

direkt mérési bizonyítékot, amely egyértelműen bizonyítaná a kettős fekete lyuk jelenlétét. Az itt bemutatott összes megfigyelt jelenségre (akár több) alternatív magyarázat is létezik. Ezért kiemelkedően fontos olyan jellemző tulajdonság keresése, amellyel egyértelműen azonosíthatók a kettős AGN-ek. Így ugyanis felállítható lenne egy nagyobb, statisztikus módszerekkel is tanulmányozható minta, ami nagymértékben elősegítené a galaxisok és az Univerzum fejlődésének kutatását, valamint többet tudnánk meg a szupernagy tömegű fekete lyukak és kettősök életútjáról is. Számos elmélet veti fel, hogy kapcsolat lehet a galaxisaktivitás, a rádiósugárzó kilövellések megléte és az adott galaxis életútja, ütközési története között. A kettős galaxismagokat és összeolvadásukat tanulmányozva talán olyan régóta megválaszolatlan kérdések megoldásához is közelebb jutunk, hogy miért vannak a rádiótartományban halk (és jet nélküli) AGN-ek többségben, miért  $z = 2$  vöröseltolódásnál látjuk a kvazárok többségét, minden galaxis átment-e egy aktivitási fázison élete során, és vajon meddig tart egy tipikus aktivitási szakasz?

#### Irodalom

1. Ballo, L. et al.: Arp 299: A Second Merging System with Two Active Nuclei? *Astrophysical Journal* 600 (2004) 634.
2. Begelman, M. C. et al.: Massive black hole binaries in active galactic nuclei. *Nature* 287 (1980) 307.
3. Cheung, C. C.: First “Winged” and X-Shaped Radio Source Candidates. *Astronomical Journal* 133 (2007) 2097.
4. eLISA honlap [www.elisascience.org](http://www.elisascience.org)
5. Frey S.: Kettős aktív galaxismagok. *Meteor csillagászati évkönyv* 2012 280.

6. Frey S. et al.: Two in one? A possible dual radio-emitting nucleus in the quasar SDSS J1425+3231. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 425 (2012) 1185.
7. Gabányi K. É.: Kvazárok gyors fényességváltozásai rádiótartományban. *Fizikai Szemle* 59 (2009) 354.
8. Gergely L. Á., Bierman P. L.: The Spin-Flip Phenomenon in Supermassive Black hole binary mergers. *Astrophysical Journal* 697 (2009) 1621.
9. Guainazzi, M. et al.: The early stage of a cosmic collision? XMM-Newton unveils two obscured AGN in the galaxy pair ESO509-IG066. *Astronomy & Astrophysics* 429 (2005) L9.
10. Hudson, D. S. et al.: X-ray detection of the proto supermassive binary black hole at the centre of Abell 400. *Astronomy & Astrophysics* 453 (2006) 433.
11. Komossa, S. et al.: Discovery of a Binary Active Galactic Nucleus in the Ultraluminous Infrared Galaxy NGC 6240 Using Chandra. *Astrophysical Journal* 582 (2003) L15.
12. Liu F. K.: X-shaped radio galaxies as observational evidence for the interaction of supermassive binary black holes and accretion disc at parsec scale. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 347 (2004) 1357.
13. Mezcuca, M. et al.: Starbursts and black hole masses in X-shaped radio galaxies: Signatures of a merger event? *Astronomy & Astrophysics* 544 (2012) A36.
14. Orosz G., Frey S.: Optical–radio positional offsets for active galactic nuclei. *Astronomy & Astrophysics* 553 (2013) A13.
15. Rác I.: Hogyan hallgatható meg az Univerzum zenéje? *Természet Világa* 142/12 (2011) 546.
16. Smith, K. L. et al.: A Search For Binary Active Galactic Nuclei: Double-peaked [O III] AGNs In The Sloan Digital Sky Survey. *Astrophysical Journal* 716 (2010) 866.
17. Szabados, L.: Gaia – a következő évtized nagy űrcsillagászati projektje. In *Űrcsillagászat Magyarországon*. Konkoly Observatory of the Hungarian Academy of Sciences Monographs No. 6. (2010) 74.
18. Urry, C. M., Padovani, P.: Unified Schemes for Radio-Loud Active Galactic Nuclei. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 107 (1995) 803.
19. van Wassenhove, S. et al.: Observability of Dual Active Galactic Nuclei in Merging Galaxies. *Astrophysical Journal* 748 (2012) L7.

## KÉPALKOTÁS SOK SZÁZ GIGA- ÉS TERAHERZ FREKVENCIATARTOMÁNYBAN

Földesy Péter  
MTA TTK MFA

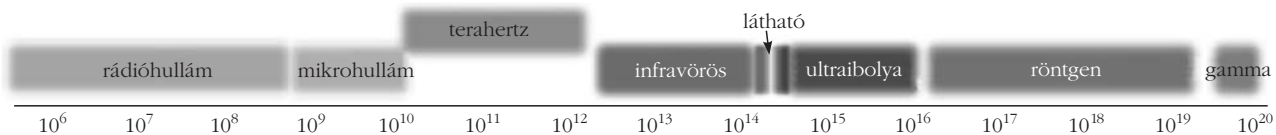
A THz-es frekvenciatartományba eső sugárzás rutinszerű létrehozása, érzékelése és használata csupán két évtizedes ága a tudománynak. Ez a sugárzási tartomány láthatatlan számunkra és a mikrohullámok és az infravörös sugárzás közötti résben helyezkedik el (1. ábra). Általános gyakorlat szerint ez a 300 GHz-től 3 THz-ig terjedő frekvencia-, vagy máshogy megfogalmazva a 3–100 cm<sup>-1</sup> hullámszámtartomány. A THz-es sugárzás egyik divatosabb elnevezése például a T-rays.

A tartomány – pont a „köztes” jellege miatt – különleges helyzetben van. A hagyományos rádiófrekvenciás eszközök már nem képesek kezelni a klasszikus RF megoldásokkal, míg a fotonok kis energiája miatt (meV) az infravörös technológiákhoz (például bolometrikus kamerák) túl „hideg” ez a sugárzási tar-

tomány. Első alkalmazási területe a rádiócsillagászatban és a földfelszín műholdas felderítésében volt.

A nehézségek ellenére miért érdekes az ilyen új eszközök fejlesztése? Azért, mert használata biztonságos, nem ionizáló sugárzás, non-invazív és nem destruktív. Számos közönséges anyag (például műanyag-csomagolás, ruházat) és élő szövet vékony rétege átlátszó vagy közel átlátszó ezeken a hullámhosszakon és fontos összetevői egyedi spektrális ujjlenyomattal bírnak. Ez az információtartalom képként is létrehozható, azonosítható és analizálható. Ezáltal nem destruktív anyagvizsgálatra alkalmas úgy, hogy gyorsabb képalkotást tesz lehetővé, mint a röntgentechnika, valamint a képek belső kémiai és más jellegű tartalmakat is képesek szolgáltatni. Ezekben a spektroszkópiai alkalmazásokban – akár 3 dimenzióban – olyan egyedi spektrális ujjlenyomatokat lehet azonosítani, ami más technikával körülményes vagy nem megismerhető (például robbanóanyagok jelenléte zárt bőröndben). Ezek miatt a THz-es képalko-

A 2013. évi Magyar Fizikus Vándorgyűlésen elhangzott előadás írott változata.



1. ábra. A terahertzes sugárzás elhelyezkedése az elektromágneses spektrumban a frekvencia (Hz) függvényében.

tást gyakori kiegészítő technikaként alkalmazzák optikai, Raman- vagy infravörös vizsgálatokban. Gyakran említett és vitatott felhasználási kör a repülőtéri „body scannerek”. De meg kell említeni az alkalmazások kommunikációtechnológiai oldalát is. A nagyobb adatátvitel eléréséhez kézenfekvő megoldás a minél nagyobb vivőfrekvencia használata. A 275–3000 GHz tartomány jelenleg nincsen allokálva egyetlen konkrét kommunikációs csatornához sem, ezért is fokozott az érdeklődés a jövő wireless hálózatainak tervezésekor, ahol a 100 Gb/s átvitel sem elképzelhetetlen. Számos előnye mellett azonban a légköri elnyelés jelentőssé válik 500 GHz fölött, ami behatárolja a kommunikációs távolságot. Ezzel együtt az úgynevezett piconetworkök, azaz szobán belüli gyors adatátviteli alkalmazások hamarosan mindennapos eszközökké válhatnak. A *Nature Photonics* folyóirat részletes összefoglalót jelentetett meg a frekvenciatartomány érdekességeiről [1].

A THz-es technológiák térnyerésének érdekes módon nem a detektorok szabnak határt, hanem a „megvilágítás”. Mivel a légkör erősen csillapítja a nap ilyen tartományú sugárzását, nem számíthatunk érdemi háttér-megvilágításra. Több egzotikus megoldáson kívül a következő alapvető fényforrások állnak rendelkezésre:

- Elektronikus, kisfrekvenciájú oszcillátor jelének felkeverése nemlineáris elektronikai elemekkel.
- Optikai, két egymáshoz nagyon közeli hullámhosszú lézer fényének nemlineáris keverése, amelyben a két hullám különbségi frekvenciája jelenik meg és esik a THz-es régióba.
- Rövid, femtoszekundumos lézerimpulzusok intenzitásburkolójának átalakítása szélessávú THz-es pulzussá.
- Natív THz-es frekvenciájú lézerek, az úgynevezett QCL – quantum cascade laser.

Míndegyik megoldásnak vannak előnyei (a fenti sorrendben: kis méret; olcsó és spektroszkópiára alkalmas; azonnali spektrális információ; nagy fényintenzitás) és hátrányai (sorban: 1 THz-hez közeledve elenyésző intenzitás; nagyon kis intenzitás; rendkívül drága és körülményes szerkezet; kriogénikus folyékonyhélium-hűtés). Elmondható, hogy mW feletti átlagos teljesítmény már igen jónak számít.

## Hazai vonatkozások

Hazánkban a Pécsi Tudományegyetem Fizikai Intézetében a spektroszkópiai alkalmazásnak, pontosabban a nagy energiájú impulzusforrások létrehozásának van komoly hagyománya és nemzetközi elismertsége [2, 3]. A THz-es spektrális vizsgálatok széleskörű terjesztését a fentebb említett femtoszekundumos

lézereken alapuló források megjelenése tette lehetővé. Ezek közé tartozik egy nemlineáris optikai folyamaton, az optikai egyenirányításon alapuló THz forrás is, amellyel igen rövid, akár egyetlen oszcillációs ciklusból álló THz-es impulzus kelthető. Mivel a pulzus időtartománya igen keskeny, a frekvenciatartalma nagyon széles (0,1–3 THz).

A folyamatos üzemű, vagy keskeny frekvenciasávú elektronikus felkeverésen alapuló képalkotás és detektorfejlesztés egy hazai nagy értékű OTKA kutatási pályázattal egy MTA-SzTAKI, MTA-TTK-MFA, BMGE, PTE konzorciumban kezdett kibontakozni az utóbbi négy évben, amely eszközeit tekintve az MTA-SzTAKI-ban összpontosult, majd az MTA-TTK-MFA-ba költözött.

## Érzékelés tervezérlésű tranzisztorral

Számos módja lehet az antennák által összegyűjtött nagyfrekvenciás jel egyenirányításának. Ilyen lehetőségek a kriogénikusan hűtött szilícium, germánium, vagy InSb kompozit bolométerek, nagy sebességű, kis méretű GaAs Schottky-diódák, gázkamrás Golay-cella. Ezekre a megoldásokra jellemző a nagy érzékenység és jó jel-zaj viszony, azonban integrálhatóságuk korlátos és nem alkalmasak gyors, szobahőmérsékletű képalkotásra.

Egy érdekes jelenség azonban lehetővé teszi, hogy közönséges, integrált áramkörök alapjaként szolgáló tervezérlt szilíciumtranzisztorok is érzékenyek legyenek erre a frekvenciatartományra. Mindez annak elenire lehetséges, hogy csak a legmodernebb technológiájú 20-30 nm-es csíkszélességű tranzisztorok üzemi frekvenciája közelíti meg a fél THz-et. A lehetőség, hogy komerciális CMOS vagy GaAs technológiával THz-es érzékelőt lehet készíteni, megnyitotta az utat olcsó, relatíve nagy felbontású, videósebességű kamerák létrehozására is [4].

A detektálási jelenség a tranzisztorok csatornájában kialakuló 2D elektronplazma kis reakcióidején alapul. *Dyanokov* és *Shur* [5] megjósolta az elektrongázra felállított folyadékmodellrel, hogy az elektronplazma instabilitása és modulációja alkalmassá teheti a tervezérlésű tranzisztorokat arra, hogy extrém nagyfrekvenciás érzékelőként viselkedjenek. Egy másik, fenomenologikus megközelítés szerint a mikrohullámú tranzisztoros teljesítményérzékelők rezisztív self-mixing technikája terjeszthető ki a nagyobb frekvenciákra [6] a 2D elektrongáz segítségével.

A gyakorlatban két alapvető érzékelési esetet lehet megkülönböztetni attól függően, hogy az elektronplazma rezonanciája bekövetkezik-e vagy nem. A tranzisztor csatornájában kialakuló és zárt 2D elektrongáz rezo-

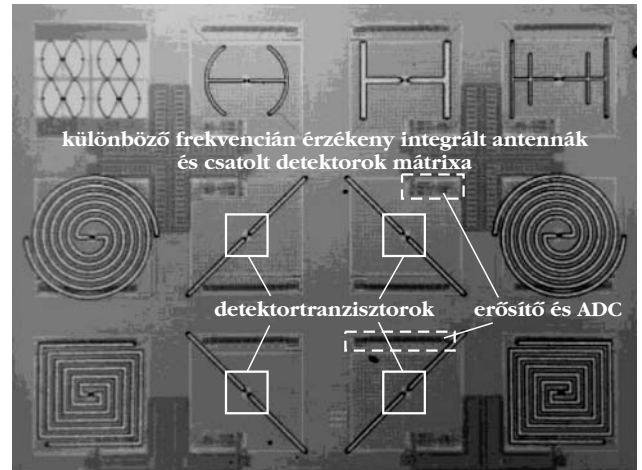
nanciafrekvenciája fordítottan arányos a csatorna hosszal és szubmikron nagyságrendben eléri a THz tartományt. Az elektron-gáz nemlineáris jellege miatt a csatornában így rezonancia esetén érzékelhető és mérhető DC-jel alakul ki. Kriogénus körülmények között ez a rezonáns detekció könnyen demonstrálható.

Szobahőmérsékleten azonban a plazma oszcillációja túlcillapítottá válik, elveszti frekvencia-specifikusságát és a tranzisztor szélesávú, de továbbra is érzékeny érzékelővé válik. Ezt a működési módot tudjuk kihasználni integrált áramkörök esetében, ahol a sugárzás csatolása a mikrométer alatti tranzisztorokra planáris antennákkal történik. Ezek az integrált antennák minden szempontból hasonlóak a „kisfrekvenciás” (például wifi) megvalósításokhoz, csupán méretük arányosan kisebb és a pár száz mikrométer nagyságrendbe esik.

## Az MTA-SzTAKI és MTA-TTK-MFA-ban folyó kísérletek

A kutatás során az elsődleges cél olyan integrált áramkör kifejlesztése volt, amely nagyfrekvenciás érzékelést és képkalkotást tesz lehetővé. A következőkben bemutatásra kerülő érzékelő tömb összesen tizenkét antenna-érzékelő párt és jelfeldolgozó adatútvonalat tartalmaz. Minden detektor saját erősítővel és analóg-digitális átalakítóval rendelkezik, majd a digitális utófeldolgozásért egy integrált processzor felelős, amely összességében egy sokcsatornás digitális lock-in erősítőt valósít meg. A rendszert TSMC gyártású CMOS 90 nm-es technológiával készítettük el. Ellentétben a monokróm kamerákkal, megvizsgáltuk azt, hogy széles frekvenciasávban miként lehet integrált antennákat létrehozni úgy, hogy a közel 200 GHz-től 750 GHz tartományban lehessen képeket készíteni. Ennél magasabb frekvenciákon a rendelkezésünkre álló sugárforrás nem megfelelő, de több THz feletti működést is demonstráltak már hasonló technológiával.

Mérnöki szempontból számos nehézséget kellett megoldani. Az első és legfontosabb probléma a detektorok érzékenységből és a kis sugárzási jelszintből fakad. A hasznos és mérhető jel nagyságrendje  $\mu\text{V}$ – $\text{mV}$ . A detektorok érzékenysége a tranzisztor lezárási tartományában a legnagyobb, a detektor kimenő ellenállása több száz  $\text{k}\Omega$  és gyakran  $\text{M}\Omega$  nagyságrendű. Ebből fakadóan elkerülhetetlen integrált nagy erősítésű és kis bemenő kapacitású erősítő használata. A nagy kimeneti ellenállás eredményeként a detektor beállási ideje nagy, ezért a zajnyomás miatt alkalmazott moduláció és lock-in erősítő működési frekvenciája is korlátozott (0,1–20 kHz). További nehézségként ebben a kis modulációs frekvenciatartományban az áramkörök 1/f flickerzaja jelentőssé válik. Szerencsés módon azonban a detektoron nem folyik DC-áram, azaz csupán a csatorna-ellenállás hőzajával kell számolnunk és az áram okozta flicker- és sörétzaj elhanyagolható. A mért zaj nagysága tipikusan néhány  $\text{nV}/(\text{Hz})^{0.5}$ -től  $\mu\text{V}/(\text{Hz})^{0.5}$  értékig változik. A következő kihívás a sugárzás csato-

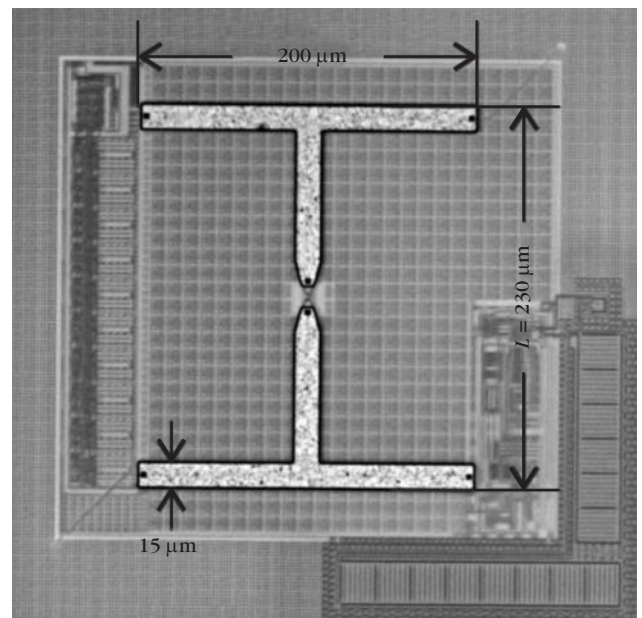


2. ábra. 0,22–0,75 THz-en működő érzékelőtömb integrált antennákkal, erősítő áramkörökkel és digitális jelfeldolgozással.

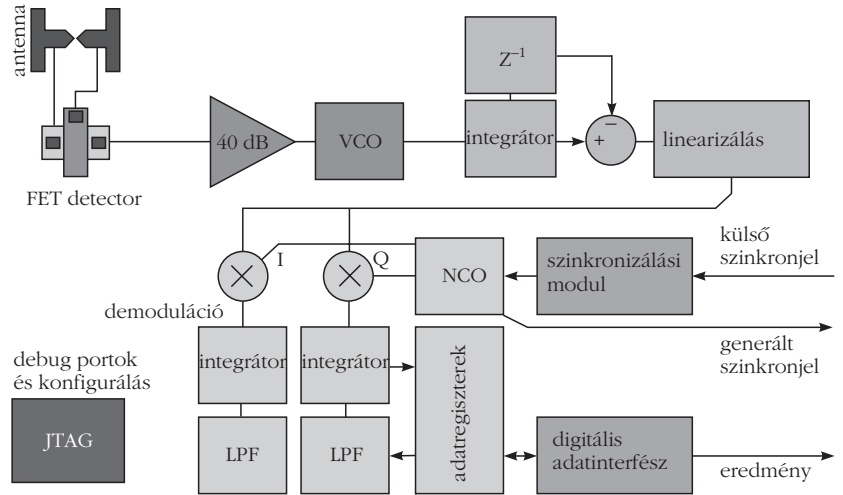
lása a detektorokhoz. Mivel a standard szilíciumtechnológiák hordozója adalékolt, ezért magas a közvetlenül a felületre épített antennák vesztesége és a használható fémek száma, vastagsága, a szigetelő dielektrikum anyaga adott és nem változtatható. Megoldásként a legmagasabban található fémmezést használtuk és a szilíciumhordozót a legközelebb lévő fémmel árnyékoltuk. Eredményként rezonáns, keskenysávú antennákat kaptunk. Végül, mint minden analóg és digitális kevert jelű áramkör esetén, az integrált áramkörön belüli zajszigetelést árnyékolással és szeparált digitális területtel növeltük meg. Az elkészült áramkör  $4 \times 3$  szenzort tartalmazott (2. ábra).

Egy szenzorban az antennacsatolt detektort alacsony zajú erősítő és analóg-digitális átalakító követte. Az elektronika és detektorszerkezet azonos, azonban különböző típusú antennák kerültek különböző szenzorokba: spirális, csokornyakkendő, és különféle

3. ábra. Integrált áramkör felületére kialakított antenna és jellemző méretei (360 GHz csúcserzékenységgel). Az antennaágak metszéspontjában helyezkedik el az érzékelő tranzisztor.



dipól antennák (3. ábra). Ezenkívül az antennák polarizáltsági iránya is helyről helyre változott. Az analóg erősítést szenzoronként egy AC-csatolt műveleti erősítő látja el, százszoros erősítéssel. A digitalizálás, a kis helyre való tekintettel, feszültségvezérelt oszcillátor és frekvenciabecsülő párral történik. Ezt követi egy másodrendű linearizálás és a szenzoronkénti lock-in detekció. A kivitelezett megoldásban a sugárforrás jelét szaggattuk és a lock-in detektor komplex értékű demodulációt (I/Q: in-phase és quadrature-phase) végez azonos modulációs frekvencián. A demodulált jel egy alacsony frekvenciaszűrőn esik át és igény szerint standard SPI interfészen át érhető el. A különféle beállítások és tesztek elvégzésére JTAG portot építettünk az áramkörbe. Ennek indoka az, hogy öt kivezetésen megvalósítható egy standardizált tesztprotokoll, összetett és strukturált beállításokat lehet megoldani. A rendszer blokkvázlata a 4. ábrán látható.



4. ábra. A megvalósított integrált rendszer blokkvázlata. A rendszer építőelemei az antennák és érzékelők, alacsony zajú erősítés, analóg-digitális átalakítás feszültségvezérelt oszcillátorral (VCO) és frekvenciabecsüléssel, saját moduláció létrehozására szolgáló digitális oszcillátor (NCO), majd demoduláció, alacsony frekvenciás szűrő és digitális interfészek.

8-12 GHz-en működő YIG oszcillátor alapú erősítő/szorzó szerkezet, amely 80–750 GHz-ig tud koherens sugárzást kibocsátani. A polarizált kimenő sugárzás egy hornantennán át jelenik meg, amit parabolatükörökkel kollimálunk, majd átvilágítás után fókuszálunk. A sugárzás teljesítményét egy VDI Erickson abszolút teljesítménymérővel tudjuk ellenőrizni.

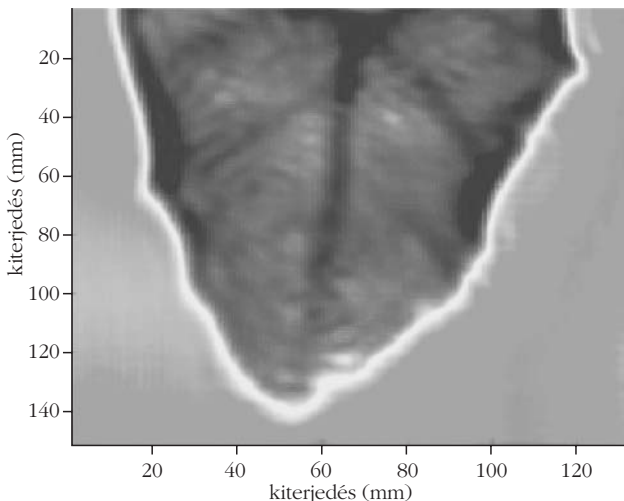
Szinte minden első kísérlet a THz tartományban víztartalom mérésével kapcsolatos, mivel a víz erősen elnyeli a sugárzást, így magas kontrasztot ad. Ilyen mérésre mutat be egy esetet az 5. ábra, ahol egy friss levél átmenő képe látható 220 GHz-en átvilágítva. A víz-jelenlét mérésének gyakorlati jelentősége például zárt csomagolások vagy bőr dehidratációja vizsgálatánál merül fel.

A multispektrális érzékelés és a hangolható forrás miatt kézenfekvő ugyanarról a tárgyról különböző frekvenciákon is képet alkotni. A biztonságos átvilágítás demonstrálásaként megvizsgáltunk egy elektronikus belépőkártyát, aminek különböző részleteit a 6. ábra mutatja be. A különböző antennák jellege és irányítotttsága további lehetőségeket is nyújt. A kézenfekvő analitikai alkalmazás a polarizációs jellemzők érzékelése. Az egymásra merőlegesen elhelyezett dipólantennák nagy keresztirányú elnyomással képesek a velük párhuzamosan polarizált sugárzást csatol-

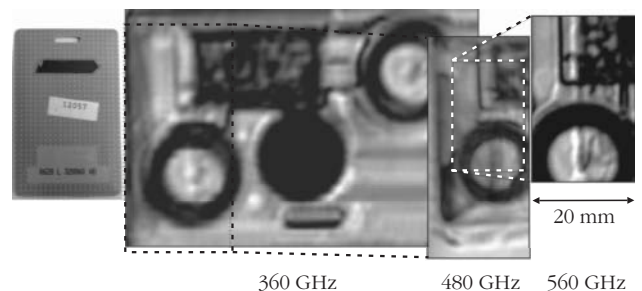
## Alkalmazási példák

Elsősorban képalkotási alkalmazásokkal foglalkozunk. Ehhez egy XYZ forgatható mozgatópadra rögzítettük a mintákat és a sugárzás irányítására, fókuszálására hagyományos optikai elemeket használtunk. A rövid hullámhossznak köszönhetően az optikai elrendezésekben olyan mindennapi refraktív elemeket lehet alkalmazni, mint például az off-axis parabolatükör. A fókuszálásban tiszta, adalékmentes szilícium- és a meglepően kis veszteségű műanyaglencsék (például TPX) használhatók. A felhasznált sugárforrás egy

5. ábra. Egy friss levél 220 GHz-en látható transzmissziós képe mutatja ahogyan a megnövekedett víztartalom az erek mentén nagyobb elnyelést eredményez, miközben a levélen kívüli jelerősség közel állandó.



6. ábra. Aktív elektronikájú belépőkártya transzmissziós képe különböző frekvenciákon készítve. Kivehetőek az adó- és vevőtekercsek, a beépített elem és elektronika.



ni a detektorokhoz. A spirál antennapár képes különbséget tenni a cirkulárisan polarizált sugárzás irányultsága, azaz jobb- vagy balkezes esetek között.

A koherens sugárzásnak köszönhető további lehetőség a fázis megmérése egy referenciasugárhoz képest, az interferenciámintázat rögzítése. Ilyen méréssel a tárgy felszínének alakját, vagy átmenő képalkotáskor például homogén tárgy vastagságát lehet meghatározni. A két módszer együttes alkalmazása részletesen megtalálható a [7] cikkben. Végül alap kutatási eredményként [8] cikkünk bemutatja, hogy egyetlen detektorral és egy keresztben elhelyezett antennapárral is el lehet végezni a fenti méréseket, ezzel kompakttá téve a fejlesztés alatt álló mérőrendszert. A <http://www.analogic.sztaki.hu> oldal áttekintést ad a teljes kutatási témáról.

## Összefoglalás

A cikk röviden áttekintette a THz és THz alatti frekvenciatartomány alkalmazásának néhány jellemzőjét, valamint azt, hogy szilícium alapú integrált áramkört

megoldással lehetséges ilyen tartományú intelligens érzékelőket készíteni. Láthattuk, hogy egy saját tervezésű integrált áramkör képes modulált sugárzás érzékelésére, demodulációjára és autonóm módon, digitálisan szűrt eredmény szolgáltatására.

## Irodalom

1. M. Tonouchi: Cutting-edge THz technology. *Nature Photonics* 1/2 (2007) 97–105.
2. <http://physics.ttk.pte.hu/kutatas/THz.shtml>
3. J. A. Fülöp, L. Pálfalvi, M. C. Hoffmann, J. Hebling: Towards generation of mJ-level ultrashort THz pulses by optical rectification. *Opt. Express*. 19 (2011) 15090.
4. R. Courtland: A cheap THz camera. *IEEE Spectrum* (2012), 17. April, elektronikus kiadás.
5. M. I. Dyakonov, M. S. Shur: Plasma wave electronics: Novel THz devices using two dimensional electron fluid. *IEEE Transactions on Electron Devices* 43 (1996) 1640–1645.
6. E. Öjefors, U. Pfeiffer, A. Lissauskas, H. Roskos: A 0.65 THz focal-plane array in a quarter-micron CMOS process technology. *IEEE Journal of Solid-state Circuits* 44/7 (2009) 1968–1976.
7. P. Földesy: THz single-shot quadrature phase-shifting interferometry. *Optics Letters* 37/19 (2012) 4044–4046.
8. P. Földesy: Current steering detection scheme of three terminal antenna-coupled THz field effect transistor detectors. *Optics Letters* 38/15 (2013) 2804–2806.

# MOLEKULÁRIS SZINTŰ ESZKÖZÖK SZEREPE NAPJAINKBAN

Csehi András, Halász Gábor

Debreceni Egyetem, Információ Technológia Tanszék

Vibók Ágnes

Debreceni Egyetem, Elméleti Fizikai Tanszék

Köztudott, hogy a molekulák pozitív töltésű nehéz atommagokból és a magok terében mozgó könnyű elektronokból épülnek fel. Az alapvető kölcsönhatások közül az elektromágneses kölcsönhatás játszik domináns szerepet belső szerkezeti felépítésükben. Míg az elektronok elemi részecskék, az atommagot alkotó protonok és neutronok további alkotórészekre bonthatók. Ezen szubatomi részecskék világa már az atommag- és részecskefizika tárgykörébe tartozik, ahol az elektromágneses kölcsönhatás helyett a gyenge és erős kölcsönhatások dominálnak. A molekulák világából a nagyobb mérettartományok felé kilépve pedig az tapasztalható, hogy a klasszikus fizika törvényszerűségei kezdenek érvényesülni, az elektromágneses kölcsönhatás mellett a gravitáció jelentősége egyre nő.

Sok molekulából álló rendszerek vizsgálatok (például oldatok) a klasszikus fizikai leírás még nagyon jó közelítésnek bizonyul, azonban ha a moleku-

lák belső szerkezetére vagyunk kíváncsiak, a megfelelő pontosság érdekében elengedhetetlen a kvantummechanikai megközelítés. Az elektronok és magok mérettartományában olyan effektusok lépnek fel, amelyek a klasszikus fizika eszköztárával értelmezhetetlenek.

A kvantummechanika 1925-ös megszületését követően robbanásszerű változások következtek az atomi részek fizikájában. Kiderült, hogy a kötött stacionárius kvantumrendszerek csak jól meghatározott állapotokban létezhetnek, diszkrét energiaspektrummal rendelkeznek, amelyek a rendszert jellemző időtől független Schrödinger-egyenlet megoldásával kaphatók meg. Néhány egyszerű esettől eltekintve (így a molekulák esetében is) a Schrödinger-egyenlet analitikusan nem oldható meg. Az elmúlt két évtized ugrásszerű számítástechnikai fejlődése következtében azonban már viszonylag nagy rendszerek numerikus megoldása is hatékonyan kivitelezhetővé vált.

Az elméleti leírás eszköztárának bővülésével párhuzamosan a kísérleti apparátus is óriási fejlődésen ment keresztül, elegendő ha csak a spektroszkópiai módszerek kifinomulására és a lézerek fejlődésére gondolunk. A molekulákban lejátszódó magdinamikai folyamatok szabályozásáért és monitorozásáért *Ab-*

A 2013. évi Magyar Fizikus Vándorgyűlésen elhangzott előadás írott változata.

Az írás a TÁMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0001 projekt keretében valósult meg az Európai Unió és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával.