizikusok és matematikusok szorosabb együttműködését. Ebből a szempontból örömmel üdvözlöm *Gombás* akadémikus mai előadását, amely komoly lépést jelent ebbe az irányba. Nemcsak azért, mert számos olyan konkrét problémát vetett fel, amelyekkel kapcsolatban az együttműködés kialakulhat, hanem azért is, mert az elvi szempontokat helyesen világította meg. Az eredményes együttműködésnek ugyanis vannak bizonyos elvi előfeltételei is. A matematikusok részéről az együttműködés előfeltétele, hogy meg legyen bennük a készség és szándék, hogy igyekezzenek a fizikusok problémáival megismerkedni és azokban elmélyedni. E készség egyre több hazai matematikusban van meg és egyre erősödik. Van egy előfeltétel a fizikusok részéről is, mégpedig, hogy azt az álláspontot képviseljék, amelyet *Gombás* akadémikus kifejtett, hogy nincs egy külön — alacsonyabb — matematikai precizitási színvonal a fizikusok részére. Ezt ilyen határozott formában kifejezve vezető fizikus részéről nálunk eddig nem hallottam és ezért igen nagy örömmel üdvözlöm ezt az állásfoglalást *Gombás* akadémikus részéről. Tapasztalatom szerint a matematikusok és fizikusok együttműködésének egyik akadálya, hogy egyes fizikusok a matematikai szabatosság követelményét lebecsülik és hajlanak a matematika formális alkalmazására. Teljesen egyetértek azzal a megállapítással, hogy az, hogy egy módszer bizonyos szűk határok között egyezik a tapasztalattal, önmagában még keveset mond. Itt merül fel az extrapoláció problémája, amelyre *Fogarasi* akadémikus előadásához való hozzászólásomban is utaltam. Ha egy képlet bizonyos határok között egyezik a tapasztalatokkal, de elméletileg nincs megalapozva, akkor az extrapoláció nem indokolt.

Mint mondottam, egy matematikai képlet fizikai alkalmazásánál is ügyelni kell arra, hogy abból, hogy az bizonyos határok között jól egyezik a tapasztalatokkal, ne vonjunk le elhamarkodott következtetéseket. Még fokozottabban vonatkozik ez egy tisztán matematikai kérdésre, például egy közelítő képletre. Annak illusztrálására, hogy mennyire óvatosnak kell lenni, egy példát szeretnék felhozni, éppen *Gombás* akadémikus egy munkájából.

*Gombás* akadémikus „Die statistische Theorie des Atomkerns“ c. igen érdekes dolgozatában (Acta Physica, I. 329—390.) foglalkozik

$$\int_0^\infty f(x)g(x)dx$$

alakú integrálok kiszámításával, ahol $g(x) = \ln(1+q^2e^{-2x^2})$ és $f(x) = x^r e^{-\lambda x^2}$; szüksége van ennek az integrálnak az értékére az $r=2, \lambda=0, 2, 4$ értékekre, továbbá $q$-nak több 1 és 12 közé eső értékére. Az integrál kiszámítására vonatkozólag a következőket mondja (id. munka 386—387. o.):

„Nach dem Mittelwertsatz der Integralrechnung kann man im Integral $\int_0^\infty f(x)g(x)dx$ die eine Funktion, z. B. die flach verlaufende Funktion $g(x)$ durch einen entsprechend gewählten konstanten Wert ersetzen. Wegen des schon beschriebenen Verlaufes von $f(x)$ erhält man für das Integral einen guten Näherungswert, wenn man für den konstanten Wert von $g(x)$ denjenigen Wert von $g(x)$ wählt, den $g(x)$ an der Stelle $x_m$ des steilen Maximums von $f(x)$ annimmt. Es ergibt sich so

$$\int_0^\infty f(x)g(x)dx = g(x_m)\int_0^\infty f(x)dx = g(x_m)\,\frac{\pi^{1/2}}{4n^{3/2}} \tag{216}$$

mit

$$x_m = \frac{1}{n^{1/2}} \tag{217}$$

Die Genauigkeit dieser Näherung reicht für unsere Zwecke noch nicht aus. Man gelangt jedoch sofort zu einer Näherungsformel mit ausreichender Genauigkeit, wenn man in der Formel (216) $g(x_m)$ durch $\frac{1}{2}[g(x_1)+g(x_2)]$

ersetzt, wo $x_1$ und $x_2$ diejenigen Abszissenwerte sind, bei denen $f(x)$ den halben Wert des Maximums, d. h. den Wert $\frac{1}{2} f(x_m)$ annimmt."

*Gombás* akadémikus felkérésére az Alkalmazott Matematikai Intézet foglalkozott a szóbanforgó integrál kiszámításával és a következő eredményre jutottunk. Ha $q$ értéke kicsiny, úgy az integrál értéke sorbafejtéssel igen nagy pontossággal meghatározható. Ugyanis

$$\ln(1+q^2 e^{-2x^2}) = \ln\left(1+\frac{q^2}{2}\right) - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{q^2}{2+q^2}\right)^n \frac{(1-2e^{-2x^2})^n}{n} \tag{1}$$

és így

$$\begin{aligned}\int_0^\infty x^r e^{-\lambda x^2} \ln(1+q^2 e^{-2x^2})dx &= \ln\left(1+\frac{q^2}{2}\right) \int_0^\infty x^r e^{-\lambda x^2} dx - \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left(\frac{q^2}{2+q^2}\right)^n \int_0^\infty x^r e^{-\lambda x^2} (1-2e^{-2x^2})^n dx\end{aligned} \tag{2}$$

és a (2) jobboldalán szereplő integrálok mind zárt alakban kiszámíthatók. Ez az eljárás azonban csak akkor célravezető, ha $\frac{q^2}{2+q^2}$ kicsiny, tehát pl. ha $q \leq 2$. (Vegyük figyelembe, hogy $-1 \leq 1-2e^{-2x^2} \leq +1$ miatt a jobboldalon álló integrálok maguk is kicsinyek.) Ugyanis a sor ugyan $q$ minden értékére konvergál, de nagy $q$ értékekre tulságosan lassan konvergál ahhoz, hogy gyakorlatilag jól felhasználható legyen. Ez esetben numerikus integrálási módszerhez kell folyamodni (pl. a Simpson-szabály alkalmazásához). Megvizsgáltuk a *Gombás* akadémikus dolgozatában említett két közelítés pontosságát is, mégpedig olymódon, hogy az

$$\int_0^\infty x^r e^{-2x^2} \ln(1+q^2 e^{-2x^2})dx \tag{3}$$

integrálban $r$ értékét $r = 2$-től elindulva változtattuk. Az eredményt az alábbi 1. ábra mutatja, amelyből kitűnik, hogy míg $r$ közel van 2-höz, addig a *Gombás*-féle 2. közelítés, vagyis

$$\int_0^\infty f(x)g(x)dx \approx \frac{g(x_1)+g(x_2)}{2} \int_0^\infty f(x)dx,$$

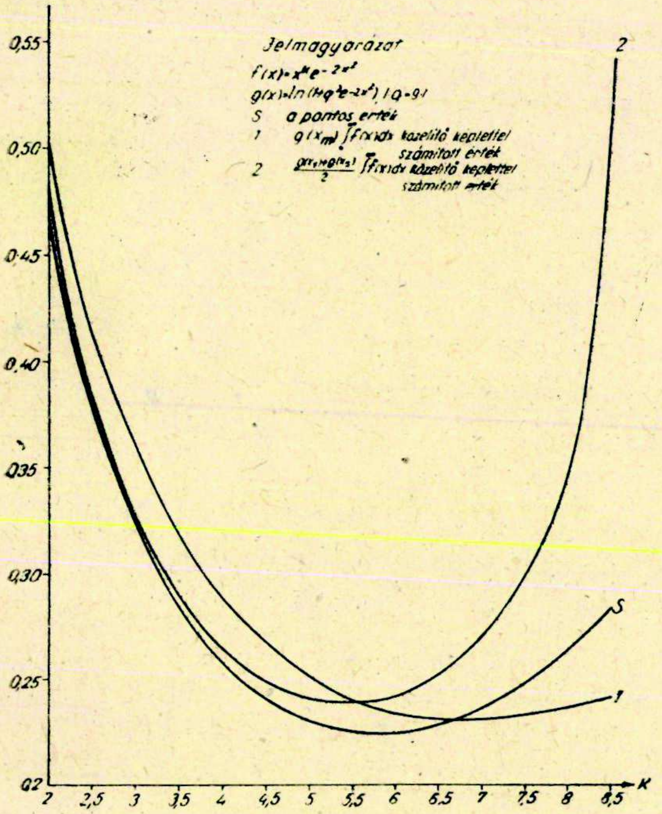
igen jó közelítést ad, azonban $r$ növelésével a közelítés pontossága állandóan romlik: $r = 8$ fölött már többszáz százalék az eltérés, és ott már ez a közelítés sokkal rosszabb, mint a triviális 1. közelítés

$$\int_0^\infty f(x)g(x)dx \approx g(x_m) \int_0^\infty f(x)dx.$$

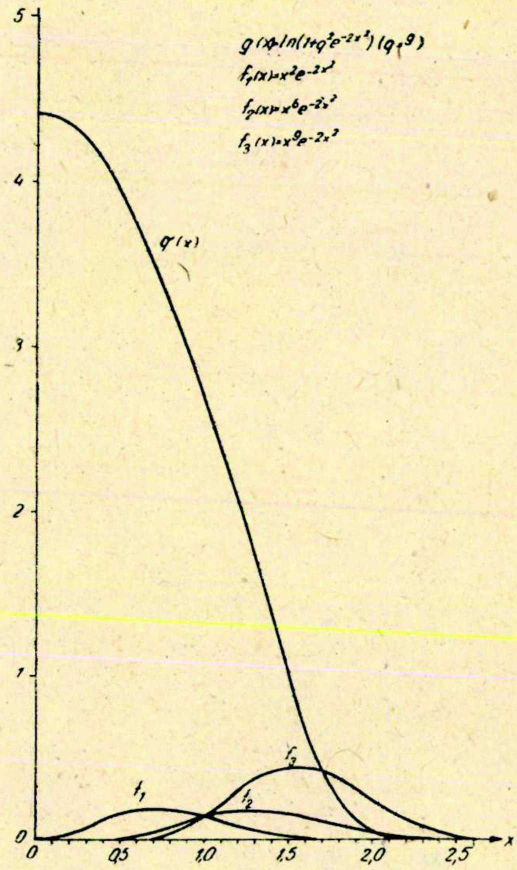
Túl messze vezetne, ha belemennénk annak megvizsgálásába, hogy min múlik az, hogy a 2. közelítés bizonyos esetekben jó, más esetekben nem, csak annyit említek meg, hogy itt szerepet játszik az a körülmény, hogy a $g(x)$ függvény inflexiós pontja, vagyis a

$$(4x^2-1)e^{2x^2} = q^2$$

egyenlet pozitív gyöke és $f(x)$ maximumhelye $\left(x_m = \sqrt{\frac{r}{2\lambda}}\right)$ egymáshoz képest hogyan helyezkednek el. Az $f(x)$ függvény menetét az $r = 2$, $r = 6$ és $r = 9$ esetekben, és $g(x)$ menetét $q = 9$-re a 2. ábra mutatja; lálhatjuk erről az ábráról, hogy $g(x)$ meglehetősen meredeken esik le és $f(x)$ maximuma nem túlságosan éles.




1. ábra




2. ábra

A kérdést itt azért említettem meg, mert igen jól mutatja, hogy egy közelítő eljárást pontos hibabecslés nélkül nem tanácsos alkalmazni és hogy az, hogy egy eljárás bizonyos speciális esetekben jó közelítést szolgáltat, még nem bizonyítja az eljárás helyességét. Természetesen még fokozottabban vonatkozik ez olyan esetekre, amikor a fizikában empirikus összefüggéseket igyekeznek képlettel leírni. Remélem, hogy az elvi kérdések tisztázása hozzá fog járulni a fizikusok és matematikusok együttműködéséhez; felszólalásommal is ezt a célt kívántam szolgálni.

KALMÁR LÁSZLÓ lev. tag:

Engedjék meg, hogy egy matematikai logikus is hozzászóljon *Gombás* akadémikus előadásához. Mindenekelőtt a megközelítés kérdésével foglalkozom. Nagyon helyesen hangsúlyozta *Gombás* akadémikus, hogy a kvantummechanika használhatósága jelentős mértékben csökkenne, ha mindig exakt megoldásokra törekednénk, ill. ha csak ilyenekre szorítkoznánk és a közelítő módszereket kizárnók a kvantummechanikából. A közelítő módszerek a mate-