

# A Maxwell-egyenletek

Ez a XIX. sz. egyik legnagyobb hatású egyenletrendszer, főleg azért, mert ebből az egyenletrendszerből vezették le az elektromágneses hullámok létezését.

1. Ampère-Maxwell féle gerjesztési törvény:

$$\oint_g \vec{H} \cdot d\vec{s} = \sum_n I_n + \frac{d}{dt} \int_F \vec{D} d\vec{A} \quad \text{és} \quad \text{rot} \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t},$$

azaz mozgó töltések vagy az időben változó elektromos mező örvényes mágneses mezőt kelt.

2. Faraday-féle indukció-törvény:

$$\oint_g \vec{E} \cdot d\vec{s} = -\frac{d}{dt} \int_F \vec{B} d\vec{A} \quad \text{és} \quad \text{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t},$$

azaz időben változó mágneses mező örvényes elektromos mezőt kelt.

3. Elektromos Gauss-törvény:

$$\oint_F \vec{D} d\vec{A} = Q \quad \text{és} \quad \text{div} \vec{D} = \rho,$$

azaz az elektromos tér forrásai a töltések.

4. Mágneses Gauss-törvény:

$$\oint_F \vec{B} d\vec{A} = 0 \quad \text{és} \quad \text{div} \vec{B} = 0,$$

vagyis a mágneses tér forrásmentes.

A Maxwell-egyenletrendszer megoldásához szükségesek az anyagegyenletek is, amelyek megadják, hogy mi a kapcsolat egyfelől az elektromos térerősség és az elektromos indukció, másfelől a mágneses térerősség és a mágneses indukció között. A lineáris anyagegyenletek:

$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$  és  $\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H}$ , valamint az Ohm-törvény:  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ , ahol a térerősségbe beleértjük az idegen térerősséget is. Míg azonban a Maxwell-egyenletek egzakt természettörvények, az anyagegyenletek csak bizonyos anyagokra igazak, és közelítő jellegűek. Nem adnak számot pl. a ferromágnesesség, ill. a permanens mágnesesek létezéséről.

## Optika: Elektromágneses hullámok

A Maxwell-egyenletekből hullámegyenlet vezethető le az  $\vec{E}$  és  $\vec{H}$  térerősségek komponenseire. A hullámegyenlet különösen egyszerű formát nyer homogén és izotróp szigetelőkhöz, azokban a frekvencia tartományokban, amelyekben a korábbi fejezetekben szereplő lineáris anyagegyenletek ( $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ ,  $\vec{B} = \mu \vec{H}$ ) jó közelítéssel teljesülnek. Ekkor a homogén hullámegyenlet(ek) bármelyik térerősség komponensre:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} = \epsilon \mu \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \quad \text{és} \quad \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial z^2} = \epsilon \mu \frac{\partial^2 H}{\partial t^2}.$$

Deriválással bizonyítható, hogy ennek megoldásai például a mechanikából jól ismert síkhullámok. Egy pozitív x tengely irányába haladó hullámban a térerősségeket a

$$E = E_0 \sin \left[ 2\pi \left( ft - \frac{x}{\lambda} \right) \right] \quad \text{és} \quad H = H_0 \sin \left[ 2\pi \left( ft - \frac{x}{\lambda} \right) \right]$$

képletek írják le, ahol  $\lambda$  és  $f$  a hullám frekvenciája és hullámhossza. A megoldás

viSSzahelyettesítése a hullámegyenletbe a  $\frac{1}{\lambda^2 f^2} = \epsilon\mu$  összefüggésre vezet. Mivel a hullám  $c$

terjedési sebessége a frekvencia és hullámhossz szorzata ( $c = f\lambda$ ), az a közeg abszolút

permittivitásával és permeabilitásával kifejezhető:  $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}}$ . A vákuumbeli terjedési sebesség

(azaz a vákuumbeli fénysebesség)  $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$  egy univerzális állandó, amely jól ismert univerzális

állandókból ( $\epsilon_0 \approx \frac{1}{4\pi \cdot 9 \cdot 10^9} \frac{C^2}{Nm^2}$ ,  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{Vs}{Am}$ ) kiszámítható. A számítás eredménye

(amit a kísérletek is megerősítenek) a jól ismert  $c \approx 3 \cdot 10^8 m/s$  érték.

Közegben a hullám terjedési sebessége függ annak elektromos és mágneses tulajdonságaitól:

$$\frac{c_{\text{vákuum}}}{c_{\text{közeg}}} = \frac{\sqrt{\epsilon\mu}}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}} = \sqrt{\epsilon_r\mu_r}. \text{ Tehát minél nagyobb a közeg relatív permittivitása és permeabilitása,}$$

annál kisebb ott a fény sebessége.

Megjegyezzük, hogy az elektromágneses hullámokat leíró képleteket átírhatjuk az

$$E = E_0 \sin(\omega t - kx), \quad H = H_0 \sin(\omega t - kx)$$

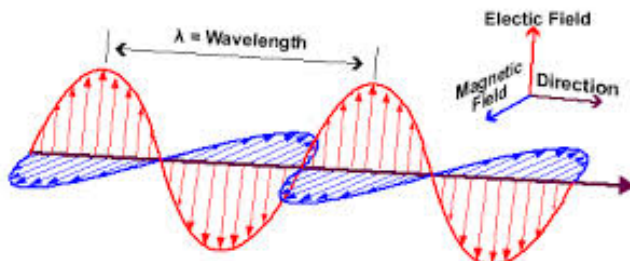
formába is, ahol  $\omega (=2\pi f)$  a körfrekvencia,  $k$  pedig a **hullámszám**,  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ .

Ezek az összefüggések általános esetben (tetszőleges irányú hullám esetén)

$$E = E_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}) \quad \text{és} \quad H = H_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r})$$

alakúak, ahol a  $\vec{k}$  hullámszám vektor hossza  $k$  és a hullám terjedése irányába mutat. Ezeket a hullámokat szokás síkhullámoknak is nevezni, mivel az azonos fázisú pontok mértani helyei síkok.

Az elektromágneses hullámok **transzverzálisak**. A transzverzalitás – ahogy azt a mechanikában [már megtanultuk](#) – azt jelenti, hogy a hullámban terjedő vektormennyiség merőleges a terjedés irányára. Az elektromágneses hullámok esetében ezek a vektormennyiségek az elektromos és a mágneses térerősség-vektorok. Ezek a vektorok ráadásul **egymásra is merőlegesek**, ami többet jelent, mint a transzverzalitást. Tehát végeredményben az elektromágneses sugárzásban az elektromos és a mágneses térerősség-vektorok egymásra is és a terjedés irányára is merőlegesek. Ezt szemléltetendő vegyünk fel egy olyan koordináta rendszert, hogy  $\vec{E}$  az  $x$  tengely, míg  $\vec{H}$  az  $y$  tengely irányába mutasson (egy fél periódusideig a pozitív, aztán a negatív irányba), a terjedés iránya pedig a  $z$  tengely legyen.



A sugárzás a térben hullám formájában terjed ugyanazzal a  $c$  fénysebességgel, energiát (és persze tömeget és impulzust) szállítva. Mivel  $c$  minden elektromágneses hullámra ugyanaz, a  $c=f\lambda$  képletből látható, hogy a frekvencia és a hullámhossz fordítottan arányosak. Megjegyezzük, hogy egyes kísérletekben a fény részecskeként viselkedik, a részecske (kvantum) neve **foton**. (Erről a klasszikus elektrodinamika nem tud számot adni, mi is a modern részben tárgyaljuk). A 380 nm és

780 nm (kerekítve 400 és 800 nm) közötti hullámhosszú elektromágneses sugárzás az emberi szem számára is látható, emiatt látható fénynek nevezik. Az összes elektromágneses sugárzás elrendezhető frekvencia (hullámhossz, ill. foton-energia) szerint, ekkor kapjuk az elektromágneses spektrumot.

## Optika (folytatás)

### A teljes elektromágneses színekép áttekintése

Az elektromágneses hullámok hullámhossztartománya rendkívül nagy, amelynek a látható színekép csak igen kis töredékét foglalja el. A látható színekép hosszú hullámú részéhez csatlakozik az infravörös színeképtartomány. Ez átnyúlik az elektromos úton előállított elektromos hullámok tartományába (mikrohullámok, ultrarövid, rövid-, hosszúhullámú rádióhullámok, majd a közönséges váltakozó áramok tartománya); a határon az egyenáram állna  $\infty$  hullámhosszal, 0 frekvenciával. Másrészt a látható színekép rövidhullámú részén túl az ultraibolya tartomány kezdődik, majd a röntgensugarak és a radioaktív  $\gamma$ -sugarak következnek. Még rövidebb a hullámhossza és így nagyobb a frekvenciája lehet a kozmikus sugárzás elektromágneses részének.

Mindezekre a hullámokra vákuumban lényegében ugyanazok a törvényszerűségek érvényesek: azonos sebességgel haladnak ( $c \approx 3 \cdot 10^8$  m/s), az elektromos és a mágneses térerősség vektora a terjedés és egymás irányára merőleges, periodikusan változik. Az elektromágneses sugárzás viselkedését az elektrodinamika írja le a Maxwell egyenletek alapján. Azonban az anyagok viselkedése a különböző hullámhosszakkal szemben más és más. A fémek pl. a látható fényt nem engedik át, elég nagy frekvenciájú röntgen-hullámokra nézve viszont átlátszóak. Az egyes anyagok és a fény bonyolult kölcsönhatásának leírására a klasszikus elektrodinamika önmagában nem elégséges.

Egy váltakozó áramú áramkörben az áramerősség periodikusan változik, ebből arra lehet következtetni, hogy mind az elektromos, mind a mágneses térerősség is periodikusan változik. Az áramkört alkotó vezetékek alakjától stb. függően ez elektromágneses hullámok kibocsátásával jár. A szokásos 50Hz-es váltóáramra ennek hullámhossza óriási,  $\lambda = c/f = 6000$  km. Ebből a tartományból a frekvencia növelésével folytonos az átmenet a rádióhullámok felé, melyek előállítása általában rezgőkörökben történik, antennával sugározzák ki őket. Növekvő frekvencia szerint hosszú-, közép-, és rövidhullámokról beszélhetünk, ill. URH (ultrarövid hullám) frekvenciákról. Az ennél rövidebb (1m-1mm) hullámhosszú, nagyobb frekvenciájú (300MHz-300GHz) sugárzást mikrohullámnak nevezik, de mivel nincs éles határ a rádióhullámok és a mikrohullámok között, vannak, akik a mikrohullámokat is a rádióhullámokhoz sorolják. Közismert, hogy mikrohullámot használunk ételmelegítésre (a dipólmomentummal rendelkező molekulák, különösen a víz, elnyelik az energiáját), ennek szokásos frekvenciája 2,45GHz (ami jóval kisebb, mint a vízmolekula rezonancia-frekvenciája). Emellett tárgyak helyének és sebességének meghatározására (radar) és PVC-hegesztésre is használják. Ebben a tartományban zajlik a kommunikáció a **mobiltelefonok** és az átjátszó tornyok között (kb. 900MHz), ill. itt helyezkedik el a **Bluetooth** és a WLAN (pl. **WiFi**) által használt frekvencia is, ami nagyságrendileg 2 GHz.

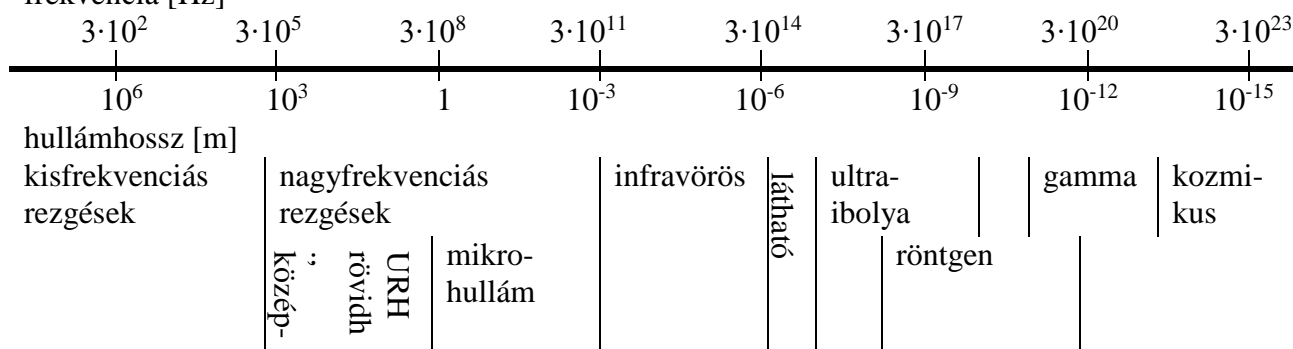
A minket körülvevő, lényegében szobahőmérsékletű testek a legtöbb sugárzást az infravörös tartományban bocsátják ki. Bőrünkkel ezt melegségnek érzékeljük, ezért hősugaraknak is nevezzük őket, bár ez megtévesztő lehet, mert magasabb hőmérsékleten látható és ultraibolya fényt is sugároznak a testek, pl. az izzólámpa (lásd a hőmérsékleti sugárzás részben). Az infravörös hullámokat használják az épületek, földfelületek kisugárzására jellemző hőfényképek készítésekor. A látható színekép (kb. 380-740 nm) határát pusztán biológiai adottságok szabják meg, így gyakran a láthatóság tartományán kívül eső elektromágneses hullámokat is fénynek hívják (pl. infravörös fény, röntgenfény). A hagyományos optikai eszközökön kívül számos lézer fénye is kb. ebbe a tartományba esik, pl. a CD (780nm), DVD (650nm) és Blu-ray (405nm) lemezek olvasására használt lézereké.

Az ultraibolya sugárzásokat három tartományra osztják, az UV A hullámhossza 320 nm feletti, az UV B hullámoké 320 és 280 nm közötti, az UV C hullámoké 280 nm-től kisebb. Az UV sugárzás (különösen a nagyobb frekvenciájú) képes felbontani a kémiai kötéseket, esetleg elektronokat is leszakíthat az atomokról. Az emberek esetében okozhat leégést, ill. bőrrákot. Az ultraibolya sugárzást fertőtlenítésre és ásványhatározásra is használják.

A röntgensugarak frekvenciája többnyire az ultraibolya tartomány fölött van, velük az atomfizika alapjainak megismerése után külön fejezetben foglalkozunk. Leggyakoribb előállítási módjuk, hogy gyorsított elektronokat valamilyen anyagnak, pl. fémfelületnek ütköztetnek.

A  $\gamma$ -sugarak atommag-reakciókban, természetes és mesterséges atommag-átalakulásoknál keletkeznek. Frekvenciájuk akár  $10^{21}$  Hz is lehet. Itt kell megjegyeznünk, hogy egy adott sugárzás kategorizálásánál (pl. röntgen vagy gamma) nem elsősorban a hullámhosszt/frekvenciát, hanem a keletkezés módját veszik alapul, a röntgen pl. az atomok

frekvencia [Hz]



elektronburkában, a gamma fotonok az atommagban lejátszódó folyamatok termékei. Megfelelő feszültséggel felgyorsítva a fémnek csapódó elektronok nagyobb energiájú röntgensugárzást keltenek, mint a legtöbb magátalakulásban keletkező  $\gamma$ -sugárzás.

A világűrben is különböző fajtájú és energiájú sugárzások, részecskék záporoznak a Földre (pl. protonok, hélium-atommagok, elektronok... ezek nagy része nem elektromágneses hullám!), ezt nevezzük elsődleges kozmikus sugárzásnak. Ezek egy része ütközik a légkört alkotó atomokkal és az ütközésben más részecskék (pl. fotonok) keletkeznek, ez a másodlagos kozmikus sugárzás.

## A modern fizikához vezető tapasztalatok

### Bevezetés

A fizika történetének egyik legnagyobb kérdése az volt, hogy az anyag a végtelenségig osztható, folytonos (kontinuum) szerkezetű vagy pedig vannak tovább már nem osztható egységei, az atomok. Ez az évezredek kérdése a XIX. század végére véglegesen eldőlt, mint tudjuk az atomelmélet javára. Az atomok létezésében akkor lehetünk biztosak, ha jellemzőiket (pl. tömeg, méret, stb.) pontosan meg tudjuk mérni, ezt pl. a kinetikus gázelmélet lehetővé tette.

Az atomelmélet győzelmét követően hamar kiderült, hogy az atomnak van belső szerkezete. Az elektron felfedezésével (J. J. Thomson, 1897) nyilvánvalóvá vált, hogy azt (azokat) minden atomnak tartalmaznia kell. Az is hamarosan nyilvánvalóvá vált, hogy az anyag atomossága megköveteli a töltés adagosságát is. A töltésnek van legkisebb tovább már nem osztható egységét, az elemi töltés nagyságát *Millikan* mérte meg 1910-ben, és azt kapta, hogy ennek a nagysága:  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  C. Ilyen nagyságú töltése van tehát az elektronnak is, de az előjele (a jóval korábbi előjel konvenció miatt) negatív.

**Alkalmazás: Sörétzaj** (Poisson-zaj, shot noise)

Az elektromos áram erőssége kis mértékben ingadozik állandó forrásfeszültség esetén is. Ez a sörétzaj abból adódik, hogy az áramot diszkrét töltéshordozók mozgása okozza, azaz az áramló közeg nem folytonos. Az elektronikában, főként a nano-elektronikában van jelentősége.

Az optikai eszközökben a fény által kiváltott jelenségek mérését is sörétzaj terhelheti, amely akkor lép fel, ha az adott eszközben a fény részecske jellegű viselkedése nem elhanyagolható. Ekkor, ha a diszkrét pillanatokban detektált egyedi fotonok egymástól függetlenül váltanak ki választ a detektorból, érvényesülhet a Poisson-eloszlás. Pl. egy CCD kamera a fény gyűjtése során a tárgyról egymástól függetlenül érkező fotonokat érzékel és alakít fotoelektronná, így (jellemzően kis fotonszámú detektálásnál) a sörétzaj azt okozhatja, hogy az átlagos értéktől az egyes pixelek fényessége eltér. Ez a fluktuáció okozza a kép szemcsés jellegét.

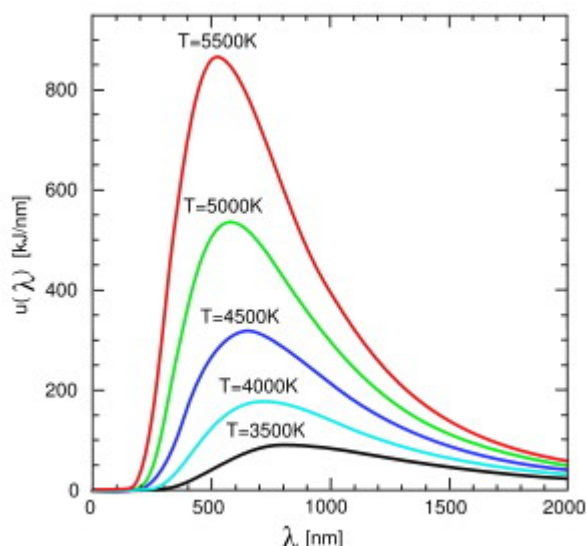
Ha az elektron  $U$  potenciálkülönbségen halad át, energiája  $U \cdot e$ -vel változik. Tehát pl. 1 volt feszültség hatására  $E = 1,6 \cdot 10^{-19} J$  energiát nyer, ezt **elektronvolt**nak (eV) nevezzük. Tehát az eV az energia mértékegysége, elterjedten használják a fizika azon ágaiban, ahol kis méretű objektumokkal (pl. atomokkal) foglalkoznak.

Az anyag atomossága és a töltés adagossága jól beilleszthetők voltak a klasszikus fizika kereteibe is. Az adagosság azonban olyan fizikai mennyiségekre is jellemző (pl. energia, perdület) amelyet a klasszikus fizika egyértelműen folytonosan változtathatónak tekint. Ez az adagosság a klasszikus fizika kereteibe már egyáltalán nem illeszthető be és megkövetelte egy új fizika, a kvantumfizika kiépítését. A kvantumfizika első alapköve mindenképpen egy több évtizede kísérletileg rejtélyes, a klasszikus elméletek által megmagyarázhatatlan jelenség, a hőmérsékleti sugárzás helyes értelmezése volt.

## ***Hőmérsékleti sugárzás, feketetest sugárzás***

Mindennapos tapasztalat, hogy az izzított testek először „hősugárzást”, majd magasabb hőmérsékleten látható fényt is kibocsájtanak. Adott anyagfajta esetén a kibocsájtott sugárzás minősége és mennyisége a hőmérséklettől függ, ezért ezt a sugárzást hőmérsékleti sugárzásnak nevezzük. Bár érzékszerveinkkel csak a melegebb testek sugárzását érzékeljük, hőmérsékleti sugárzást a testek minden hőmérsékleten kibocsájtanak, a hideg testek nyilván sokkal kevesebbet. (Egyes anyagok (fénycső, LED, szentjánosbogár, stb.) másféle sugárzásokat is kibocsájthatnak, ezekkel az ún. lumineszcencia sugárzásokkal itt nem foglalkozunk.)

A különböző anyagoknak azonban a hőmérsékleti sugárzása is igen lényegesen különbözhet. Hamar kiderült azonban, hogy az anyag üregeiből kilépő sugárzásokra ez nem igaz, azok nagyon hasonlóak. Ha az üreg ideális (nagy üreg kis nyílással), az üreg nyílásán kívülről behatoló fény, ha vissza is verődne az üreg belső faláról, a kicsi nyílást nem találja újra meg. Az ideális üreg a sugárzást tehát teljesen elnyeli, kívülről a nyíláson betekintve azt a lehető legfeketébbnek (minden fekete festéknél feketébbnek) látjuk. Az ideális üreg tehát – legyen az bármilyen anyagban is - egy **abszolút fekete test**, amelynek a sugárzása anyagi minőségtől független, csak a hőmérséklettől függ. Ráadásul adott hőmérsékleten az abszolút fekete test sugároz legintenzívebben. (Tehát ha felizzítják az üreget tartalmazó anyagot, akkor a lyuk erősebben világít, mint az anyag többi része.) Az ábrán az abszolút fekete test által egységnyi hullámhossz-tartományban (1 nm széles sávban) kibocsájtott sugárzás energiája látható különböző hőmérsékletekre.



A görbék nem metszik egymást, azaz a magasabb hőmérsékletű test minden hullámhosszon jobban sugároz.

Stefan-Boltzmann törvény: az abszolút fekete test teljes (vagyis az összes hullámhosszra összegzett) sugárzása (sugárzásának energiája, ezzel a teljesítménye) arányos a test abszolút (Kelvinben mért) hőmérsékletének negyedik hatványával és a test felszínével:

$$P_{\text{teljes}} = \sigma T^4 A$$

Ahol  $\sigma \approx 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)$  a Stefan-Boltzmann állandó.

Wien-féle (eltolódási) törvény: az abszolút fekete test maximális emisszió-képességéhez tartozó hullámhossz ( $\lambda_{\text{max}}$ , azaz a görbék csúcsaihoz tartozó hullámhossz) az abszolút (Kelvinben mért) hőmérséklettel fordítva arányos:

$$\lambda_{\text{max}} T = \text{const}$$

A Wien-féle konstans értéke  $2,9 \cdot 10^{-3} \text{ Km}$ , vagyis pl. egy ezer kelvin hőmérsékletű test  $2,9 \mu\text{m}$  hullámhosszú fényből sugároz ki a legtöbbet.

A fenti eredmények többsége megérthető a klasszikus fizika alapján is, de az emisszióképesség hullámhossz függését leíró görbék alakja nem. Ez a XIX. század végén a fizika nagy rejtélye volt. A mérési eredmények számszerű magyarázata csak 1900-ban sikerült Max Planck-nak a (Planck-féle) sugárzási törvény levezetésével:

$$P_f = \frac{2h}{c^2} \frac{f^3}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1}$$

De ez csak úgy sikerülhetett, ha feltételezte, hogy az  $f$  frekvenciájú

elektromágneses sugárzás energiája *nem folytonosan* változhat,

hanem csak adagokban.

A legkisebb felvehető energiaadag (kvantum) nagysága arányos az  $f$  frekvenciával:

$$E = hf$$

A kísérleti adatok akkor illeszkedtek legjobban a számított görbékre, amikor a  $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  értéket használta. Ma ezt az univerzális állandót Planck állandónak nevezzük.

A korábban folytonosnak vélt elektromágneses mező tehát mégsem folytonos. Különösen igaz ez nagyobb frekvenciákon (pl. gamma sugárzás), ahol nagyok az energia adagok is, ott az adagosság



igen szembeötlő. Kisebb frekvenciákon (pl. a rádióhullámok esetén) kicsik az energia adagok is, az adagosság még nem feltűnő. A fenti energiaadag a makroszkopikus méretű testek energiájához képest is igen kicsi, tehát az energia adagosságával a klasszikus mechanikában sem kell törődnünk.

Az energia adagossága teljesen ellentmond az addigi (XIX. századi) fizika szemléletének, egyáltalán nem érthető meg pl. a Maxwell-egyenletekből. Planck lépése volt az első a XX. század fizikájának, a kvantumfizikának a megalapozásában.

## Fotoeffektus vagy fényelektromos hatás

Ultraibolya **fény hatására** a cinklemez **elektronok hagyják el**. Alkáli fémek esetén látható fény segítségével is elő lehet idézni az elektronok kilépését. A mérési tapasztalatok:

1. ha a megvilágító fény frekvenciája egy kritikus  $f_0$  érték alatt marad (határfrekvencia), akkor elektronkilépés nincs ( $f_0$  a fém anyagi minőségétől függ.)
2. ha van elektron kilépés, akkor a  $v_{\max}$  kilépési sebesség az kibocsájtó anyag anyagi minőségén kívül csak a megvilágító fény frekvenciájától függ, az intenzitásától nem (változatlan frekvencia mellett)
3. a kilépő elektronok száma egyenesen arányos a megvilágító fény intenzitásával (változatlan frekvencia mellett)
4. az elektronok kilépése a megvilágítást követően  $10^{-8}$ -s-on belül megindul.

A fenti mérési tapasztalatok a fény hullámtermészetével **nem** magyarázhatóak. A jelenséget Einstein magyarázta meg 1905-ben. Amikor az elektromágneses sugárzás a fém szabad elektronjaival kölcsönhatásba lép, nem hullám, hanem **részecskeszerű** viselkedést mutat.

A fény részecskéjét **foton**nak nevezték el. Az  $f$  frekvenciájú foton energiája:

$$E = hf$$

Egy foton csak egy elektronnal lép kölcsönhatásba, nem egyenletesen oszlik meg a környező elektronok között.

Az Einstein-féle fényelektromos egyenlet (Nobel-díjat ért):

$$hf = W_{ki} + \frac{1}{2} m_e v_{\max}^2$$

a  $W_{ki}$  **kilépési munka** a fémre jellemző, azt mutatja meg, hogy mennyi energia kell, hogy egy elektront eltávolítsunk a fémkristályból,  $\frac{1}{2} m_e v^2$  pedig az elektron mozgási energiája. A határfrekvencia:  $hf_0 = W_{ki}$ , ekkor a foton összes energiája az elektron kilökésére fordítódik, így utóbbinak már nem lesz mozgási energiája.

Megjegyezzük, hogy a fotoeffektusnak van egy, az alkalmazások szempontjából talán fontosabb formája is, amelyben egyes félvezető anyagok fény hatására vezetővé válnak. A folyamat során elektron belül marad az anyagon, de egy másik állapotba jut (a vegyértéksávból a vezetési sávba). Ezért ezt a jelenséget belső fotoeffektusnak nevezik, a fenti, „hagyományos” jelenséget pedig gyakran külső fotoeffektusnak.

## A foton tulajdonságai

Az elektromágneses sugárzás által szállított energiához – amely a fentiek szerint tehát adagos – tömeg is rendelhető. Ezt is Einstein ismerte fel először, a fényelektromos jelenség magyarázatával

kb. egyidejűleg. Ma ezt a törvényt tömeg-energia ekvivalenciának nevezzük és fizika egyik legfontosabb és legáltalánosabb törvényének tartjuk. Eszerint minden fizikai objektum (legyen az test, mező, részecske vagy bármi más...) tömege és energiatartalma szigorúan arányos egymással, az arányossági tényező a fénysebesség négyzete:

$$E = m \cdot c^2$$

Ez a törvény lehetőséget ad arra, hogy a fotonhoz tömeget rendeljünk ( $m_f$ ), hiszen ismerjük az energiáját:

$$m_f = \frac{E}{c^2} = \frac{hf}{c^2} = \frac{h}{c} \cdot \frac{f}{c} = \frac{h}{c \cdot \lambda}$$

A foton kölcsönhatásaiban azonban nem a tömege, hanem a lendülete mutatkozik meg, mert az egymással kölcsönható, egymással ütköző részecskék együttes lendülete (impulzusa) a megmaradó mennyiség. Mivel a foton csak fénysebességgel mozgó állapotban létezik, lendülete:

$$I_f = m_f \cdot c = \frac{h}{\lambda}$$

A foton lendülete tehát a Planck-állandó és a hullámhossz hányadosa. A fotonok lendülete miatt a fény nyomást fejt ki arra a felületre, amelyik elnyeli vagy visszaveri.

A következőkben nyomásról nem lesz szó, impulzusról annál inkább. Ezentúl az impulzust gyakran  $p$ -vel fogjuk jelölni, mert a kvantumfizikában ez a szokásos jelölés.

Mivel a  $k$  hullámszám fordítottan arányos a hullámhosszal:  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , azaz  $\frac{1}{\lambda} = \frac{k}{2\pi}$  az impulzusra

vonatkozó összefüggésből azt kapjuk, hogy  $p = \frac{h}{\lambda} = h \cdot \frac{k}{2\pi} = \hbar k$ , vagyis a foton lendülete:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Később szükségünk lesz arra, hogy legyen elképzelésünk arról, hogy fontosabb tartományokban mekkora az egyes fotonok energiája elektronvoltban. Ezt az  $E = hf = hc / \lambda$  képlet alapján az

$$E[eV] = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} Js}{1,6 \cdot 10^{-19} J / eV} \cdot \frac{3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}}{\lambda} \approx \frac{1,243 \cdot 10^{-6} eV \cdot m}{\lambda}$$

módon számolhatjuk ki. Tehát pl. egy 1000nm-es infravörös foton energiája  $1,24eV$ . A 700nm-es vörös színhez  $1,77eV$ -es, a 400nm-es ibolyához pedig  $3,1eV$ -es fotonok tartoznak.

Megjegyezzük, hogy a klasszikus fizikában két, vákuumban haladó fénysugár egyáltalán nem hat kölcsön egymással, mivel a Maxwell-egyenletek lineárisak. (Ha az anyag, amiben a fény halad, nemlineáris tulajdonságokkal rendelkezik, ez az állítás már nem igaz.) Hasonlóan, mivel a fotonoknak nincs elektromos töltésük, első megközelítésben nem hatnak kölcsön egymással, akadálytalanul áthaladnak egymáson. Nagy energiás (pl. gamma) fotonok esetében megfigyelhető ettől egy kismértékű eltérés, de ez számunkra elhanyagolható.

**Feladat:** A fotocellára monokromatikus fénysugarat bocsájtunk. A fotoelektronok mozgási energiáját  $1,8 V$  ellenfeszítéssel tudjuk kompenzálni. A fotocella cézium anyagára vonatkozó határhullámhossz  $635 nm$ . Számítsuk ki a

- kilépési munkát,
- a beeső fénysugár frekvenciáját és hullámhosszát,
- a beeső fénysugár egyetlen fotonjának impulzusát!

A kilépési munkát a megadott határhullámhosszból számíthatjuk:



$$W_{kil} = hf_h = h \frac{c}{\lambda_h} = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot \frac{3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}}{6,35 \cdot 10^{-7} m} \approx 3,13 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

A kilépő elektronok mozgási energiáját a fékező elektromos tér munkavégzéséből kapjuk:

$$0 - \frac{1}{2}mv_{\max}^2 = W_{el}.$$

Az Einstein-féle fényelektromos egyenletbe ezt behelyettesítve:

$$hf = W_{kil} + \frac{1}{2}mv_{\max}^2 = W_{kil} + |Q_e| \cdot |U|$$

$$f = \frac{W_{kil} + |Q_e| |U|}{h} = \frac{3,13 \cdot 10^{-19} \text{ J} + 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 1,8 \text{ V}}{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}} \approx 9,07 \cdot 10^{14} \frac{1}{s}. \text{ Ebből a hullámhosszra a } 331 \text{ nm-}$$

es érték adódik, tehát a fénysugár az ultraibolya tartományba esik.

c) A foton impulzusa a tömeg-energia ekvivalencia elv alapján

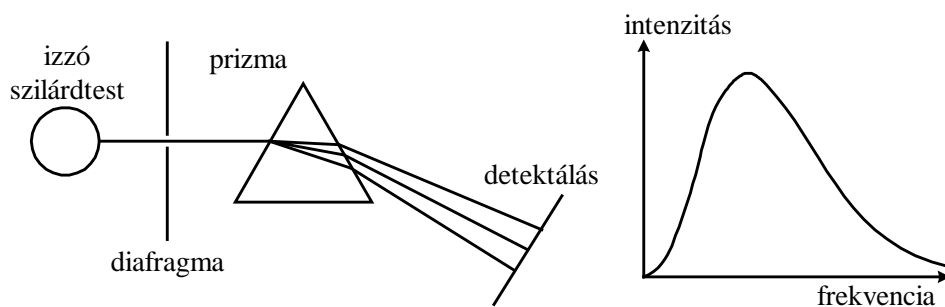
$$E_{\text{foton}} = hf = mc^2, \text{ amelyből „c”-vel osztva kapjuk:}$$

$$p = mc = \frac{hf}{c} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 9,06 \cdot 10^{14} \frac{1}{s}}{3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}} \approx 2 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \frac{m}{s}.$$

## Atomhéjfizika

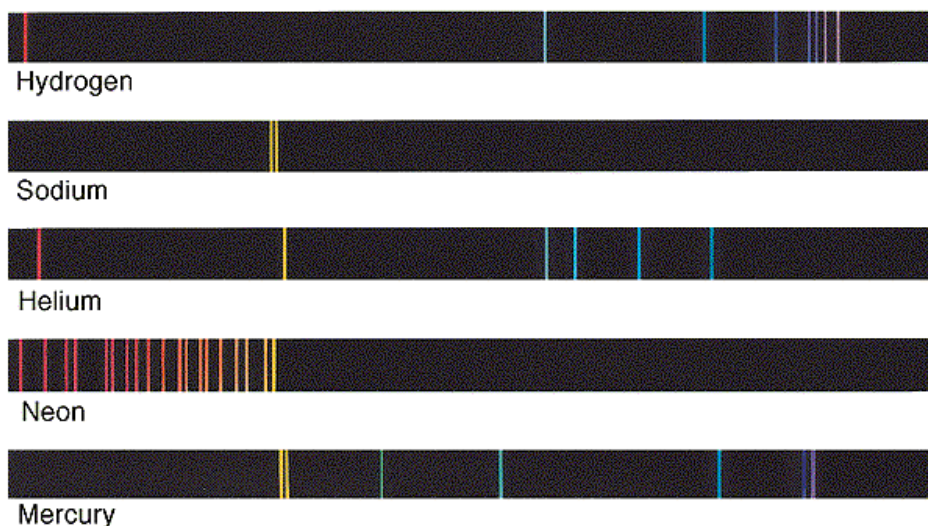
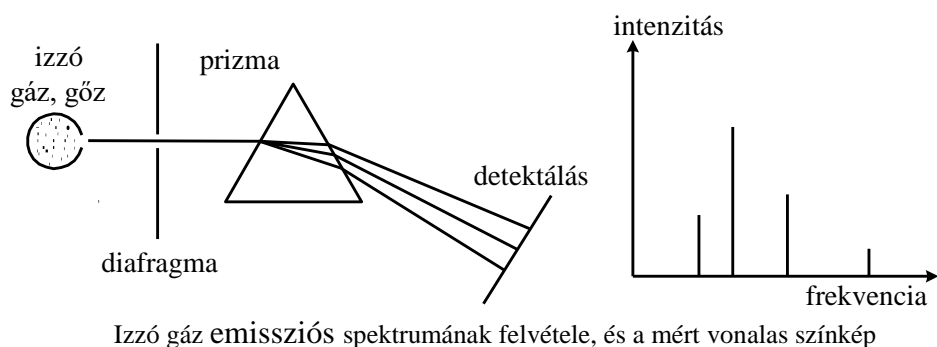
### Gázok emissziós és abszorpciós színe

Az izzó szilárd test folytonos spektrumú sugárzást bocsát ki, azaz az egyes színek között az átmenet folytonos.



Izzó szilárd test emissziós spektrumának felvétele, és a mért folytonos színek

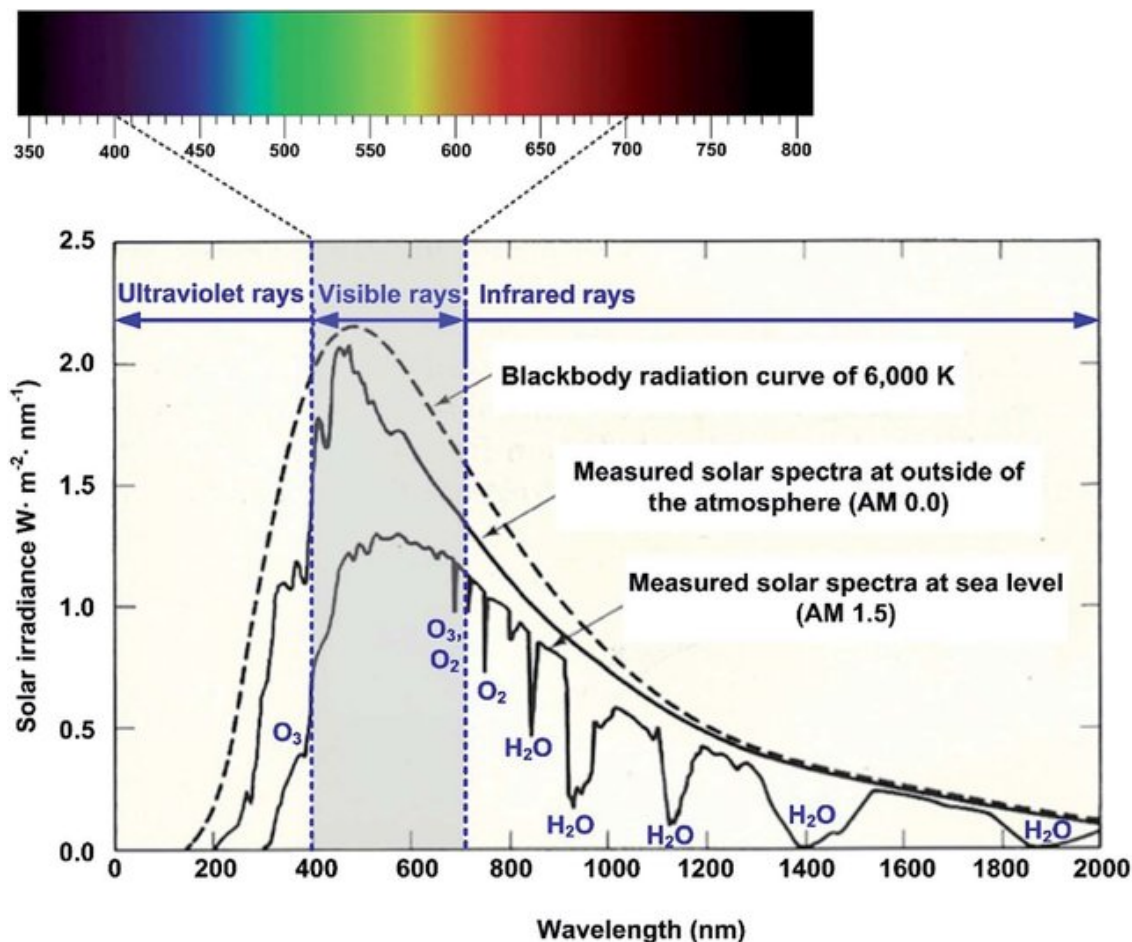
Ezzel szemben az izzó atomos gázok vagy gőzök által emittált (magyarul kibocsájtott) sugárzást felbontva a **spektrum vonalas szerkezetű** lesz, például látható tartományban színes csíkok jelennek meg az ernyőn. A tapasztalat szerint a vonalas emissziós színekép (spektrum) a gáz anyagi minőségétől függ.



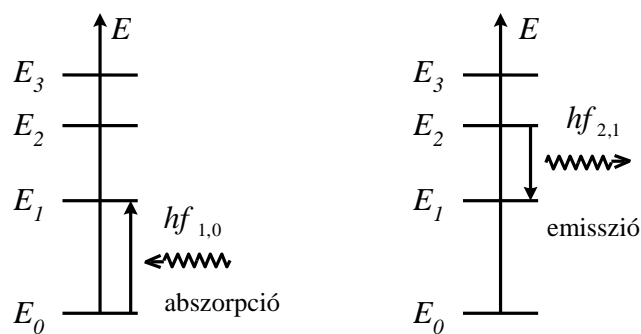
Ha a gáz molekulákból áll, a színek bonyolultabb, sávos felépítésű, de nagyfelbontású műszerekkel vizsgálva látszik, hogy a sávok is egymáshoz közel eső vonalakkal állnak.

Az izzó szilárd test folytonos spektrumú sugárzását hideg gázon átbocsátva és prizmával felbontva nyerhetjük az abszorpciós spektrumot, ami nem teljesen folytonos, benne fekete vonalak maradnak, az anyagi minőségtől függően. A tapasztalat szerint egy gáz hideg állapotában éppen azokat a vonalakat nyeli el, amelyeket izzó állapotában emittálni tud.

Az alábbi ábrán a napfény spektruma látható egy ideális feketetest spektrumához viszonyítva. A tengerszinten főként azért sokkal kisebb az intenzitás, mert a légkört alkotó egyes molekulák, a megfelelő hullámhosszokon elnyelik a fotonokat. Az ultraibolya-lila sugárzás nagy részét az ózonréteg szűri ki (a légkör felső rétegeiben). A vörös, közeli infravörös sugárzást az oxigén és a vízgőz, a távoli infravöröst döntően a szén-dioxid (lásd üvegházhatás) nyeli el. A legnagyobb mennyiségben jelen lévő nitrogén elnyelő-képessége elsősorban a távoli ultraibolya tartományban nagy. Az abszorpció mellett jelen van a szóródás is, elsősorban az alsóbb rétegekben, ahol a szilárd szemcsék (por, aeroszol, korom) hatására a fény szóródik, visszaverődik és elnyelődik.



A gázok emissziós és abszorpciós színeképek magyarázatához fel kellett tételezni azt, hogy a magányos atomok, molekulák energiája *nem változhat folytonosan*, hanem csak bizonyos meghatározott diszkrét értékeket vehet fel, s ezek a diszkrét energiák, az anyagi minőségtől függenek.



Az atomok diszkrét energiái, és a közöttük történő átmenetek

A két állapot közötti átmenet során csak olyan foton emissziójára vagy abszorpciójára van lehetőség, amelynél az atomi energiákra és a foton frekvenciájára teljesül az úgynevezett frekvencia feltétel:

$$E_i - E_k = hf_{i,k}.$$

## A Bohr-modell

### Bohr posztulátumok (1913)

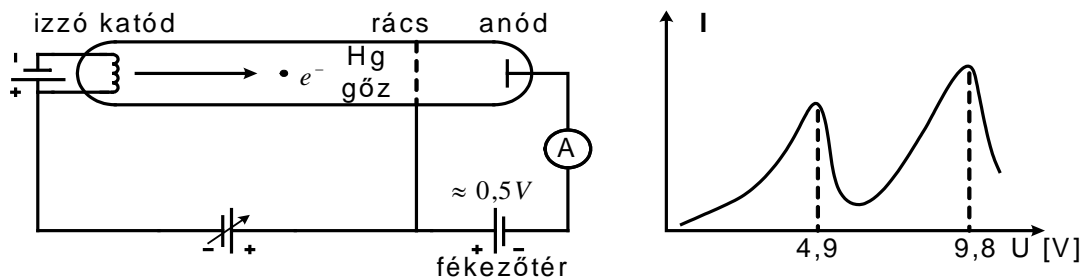
1. Az atomban az elektronok csak diszkrét  $E_1, E_2, \dots$  energiaszinteken tartózkodhatnak, és ezekben az úgynevezett stacionárius állapotokban tartózkodva nem sugároznak.
2. Az atomok akkor sugároznak, ha az elektronok egy magasabb energiájú állapotból alacsonyabb energiájú állapotba kerülnek, ilyenkor a kisugárzott frekvencia,

$$f = \frac{\Delta E}{h},$$

ahol  $\Delta E$  a két energiaszint különbsége, a Bohr-féle frekvencia feltétel, tehát:

$$E_i - E_k = hf_{ik}$$

A Bohr-posztulátumok egyik fontos bizonyítékát a **Franck-Hertz kísérlet** szolgáltatta:



A Franck-Hertz kísérlet elrendezése, és a mért karakterisztika

Az izzókatódból kilépő elektronok gyorsulnak az anód felé, és a higanyatomokkal rugalmasan ütköznek. A rugalmas ütközések során a nagy tömegkülönbség miatt az elektronok nem tudnak energiát átadni a Hg atomoknak (lepattannak róluk). Így az elektronok a rácsot nagy sebességgel érik el, az ellentéren átfutva az anódba csapódnak, az árammérő áramot jelez. Ha azonban az elektronok energiája eléri a 4,9 eV-ot, akkor azok már rugalmatlanul is ütközhetnek a higany atomokkal. A rugalmatlan ütközések során elvesztik energiájukat, nem tudnak áthaladni az ellentéren, ezért ezen feszültségnél leesik az áram. 4,9 eV alatt nem lehet rugalmatlan ütközés, mivel ennél kevesebbet a Hg atom nem tud felvenni, tehát az alapállapot és az első gerjesztett állapot energiakülönbsége pont ennyi lehet. 9,8 V esetén az elektronok mozgásuk során kétszer képesek rugalmatlanul ütközni és gerjeszteni a Hg-atomokat. A higany atomban a gerjesztett állapotban lévő elektronok spontán módon visszatérnek az alacsonyabb energiájú állapotba és

$$f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{4,9 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{6,623 \cdot 10^{-34}} = 1,183 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

frekvenciájú sugárzást bocsátanak ki, ez jól egyezik a kísérlettel.

## A Hidrogénatom Bohr modellje

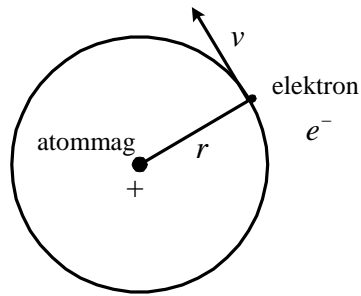
A posztulátumokban szereplő diszkrét energiaértékeket kellene meghatározni. Ezeket egy további, ún. kvantumfeltételből lehet levezetni, amely a mechanikailag lehetséges körpályák közül választja ki a megengedetteket. A kvantumfeltétel kimondja, hogy az elektron *pálya-impulzusmomentuma*<sup>1</sup> kvantált, (adagos) és értéke csak a  $h/2\pi$  egészszámú többszöröse lehet:

$$L_e = n \hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

körpálya esetén tehát:

$$mvr = n \hbar$$

<sup>1</sup> A pályaimpulzusmomentum az elektron atommag körüli mozgásához tartozó **perdület**, [később ki fog derülni](#), hogy az elektronnak sajátperdülete is van, aminek nincs köze az atommag körüli mozgáshoz



Elektron mozgása az atommag körül, Bohr modell

A nyugvónak tekintett,  $z$  rendszámú,  $ze$  töltésű mag körül körmozgást végző egyetlen  $e$  töltésű elektronra ható Coulomb-erő adja a centripetális erőt:

$$k \frac{ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}, \rightarrow kze^2 = mvr \cdot v, \rightarrow kze^2 = \hbar n v$$

Az elektron sebessége az utóbbi összefüggésből  $v = \frac{ke^2z}{\hbar n}$ , az energiája pedig:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}mv^2 - k \frac{ze^2}{r} = \frac{1}{2}mv^2 - mv^2 = -\frac{1}{2}mv^2,$$

Ahol felhasználtuk a ponttöltés elektrosztatikus esetre levezetett potenciálját. Behelyettesítve a sebességre kapott kifejezést:

$$E = -\frac{1}{2}m \cdot \frac{k^2 z^2 e^4}{\hbar^2 n^2} = -\frac{mk^2 z^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

így a diszkrét energiaértékek:

$$E_n = -E^* z^2 \cdot \frac{1}{n^2},$$

ahol  $E^* = \frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} = 2,18 \cdot 10^{-18} J = 13,6 eV$ . A kérdéses diszkrét energiaértékek tehát egy olyan

sorozatot alkotnak, amelynek elemei  $-1/n^2$ -tel arányosak. Ha  $z=1$ , akkor két energiaszint közötti átmenet során kisugárzott vagy elnyelt frekvenciára kapott összefüggés:

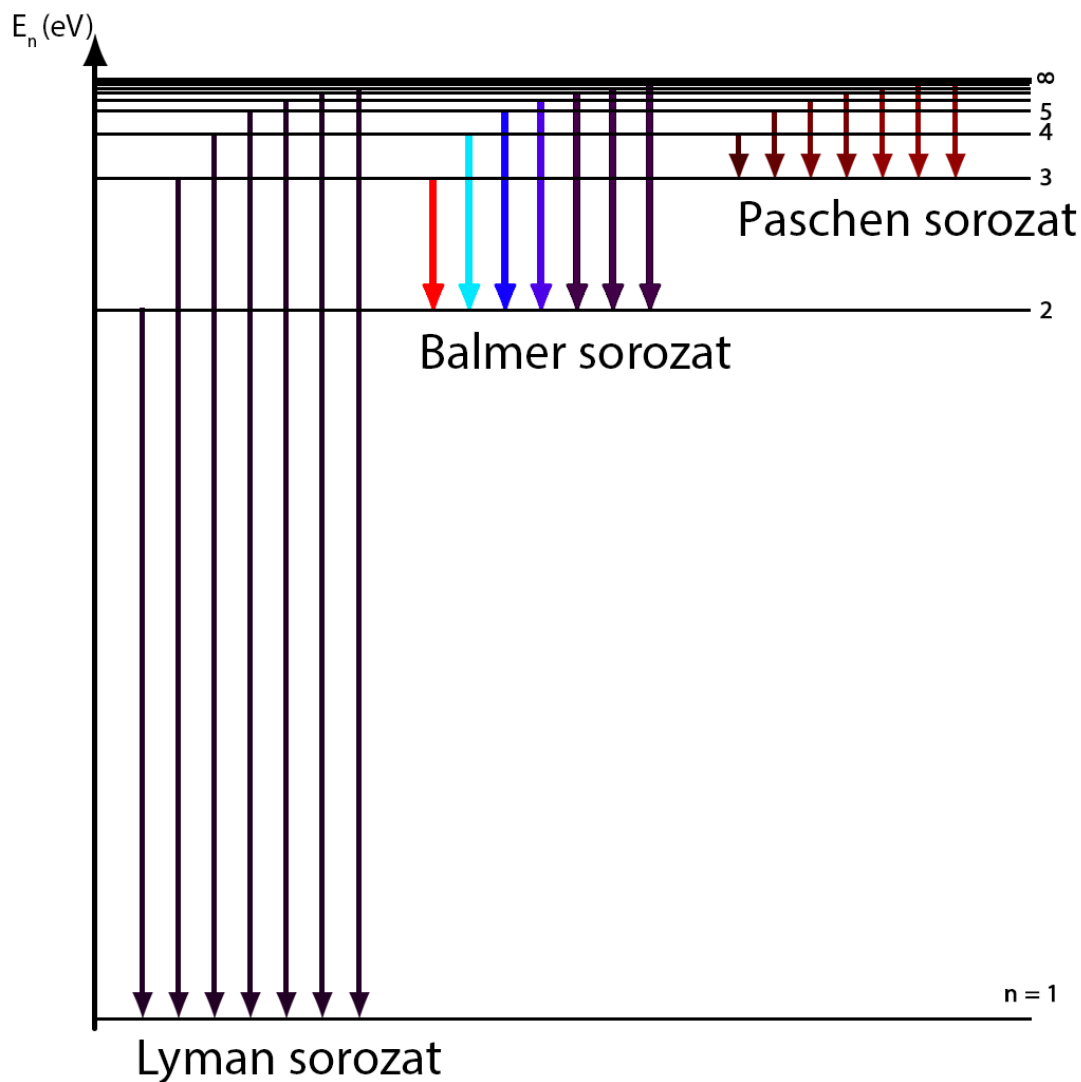
$$f_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{E^*}{h} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

A Bohr modell jól szolgáltatta a kibocsátott fotonok frekvenciáját, és az  $R$  Rydberg állandót. A modell nem csak H-re működik, hanem  $He^+$ -ra,  $Li^{++}$ -ra ... is (H-szerű ionokra). Látható, hogy a rendszám növelésével az adott  $n$ -hez tartozó energiaszintek mélyebbre kerülnek, mivel több proton erősebben vonzza az elektronokat. A vonalak sorozatokba rendezhetőek:

Lyman-sorozat:  $m = 1, n > 1, f_{n1} = R \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right)$ , ultraibolya tartományba esik

Balmer-sorozat:  $m = 2, n > 2, f_{n2} = R \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$ , az első 4 vonal látható, a többi UV

Paschen-sorozat:  $m = 3, n > 3, f_{n3} = R \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{n^2} \right)$ , infravörös tartományba esik



Az atom alapállapotban van, ha minden elektron a lehető legkisebb energiával rendelkezik. Az atom csak akkor tud fotont kibocsájtani, ha ennél magasabb, ún. gerjesztett állapotban van, mert csak ekkor csökkenhet az energiája. Ha csak egy elektronja van a hidrogénatomnak, akkor alapállapotban  $n=1$ , ennek energiája  $-R_h$ , míg pl. az első gerjesztett állapoté  $-R_h/4$ , mivel  $n=2$ . Az is rögtön látszik, hogy a hidrogénatom ionizációs energiája  $13,6\text{eV}$ .

A Bohr-modell hiányossága, hogy körpályán keringő elektron esetén a H-atom korong vagy karika alakú kellene, hogy legyen, de a valóságban (alapállapotban) teljesen gömbszimmetrikus. Emellett a modell csak a hidrogén atomra és a hidrogénszerű ionokra jó, de ezekre is vannak hibás állításai, pl. megmérték, hogy a valóságban az elektron atommag körüli keringéséhez tartozó impulzusmomentuma nulla is lehet, ami teljesen értelmezhetetlen a klasszikus fizikában, csak a kvantummechanika tudja megmagyarázni.

## Röntgensugárzás

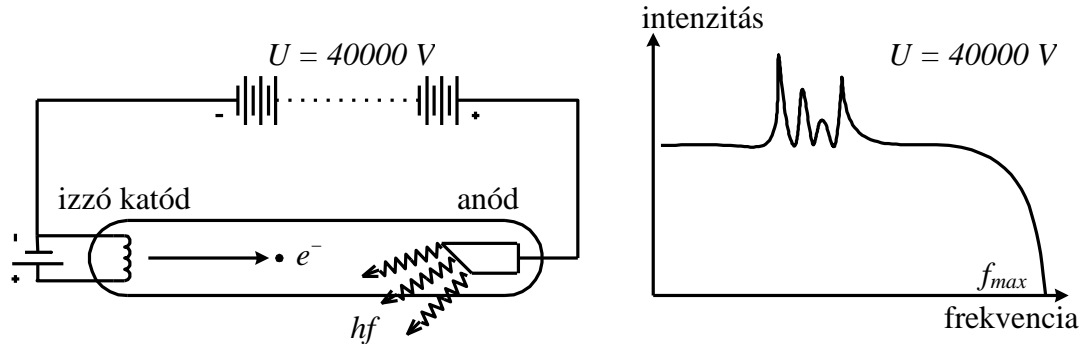
1895-ban fedezte fel **Röntgen**, az első fizikai Nobel díjat ezért adták. Ő maga X-sugárzásnak nevezte, angolul ma is X-ray-nek hívják. Röntgensugárzásnak nevezzük azt a rövidhullámú elektromágneses sugárzást, amelynek hullámhossztartománya  $10^{-8}\text{m}$ -tól  $10^{-12}\text{m}$ -ig terjed. Tehát egy röntgen foton frekvenciája és ezzel energiája sokkal nagyobb, mint azon fotonoké, amelyből a látható fény áll. A röntgensugárzás leginkább akkor keletkezik, amikor felgyorsított elektronok nagyrendszámú fém felületébe csapódnak. A becsapódás során egy folytonos spektrumú



úgynevezett *fékezési sugárzás*, valamint egy vonalas szerkezetű **karakterisztikus sugárzás** jön létre.

Fékezési sugárzás létrejöttének magyarázata a következő: az elektron behatol egy nehéz atommag Coulomb-terébe, ott eltérül és lefékeződik. A fellépő energiaveszteséget egy röntgen foton formájában sugározza ki, melynek frekvenciája  $f$ .

$$\frac{1}{2}mv_1^2 - \frac{1}{2}mv_2^2 = hf$$



Az izzókatódos röntgenső, és a kibocsátott röntgenspektrum

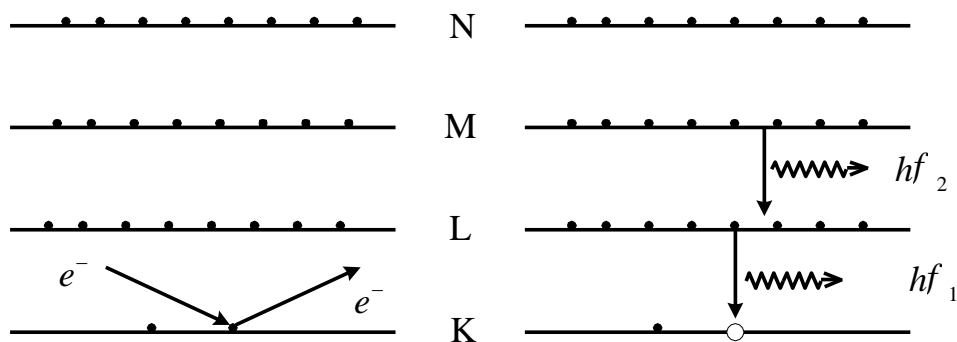
Az elektron teljes lefékeződése esetén:

$$Ue = \frac{1}{2}mv_1^2 = hf_{\max}.$$

Ilyenkor sugárzódik ki a maximális energiájú, azaz maximális frekvenciájú foton. A folytonos spektrumnak tehát van egy nagyfrekvenciás határa. Számoljuk ki ezt pl.  $U=10000V$ -ra:

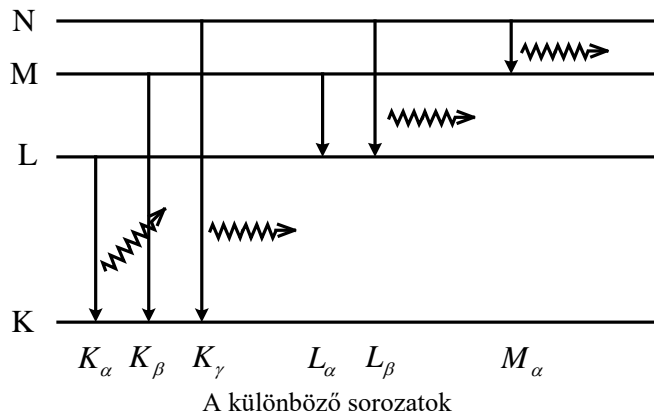
$$f_{\max} = \frac{10000J/C \cdot 1,62 \cdot 10^{-19}C}{6,625 \cdot 10^{-34}Js} = 2,445 \cdot 10^{18} Hz$$

Karakterisztikus sugárzás akkor jön létre, amikor a felgyorsított elektron ütközési folyamat révén egy másik elektront szabadít ki az atom egyik belső héjáról. Ilyenkor ott egy betöltetlen hely keletkezik. Ez azonban (egy vagy több) elektronugrást idéz elő az atomban.



A karakterisztikus sugárzás magyarázata a diszkrét energiákkal

Az egyes héjak betöltődésekor felszabaduló energiától az atom különböző energiájú röntgen fotonok emissziójával szabadul meg. Mivel az atomokban a lehetséges energiaértékek diszkrét, (csak bizonyos energiák megengedettek), a létrejövő sugárzás is csak meghatározott frekvenciájú fotonokból áll, vagyis vonalas szerkezetű lesz. A vonalak sorozatokba rendezhetőek. A K sorozathoz tartozó vonalak pl. akkor jönnek létre, ha valamelyik magasabb energiájú (L, M, N) héjról a K héjra ugrik az elektron. Ezen belül  $K_\alpha$  a legkisebb energiájú, amikor a szomszédos L héjról ugrik a K héjra az elektron,  $K_\beta$  a második legkisebb energiájú, stb.



Moseley 1913-ban megállapította, hogy a vonalas emissziós színekép jellemző az illető elemre, megmérve a frekvenciákat az anyagban lévő atomok rendszáma kiszámolható. Ezért nevezik karakterisztikusnak a sugárzást. Közelítőleg érvényes, hogy

$$f_{n,m} = R \cdot (z - \sigma)^2 \cdot \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

itt  $R$  a korábban említett Rydberg állandó, a  $\sigma$  pedig pl. attól függ, mely elektronhéjakról van szó. A törvény a  $K_\alpha$  vonalra viszonylag pontos, ami azért is jó, mert ez a vonal a legerősebb. Erre a vonalra  $m=1$ ,  $n=2$ ,  $\sigma=1$ , ezeket behelyettesítve kapjuk, hogy

$$f_{2,1} = \frac{3}{4} R (z - 1)^2.$$

Ennek a törvénynek egyik fontos gyakorlati alkalmazása az ún. röntgen fluoreszcencia analízis (XRF, X-Ray Fluorescence). Ez egy gyors, pontos, és roncsolástól mentes atomfizikai anyagvizsgálati módszer. A vizsgálat során az emittált frekvenciákat mérik, és ez alapján az elemek azonosíthatók. Intenzitásméréssel a tömeghányadra is lehet következtetni.

Az eddigiekből világos, hogy a karakterisztikus röntgen-sugárzás keletkezésének mechanizmusa annyiban hasonló a korábban tárgyalt látható, ultraibolya és infravörös esetekhez, hogy akkor bocsájtódik ki egy foton, ha egy magasabb energiaszintről egy alacsonyabbra kerül egy elektron és az energiák hozzávetőleg  $1/n^2$ -tel arányosak. A különbség a gerjesztés módján kívül az, hogy a látható körüli fotonokat kisebb rendszámú atomok bocsájtják ki, vagy a nagyobb rendszámú atomok külső, esetleg alapállapotban betöltetlen héjai vesznek részt bennük, míg ugyanezen atomok belső héjai közötti átmenet nagyobb energiájú fotonokat eredményez. (Pl.  $\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \approx 0,14$

míg  $\frac{1}{8^2} - \frac{1}{9^2} \approx 0,003$ , azaz két szomszédos külső gerjesztett állapot közötti energiakülönbség sokkal kisebb. Megjegyezzük, hogy ez egy igen leegyszerűsített leírás.)

A röntgensugárzás előállítása izzókatódos röntgensóvel történik. A gyorsító feszültség 10000 – 100000 V. Az elektronok becsapódása során az energia nagy része az anód belső energiájává alakul, és csak egy igen kis része (pl. 0,1%-a) távozik sugárzás formájában. Nagy gyorsító feszültség esetén kemény (nagy áthatolóképességű) röntgensugárzás keletkezik, ezt a műszaki életben például repedésvizsgálatra használják. Kis gyorsító feszültség esetén lágy röntgensugárzást kapunk, ennek alkalmazása az orvostudományban közismert. Emellett a röntgent alkalmazzák még kristályok szerkezetének - a kristályt alkotó atomok elrendeződése periodikus rendjének – vizsgálatára is.

## A mikrorészecskék kettős természete, de Broglie-hipotézis

Az elektromágneses sugárzásnál számos esetben jelentkezett a kísérletek értelmezésénél a részecske-hullám kettősség, vagyis hogy a fény hullámként és részecskék áramaként is viselkedhet. **De Broglie** 1924-ben vetette fel azt, hogy **a közönséges anyagi részecskéknek is ilyen kettős természetet kellene tulajdonítani**, vagyis pl. az elektron, proton, stb. hullámként is felfoghatók. Feltételezte, hogy a fotonokra levezetett lendület ( $I$ ) hullámhossz ( $\lambda$ ) kapcsolat általános érvényű, azaz a részecskékhez rendelhető hullám hullámhossza:

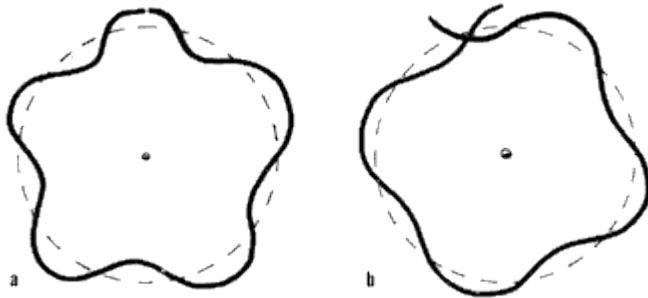
$$\boxed{\lambda = \frac{h}{I}} \text{ vagy } \lambda = \frac{h}{p}$$

ahol  $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  a Planck állandó. A képlet tehát minden részecskére érvényes, függetlenül attól, hogy van-e nyugalmi tömege (pl. elektron), vagy nincs (foton).

A képlet első alkalmazásaként tekintsük a hidrogén atomot, amely egy proton körül keringő elektron. Stacionáris esetben az elektron egy állóhullámnak felel meg, tehát a pálya hossza (a kör kerülete) egész számú többszöröse a hullámhossznak:

$$n\lambda = 2\pi r.$$

Ezt láthatjuk a bal oldali *a* ábrán. A jobb oldali *b* ábrán ez nem teljesül, a hullám nem önmagába záródik, ez nem lehet stacionárius állapot. Megjegyezzük, hogy az  $n\lambda = 2\pi r$  feltétel teljesül klasszikus rendszerekre is, pl. megütött acélkarikán kialakuló állóhullámokra.



A fenti  $\lambda = \frac{h}{I} = \frac{h}{mv}$  képletet behelyettesítve:  $\frac{nh}{mv} = 2\pi r$ , átrendezve kapjuk a Bohr-féle feltételt az impulzusmomentumra:  $L = mvr = n\hbar$ . Tehát a de Broglie-hipotézis megmagyarázta a Bohr-féle kvantumfeltételt.

A sors fintoraként kiderült, hogy a Bohr-féle feltétel nem igaz, így a de Broglie féle levezetése sem lehet helyes. Az alapötlet és a hullámhosszra vonatkozó  $\lambda = \frac{h}{p}$  képlet viszont igaz és ez egy nagy

– talán a legfontosabb – lépés volt a kvantummechanikához vezető úton.

**Példa:** Ha egy elektront  $U$  potenciálkülönbségen felgyorsítunk, akkor  $v$  sebességre tesz szert:

$$eU = \frac{1}{2} m v^2, \quad v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}, \quad \text{ennek megfelelően a lendülete } I = mv = m \sqrt{\frac{2eU}{m}} = \sqrt{2eUm}, \quad \text{a de}$$

Broglie hullámhossza pedig:

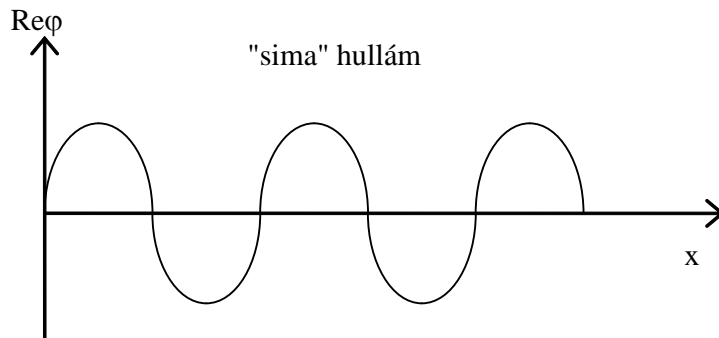
$$\lambda = \frac{h}{I} = \frac{h}{\sqrt{2eUm}}.$$

Az univerzális állandókat felhasználva, ha például az elektront gyorsító feszültség  $U = 150 \text{ V}$ , akkor a hozzá rendelhető hullámhossz  $\lambda = 10^{-10} \text{ m}$ .

A kísérletek szerint is az elektron mozgásokor kiterjedt hullámként viselkedik, egy tárgyba történő becsapódáskor pedig részecskeként, tehát **kettős természetet** mutat. Protonokkal és más mikrorészecskékkal is kimutattak **interferencia** jelenségeket. A hullám-részecske kettősség nemcsak az elektromágneses sugárzás esetén, hanem a mikrorészecskéknél is kimutatható.

## Hullámcsomag

Nem egyetlen síkhullámot rendeljünk a részecskéhez, hanem hullámcsomagot.

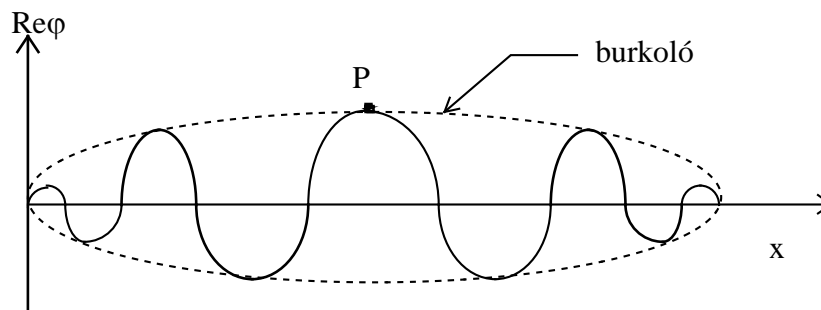


$$\varphi = Ae^{i(\omega t - kx)}$$

A hullámтанból ismert, hogy két igen közeli frekvenciájú hullám összetevése lebegést eredményez. Végtelen sok szinuszhullámból véges hosszúságú hullámvonulat (véges számú lebegés) is felépíthető.

$$\varphi = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{i(\omega(k)t - kx)} dk = C e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}$$

ahol a második tényező egy *átlagos frekvenciájú és hullámhosszú sima hullám*



sok sima hullám integrálása esetén ilyen görbealakot kapunk

$$C = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{i[(\omega(k) - \omega_0)t - (k - k_0)x]} dk \Leftarrow \text{burkoló}$$

Vizsgáljuk meg a burkoló egy pontjának (P pont) sebességét!

P-re nézve:  $(\omega(k) - \omega_0)t - (k - k_0)x = \text{állandó}$

$$x = \frac{\omega_k - \omega_0}{k - k_0} t - \frac{\text{állandó}}{k - k_0} \quad v_p = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega(k) - \omega_0}{k - k_0} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\frac{dE}{\hbar}}{\frac{dP}{\hbar}} = \frac{dE}{dP} = v$$

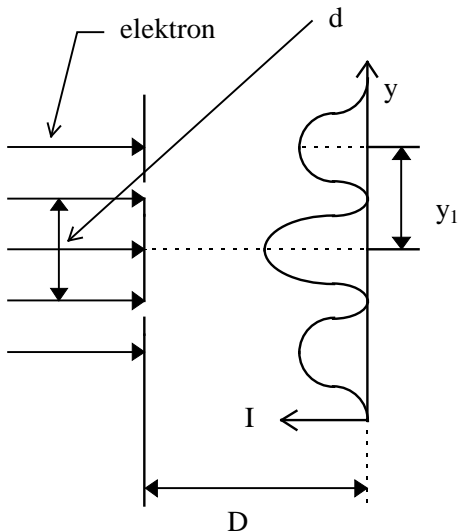
$$\text{mert:} \quad v = \frac{E}{\hbar} \quad \omega = 2\pi v = \frac{E}{\hbar} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} p = \frac{p}{\hbar}$$

$$\text{A klasszikus fizika szerint:} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\frac{dE}{dp} = \frac{2p}{2m} = v$$

## Kétréses kísérlet

(fényre: Young 1801, elektronra: Jöhnson 1961). Kísérleti bizonyíték az elektron hullámtermészetére

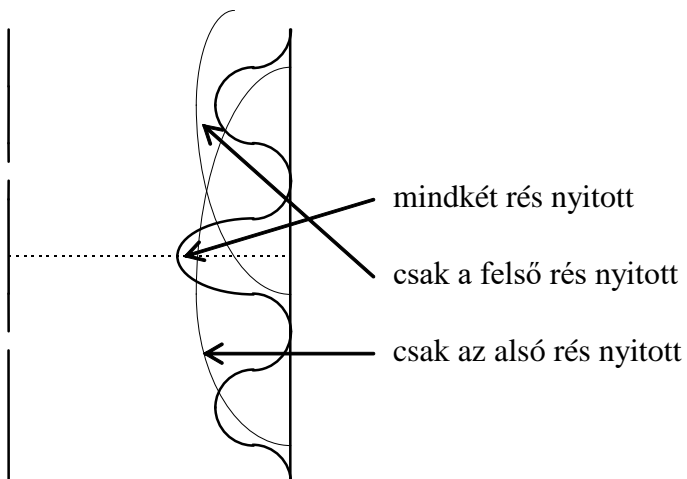


/ a rések távolsága  $1\mu\text{m}$  /

$$\Delta s = \frac{y_1 d}{D} = n\lambda \quad (\text{itt } n=1)$$

$$y_1 = \frac{D}{d} \lambda \quad y_1, D, d \text{ ismeretében } \lambda \text{ számítható.}$$

A kísérlet kis energiás elektronokkal végezhető. Az eredmény teljesen hasonló.

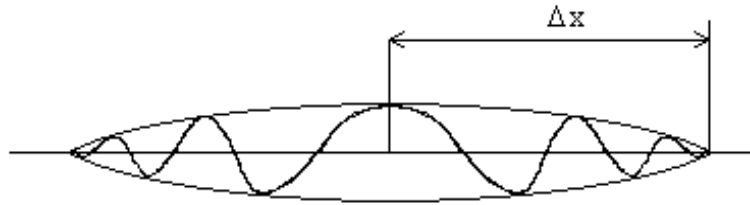


Az intenzitás eloszlása alapvetően különbözik, ha egyszerre csak egy-egy rés van nyitva, illetve ha egyszerre mindkettő. Ha mind a két rés nyitva van, akkor értelmetlen a kérdés, hogy az elektron melyik résen jött át. **Az elektronnak hullámtermészete van. Az elektron-hullám mind a két résen egyszerre halad át. Az elektronnak a két résen áthaladt „részei” interferálnak egymással. Detektáláskor az elektront mindig egészben detektáljuk. Ebben a kísérletben az**

**elektron hullám is** (a réseken való áthaladáskor) és **részecske is** (detektáláskor). **A foton és az elektron ebben a kísérletben teljesen hasonlóan viselkedik!**

## A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

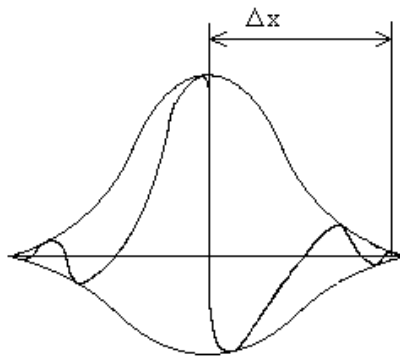
A hullámcsomagtól fogunk eljutni ideig.



$\Delta x$  : a részecske helyzetének bizonytalansága.

$\Delta$  precízebb jelentése: a kérdéses fizikai mennyiség SZÓRÁSA, azaz

$\Delta x = \sqrt{(x - \bar{x})^2}$  , a középértéktől való eltérések négyzete átlagának a gyöke.



$\Delta x_1 > \Delta x_2$  / ez a 2. részecske jobban lokalizált, mint az előző lapon lévő 1. részecske /

$\Delta k_1$  kicsi hullámszám-tartományból felépíthető

$\Delta k_2$  nagy hullámszám-tartomány szükséges a felépítéshez

$\Delta k_1 < \Delta k_2$

**$\Delta k_1 \cdot \Delta x_1 \cong \Delta k_2 \cdot \Delta x_2 \cong 1 \rightarrow$  Fourier analízissel a hullámtanból nyerhető összefüggés**

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 1$$

Ha felhasználjuk a foton lendületére levezetett összefüggést:  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  , azt kapjuk, hogy

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

Jól lokalizált részecske  $\rightarrow \Delta x$  kicsi  $\rightarrow \Delta k$  nagy  $\rightarrow \Delta p$  nagy

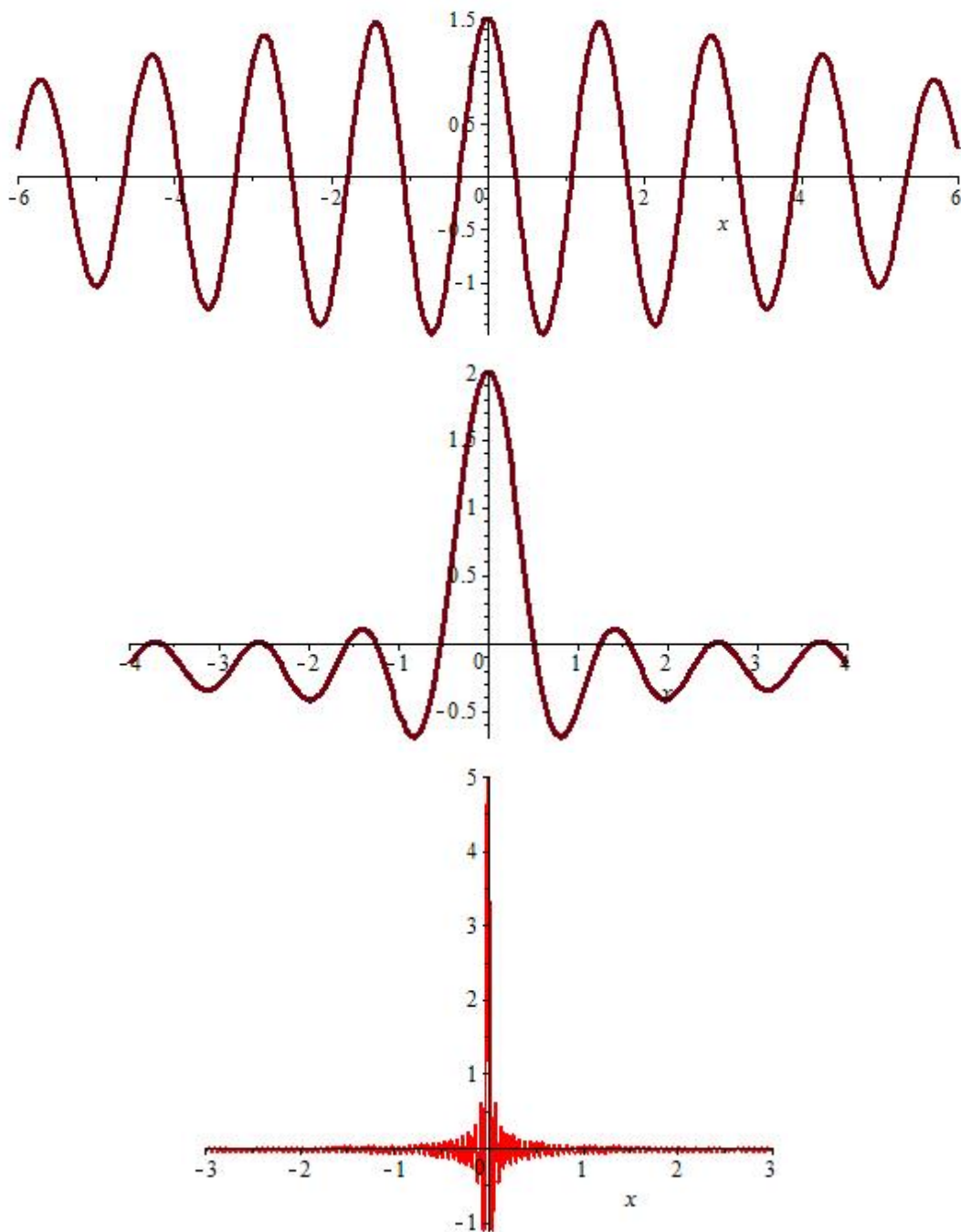
Jól lokalizált részecske:  $\Delta x \approx 0 \Rightarrow \Delta p \rightarrow \infty$

Nem lokalizált részecske:

$$k = k_0 \Rightarrow \Delta k = 0 \Rightarrow \Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x \rightarrow \infty$$



Közbülső eset, mindkét szórásvéges (gyakorlatban a részecskék ilyenek):  $\Delta x \Delta p_x \approx \hbar / 2$



Az egzakt levezetés eredménye:

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta E \Delta t &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \right\} \underline{\text{Heisenberg féle határozatlansági összefüggések}}$$

$$\left. \begin{array}{l} (x, p_x) \\ (y, p_y) \\ (z, p_z) \\ (E, -t) \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{egymáshoz kanonikusa konjugált változók:} \\ \text{egyszerre nem mérhetők tetszőleges pontossággal} \end{array}$$

A határozatlansági reláció igen szépen mutatja, hogy a makrofizikai fogalmak a mikrovilág leírására csak korlátozottan alkalmasak. Egy fizikai mennyiség mérési pontosságának nem lesz elvi határa, ha a kísérleti körülményeket meg tudjuk úgy választani, hogy a mért mennyiség konjugált párja a mérés során határozatlan marad. Ekkor viszont ez utóbbi mennyiség mérésekor nem azért lesz nagy a szórás, mert nem jók a műszereink (az egy gyakorlati probléma lenne, amin elvileg lehetne javítani), hanem mert a mennyiségnek nem létezik határozott értéke.

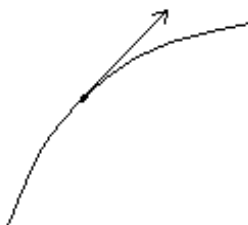
### Visszatérés a kétréses kísérlethez:

- egyik rés nyitva:  $\Delta x \approx 0 \rightarrow \Delta p_x \rightarrow \infty$  (azaz a szórási képből nem határozható meg a hullámhossz)
- mindkét rés nyitva:  $\Delta x$  nagy  $\rightarrow \Delta p_x$  kicsi (azaz a szórási képből meghatározható a hullámhossz)

### A határozatlansági relációk néhány következménye:

#### 1. Trajektóriák kérdése:

Klasszikus fizikában:



Egyszerre ismert  $r$  és  $v$  /ezáltal  $p$ / tehát van trajektória.

A) mákszem

$$m = 10^{-6} \text{ kg}$$

$\Delta x \approx 10^{-6} \text{ m}$  - helyét  $\mu\text{m}$  pontossággal tudjuk meghatározni

$$\Delta x \cdot m \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2} \approx 10^{-34}, \text{ átrendezve:}$$

$$\Delta v_x \approx \frac{10^{-34}}{10^{-6} \cdot 10^{-6}} = 10^{-22} \rightarrow \text{a mákszem sebességét } 10^{-22} \frac{\text{m}}{\text{s}} \text{ pontossággal tudjuk meghatározni}$$

Azonban ez nem igazi megszorítás, mert nincs olyan műszer, amivel ilyen pontosan lehetne sebességet mérni. Tehát a mákszemnek van trajektóriája.

B) Elektron

$$\Delta x \approx 10^{-10} \text{ m} \text{ és } m \approx 10^{-30} \text{ kg}, \text{ ezért } \Delta v_x \approx \frac{10^{-34}}{10^{-10} \cdot 10^{-30}} = 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

A H atomban az elektron sebessége ebbe a nagyságrendbe esik a klasszikus fizika szerint.

Az atomban az elektronnak nincs trajektóriája. Az atomi elektronra a bizonytalanság olyan mértékű, hogy nem mondhatjuk, hogy pl. az elektron az éppen az atommagtól  $x$  irányban van, sebessége pedig  $y$  irányba mutat (ez esetben impulzusmomentuma nem lehetne nulla), hanem úgy fogjuk fel, hogy az elektron felhőként körülveszi az atommagot, pl. gömb alakban.

### 3. Zérusponti energia:

Határozatlansági képlet:

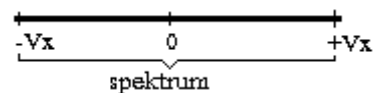
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \cdot m \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x}$$

Kérdés, hogy a kinetikus energiának minél kell nagyobbnak lennie.

Megjegyzés: a különböző részecskéknek különböző sebességük van, tehát van spektruma.



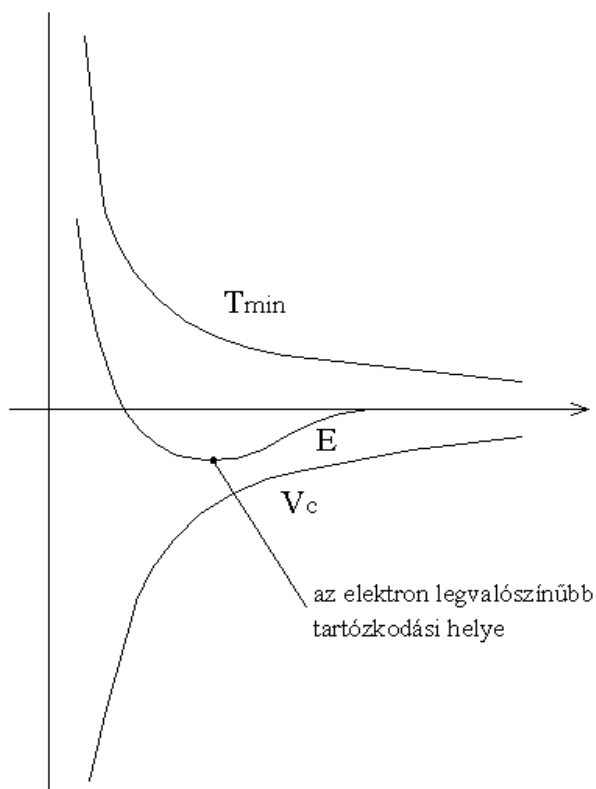
Mi lehet az  $x$  koordináták szórása ?

$$\Delta v_x \sim v_x$$

A szórás nagyságrendileg többnyire egyezik a középpértéktől való maximális eltéréssel, de ettől kisebb.

A kinetikus energia 1 dimenzióban:  $T_{\text{kin.}} = \frac{1}{2} m v_x^2 = \frac{1}{2} m \Delta v_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$

#### 4.) Hidrogén atom:



$$V_c = -k \frac{e^2}{r} \text{ Coulomb-energia}$$

$$T_{\min} = \frac{\hbar^2}{8mr^2}$$

„kvantumos nyüzsgés” energiája: ennél kisebb energiával nem rendelkezhet a csapdában a részecske

$$E = V_c + T_{\min}$$

5.)

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés minden kanonikusan}$$

konjugált változó párra fennáll.

$E$  és  $-t$  is kanonikus konjugált. Jelentése : a teljes energia ( $E$ ) rövid idejű méréssel nem határozható meg tetszőleges pontossággal.

Példa: gerjesztett állapot élettartama.

$E_2$		2. gerjesztett állapot	$\Delta t_2 < \Delta t_1 \Rightarrow \Delta E_2 > \Delta E_1 \Rightarrow \Delta v_2 > \Delta v_1$
$E_1$		1. gerjesztett állapot	élettartam: $\Delta t_1 \rightarrow \Delta E_1 \geq \frac{\hbar}{2\Delta t_1}$
$E_0$		alapállapot	energiája pontosan meghatározható

A gerjesztett állapotokon rövid ideig tartózkodik az  $e^-$ , utána visszamegy az alapállapotra.

A gerjesztett állapot energiája nem lehet pontosan meghatározott,

Az alapállapot energiája pontosan meghatározott.

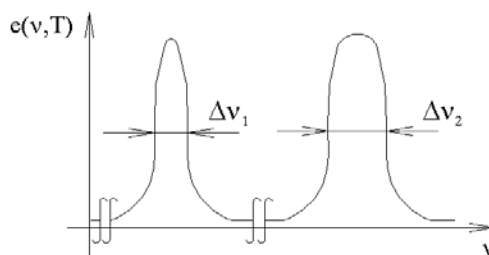
Következmény a spektrumokra:

$$E = h\nu$$

$$\Delta\nu_1 = \frac{\Delta E_1}{h} \geq \frac{\hbar}{h2\Delta t_1} = \frac{1}{4\pi\Delta t_1}$$

$$\text{pl.: } \Delta t_1 \approx 10^{-8} \text{ s}$$

$$\Delta\nu_1 \approx 10^7 \text{ Hz}$$



Szélesebb spektrumvonal rövidebb átlagos életidejű gerjesztett állapothoz tartozik.

## A kvantummechanika alapjai

### A kvantummechanika alapelvei (alapaxiómái)

**I. A kvantum mechanikai rendszerek állapotát  $\Psi(\vec{r}, t)$  komplex értékű reguláris függvény írja le. Ennek a függvénynek a neve **hullámfüggvény**, vagy **állapotfüggvény**. Az állapotfüggvény tartalmazza a rendszerből nyerhető összes információt.**

*Reguláris függvény* tulajdonságai: folytonos, korlátos, négyzetesen integrálható.

A reguláris függvény közé nem tartozik a  $\Psi \equiv 0$  függvény.

*Négyzetesen integrálható:*

$$\int_{\text{Teljes térre}} |\Psi|^2 dV < C \quad |\Psi|^2 = \Psi^* \cdot \Psi$$

(A \* a komplex konjugáltat jelenti)

A hullám függvény közvetlen fizikai jelentéssel nem bír, de abszolút értékének négyzete a részecske tartózkodási valószínűség sűrűség függvénye lehetne.

$V_1$  térfogatban való tartózkodás valószínűsége:

$$P(V_1) = \int_{V_1} |\Psi|^2 dV = \int_{V_1} \Psi^* \cdot \Psi dV$$

*Megjegyzés:* Schrödinger úgy gondolta, az elektron egy elkent, felhőhöz hasonlítható dolog, aminek tényleges sűrűsége a  $|\Psi|^2$  függvény. Azonban, a kísérletek azt mutatják, hogy az elektront inkább úgy kell elképzelni, mint egy pontszerű részecskét, ami véletlenszerűen "ugrál ide-oda", sok helyen tartózkodik egyszerre bizonyos valószínűségekkel. Ha egy részecskének az elhelyezkedését vizsgáljuk a teljes térre nézve, akkor  $P(\text{teljes térre})=1$ .

$$\int_{\text{Teljes térre}} |\Psi|^2 dV = 1$$

$\Rightarrow$  a hullám függvény egyre normált

$$\int_{\text{Teljes térre}} |\Psi|^2 dV = \|\Psi\|^2 = 1 \quad (\text{norma négyzet})$$

*Skaláris szorzás értelmezése:*

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int_{\text{teljes térre}} \Psi_1^* \cdot \Psi_2 dV$$

(eredménye egy konkrét szám, amely persze függhet az időtől)

*Tulajdonságai:*

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \Psi_2)^* &= (\Psi_2, \Psi_1) \\ (\Psi_1 + \Psi_2, \Psi_3) &= (\Psi_1, \Psi_3) + (\Psi_2, \Psi_3) \\ (C \cdot \Psi_1, \Psi_2) &= C^* \cdot (\Psi_1, \Psi_2) \\ (\Psi_1, C \cdot \Psi_2) &= C \cdot (\Psi_1, \Psi_2) \\ \int |\Psi|^2 dV &= 1 \Leftrightarrow (\Psi_1, \Psi_1) = 1 \end{aligned}$$

*t.t.*

**II. Szuperpozíció elve:** Ha a  $\psi_1$  és  $\psi_2$  a rendszer lehetséges állapotait írják le, akkor a

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$$

lineáris kombináció is lehetséges állapot, ahol  $c_i$  tetszőleges komplex számok.

Ezt az elvet az interferencia jelensége követelte meg és a Schrödinger-egyenlet linearitásában nyilvánul meg, lásd később. A fenti képlettel kapott  $\Psi$  állapotot aztán újabb és újabb  $\Psi_3, \Psi_4, \dots$  állapotokkal kombinálva is lehetséges állapotot kapunk, tehát nem csak kettő, hanem tetszőleges számú állapot szuperpozíciója is lehetséges állapot. A szuperpozíció elvében a mikrorészecskék hullám-tulajdonsága nyilvánul meg. A kétréses kísérletben pl. nyaláb különböző résen áthaladt „részei” egymással szuperponálódnak és interferencia-kép jön létre.

Fontos, hogy mindez nem azt jelenti, hogy a valószínűségi sűrűségek (tehát a  $|\Psi|^2$ -k) összeadódnának, hiszen akkor nem jöhetne létre kioltás.

**III. A fizikai mennyiségek önadjungált (hermitikus) operátorokkal írhatók le.**

*Operátorok jelölése:*  $\hat{O}$  (Pl.:  $\hat{p}, \hat{L}, \hat{E}$ )

Az operátorok függvényhez függvényt rendelnek (hasonlóan ahhoz, amikor a vektorokat mátrixszal szorozva másik vektort kapunk: az is egy operátor).

$$\text{pl.: } x \text{ szerinti deriválás: } \hat{O} = \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{O}\Psi_1 = \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} = \Psi_2$$

*Lineáris operátorok:*

$$\hat{L}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) = C_1 \hat{L}(\Psi_1) + C_2 \hat{L}(\Psi_2)$$

A fizikai mennyiségeket mindig lineáris operátorok írják le. (Lineáris operátor pl. a deriválás, nem lineáris pl. a négyzetre emelés.) A linearitás a szuperpozíció elve miatt szükséges.

*Hermitikusság:* skalárszorzásnál egy hermitikus/önadjungált operátort az első tagra, vagy a második tagra alkalmazva, a szorzás eredménye nem változik. Képlettel:

$$(\hat{H}\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1, \hat{H}\Psi_2)$$

Műveleti szabályok operátorokkal:

$$\begin{aligned} (\hat{O}_1 + \hat{O}_2)\Psi_1 &= \hat{O}_1\Psi_1 + \hat{O}_2\Psi_1 \\ (\hat{O}_1\hat{O}_2)\Psi_2 &= \hat{O}_1(\hat{O}_2\Psi_2) \end{aligned}$$



(Szorzásban az operátorok általában nem cserélhetők fel, a művelet nem kommutatív.)

**Kommutátor:** Azt jellemzi, hogy mennyire nem felcserélhető a két operátor:

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = \hat{O}_1 \hat{O}_2 - \hat{O}_2 \hat{O}_1$$

Felcserélhető operátorok kommutátora zérus.

#### IV. A fizikai mennyiségekhez rendelt operátor sajátértékei megegyeznek a fizikai mennyiségek mérésekor lehetséges értékekkel.

Ha egy operátor hat egy függvényre, annak általában megváltozik az alakja, mint ahogyan egy vektornak is megváltozik az iránya, ha egy mátrixszal megszorozzuk. Előfordul azonban, hogy a függvény csak egy számmal szorozódik meg az operátor hatására (ez a vektor nyújtásának felel meg). Ez esetben a vektort az adott operátor sajátvektorának, a számot a hozzá tartozó sajátértéknek nevezzük.

*Sajátérték egyenlet:* ( $k$  a sajátérték)  $\hat{O}\varphi = k\varphi$

$$\text{Pl: } \hat{O} = \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{O}e^{2x} = \frac{\partial e^{2x}}{\partial x} = 2e^{2x} \rightarrow k = 2$$

Egy operátor sajátértéke mindig függ attól, hogy milyen függvényre hat. Egy gyakorlati példa: ha az energia operátort alkalmazzuk a Hidrogénre, nem ugyan azt az eredményt mérjük, mintha pl. Uránra alkalmaznánk. Tehát az energia operátornak más a sajátértéke itt, mint ott.

Tétel: A hermitikus operátorok sajátértékei valósak.

Biz:

$$(\hat{H}\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1, \hat{H}\Psi_2)$$

$$\hat{H}\varphi = h\varphi$$

$$(h\varphi, \varphi) = (\varphi, h\varphi)$$

$$h^*(\varphi, \varphi) = h(\varphi, \varphi)$$

$$h^* = h$$

Tehát  $h$  csak valós lehet, mert egy szám és a konjugáltja csak akkor egyezik meg, ha nincs imaginárius része. Így teljesül az a gyakorlati követelmény, hogy a mérőműszerek mindig valós értékeket mérjenek.

#### V. Egy fizikai mennyiség méréssel kapható átlagértékét $a(z)$ :

$$\bar{O} = (\psi, \hat{O}\psi) \quad \text{skaláris szorzat adja. (Ez is axiómaként van kimondva)}$$

Figyelembe véve a skaláris szorzat jelentését:  $\bar{O} = \int_{\text{teljes térré}} \psi^* \hat{O}\psi dV$

pl.:

$$\bar{x} = \int_{\text{teljes térré}} \psi^* x \psi dV = \int_{\text{teljes térré}} x \psi^* \psi dV$$

analógia: tömegközéppont  $x$  koordinátája(klasszikus mechanika):

$$\bar{x} = \int x \rho dV$$

$$\psi^* \psi \quad \text{tartózkodási valószínűség sűrűség}$$

$\rho$  tényleges sűrűség

ez fontos különbség a kvantummechanika és a klasszikus mechanika között.

Egy fizikai mennyiség értékének határozatlansága azzal jellemezhető, hogy mennyivel tér el várhatóan az átlagértéktől a mért érték. Ezt a valószínűség-számításban szórásnak hívják:

$$\Delta O = \sqrt{(\hat{O} - \bar{O})^2}$$

$\Delta$  : szórás

### Állítás:

Ha két operátornak szimultán sajátfüggvényekből álló bázisa van, akkor a két operátor felcserélhető. Ez az állítás visszafelé is igaz. Mi a szimultán saját függvény?

Legyen két operátor:  $\hat{O}_1$  és  $\hat{O}_2$

$\phi$  akkor szimultán sajátfüggvénye, ha:

$$\hat{O}_1 \phi = c_1 \phi$$

$$\hat{O}_2 \phi = c_2 \phi$$

Be kellene látnunk, hogy ebből következik a felcserélhetőség:  $\hat{O}_1 \hat{O}_2 = \hat{O}_2 \hat{O}_1$

Ehhez szorozzuk meg jobbról a felső egyenletet  $\hat{O}_2$ -vel az alsót pedig  $\hat{O}_1$ -el.

$$\left. \begin{aligned} \hat{O}_2 \hat{O}_1 \phi &= \hat{O}_2 c_1 \phi = c_1 \hat{O}_2 \phi = c_1 c_2 \phi \\ \hat{O}_1 \hat{O}_2 \phi &= \hat{O}_1 c_2 \phi = c_2 \hat{O}_1 \phi = c_2 c_1 \phi \end{aligned} \right\} =$$

Ezzel beláttuk, hogy a két operátor egymással felcserélhető az adott sajátfüggvényre nézve, ha a függvény szimultán sajátfüggvénye. Ha létezik ilyenekből álló bázis, akkor minden függvény kikombinálható sajátfüggvényekből, tehát minden függvényre nézve igaz, hogy nem számít, milyen sorrendben alkalmazzuk a két operátort a függvényekre, ugyanazt kapjuk.

**Két fizikai mennyiségnek akkor létezik egyszerre pontos értéke (akkor mérhetők egyszerre), ha operátoruk felcserélhető, azaz a kommutátoruk nulla.**

Ha ugyanis olyan rendszeren mérjük meg a fizikai mennyiség értékét, amelyet a mennyiséghez tartozó operátor sajátfüggvény ír le, akkor mindenképp a sajátfüggvényhez tartozó sajátértéket kapjuk. Ha  $\psi$  két operátornak is sajátfüggvénye, akkor mindkettőre határozott értéket (a megfelelő sajátértéket) kapunk bizonytalanság nélkül (a műszer tökéletlenségéből adódó hibáktól most eltekintünk). Konkrét példát a szabad részecskénél mutatunk be.

Mindezekből az következik, hogy azon mennyiség-párookra, amelyekre határozatlansági reláció áll fent, a kommutátor nem tűnhet el.

## Az operátorok konkrét alakja és a Schrödinger-egyenlet

A legegyszerűbb tárgyalásban az impulzus x komponenséhez és az x hely-koordinátához a következő operátort rendeljük:

$$\boxed{\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}} \quad \text{és} \quad \boxed{\hat{x} = x \cdot} \quad (\text{ez úgy hat, hogy egy } f(x) \text{ függvényt megszorozza } x\text{-szel}).$$

hasonlóan:

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{és} \quad \hat{y} = y \cdot, \quad \hat{z} = z \cdot,$$

Rendeljünk most az energiához és az időhöz is operátort:

$$\hat{E} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{és} \quad \hat{t} = t \cdot$$

Korábban láttuk, hogy a Heisenberg-féle határozatlansági relációk az operátorok szintjén a kommutátorokban jelentkeznek. A fizikai mennyiségekhez tehát úgy rendeltük hozzá az operátorokat, hogy a Heisenberg-féle felcserélési relációk teljesüljenek. Ezek a relációk a következők: (minden kanonikusan konjugált változóra fennállnak)

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}, \quad [\hat{p}_y, \hat{y}] = \frac{\hbar}{i}, \quad [\hat{p}_z, \hat{z}] = \frac{\hbar}{i}, \quad [\hat{E}, -\hat{t}] = \frac{\hbar}{i}.$$

Bizonyítsuk be, hogy  $\hat{p}_x$  és  $\hat{x}$  megfelel a felcserélési törvénynek:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] \phi = \hat{p}_x \hat{x} \phi - \hat{x} \hat{p}_x \phi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \phi) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \phi + \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \phi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \phi$$

azaz teljesült a felcserélési törvény.

Megjegyzés: az egymáshoz nem kanonikusan konjugált hely- és impulzuskoordináta változók természetesen felcserélhetők. Pl.

$$[\hat{p}_x, \hat{y}] = 0 \cdot$$

$$[\hat{p}_y, \hat{x}] = 0 \cdot \quad \text{stb}$$

*Hogyan található meg a többi fizikai mennyiség operátora?*

Ugyanúgy, mint ahogy egyik fizikai mennyiség a másiból megkapható.

pl.: **kinetikus energia**

$$\text{klasszikusan:} \quad T = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{1}{2m} (\hat{p}_x \hat{p}_x + \hat{p}_y \hat{p}_y + \hat{p}_z \hat{p}_z) = \\ &= \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] = \end{aligned}$$

A  $\frac{\hbar}{i}$  mint konstans, kiemelhető a deriválás elé:

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\hbar}{i} \right)^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

$\Delta$  : Laplace operátor

$$\text{azaz} \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

A töltéshez, tömeghez nem rendelhetünk operátort, mert azok konstansok!

**Potenciális energia (csak konzervatív mezőben van értelme):**

Mivel a potenciális energia csak a helykoordinátáktól függ, és a helykoordináták operátora a "velük való szorzás" ezért a potenciális energia operátora is a "vele való szorzás".

$$\mathbf{V}=\mathbf{V}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) \Rightarrow \mathbf{V}=\mathbf{V}.$$

Konzervatív mezőben a teljes energia:  $E=T+V$

A **teljes energia** operátora (Hamilton operátor):  $\hat{H}$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z).$$

Viszont a korábban definiált  $\hat{E} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$  operátornak ugyanazt kell adnia, mint a most definiált Hamilton-operátornak:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = \hat{E}\psi(\vec{r}, t)$$

Behelyettesítve:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

**Ez a kvantummechanika dinamikai alapegyenlete, más néven időfüggő Schrödinger egyenlet.** Ez írja le a rendszer időbeli változását. Tulajdonképpen ezzel meg tudjuk mondani a későbbi állapotát a rendszernek, ha a korábbi ismerjük.

Megjegyzés: Az időfüggő Schrödinger egyenletből levezethető Newton 2. törvénye ( $a_x = F_x/m$ ). Általánosan is igaz, hogy a kvantummechanika alapegyenletéből, axiómáiból a klasszikus mechanika alapegyenletei, axiómái levezethetők. A kvantummechanika tehát a természet általánosabb törvényeit adja meg, amelyek a makrovilág leírására is alkalmasak (elvben). Az egyszerűsége miatt azonban sokszor célszerű a klasszikus mechanika nevű, megszokott közelítést alkalmazni.

## Stacionárius állapotok és az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet

Tegyük fel, hogy az időtől nem függő  $V$  potenciált tartalmazó

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

időfüggő Schrödinger-egyenletnek az alábbi alakban állítottuk elő a megoldást:

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

Ebben az az érdekes, hogy a jobb oldalon az egyik tényező csak a helytől, a másik csak az időtől függ. Ha ezt lederiváljuk  $t$  szerint, akkor önmagát kapjuk, szorozva az exponenciális függvény kitevőjében a  $t$  együtthatójával. Tehát ha behelyettesítjük az időfüggő Schrödinger-egyenlet jobb oldalán  $\psi$  helyére, akkor az egyenlet bal oldalán egyszerűsítés után csak  $E\varphi$  marad, tehát az új egyenletben nincs idő változó:

$$\boxed{\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})}$$

ennek neve **időfüggetlen Schrödinger-egyenlet** vagy energia-sajátértékegyenlet. Beírva a Hamilton-operátor kifejezését:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

Tehát a keresett konstans az energia-sajátérték. Ebből pedig az is következik, hogy az állapotfüggvény helytől függő része az **energia-sajátfüggvény**.

Tehát ha a hullámfüggvény a fenti szeparált alakban áll elő, akkor a rendszer energia-sajátállapotban tartózkodik.

Ez a hullámfüggvény az állapotegyenlet stacionárius megoldása. Mitől stacionárius?

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi^* \psi = \varphi^*(\vec{r}) e^{i\frac{E}{\hbar}t} \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \varphi^*(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = \rho(\vec{r})$$

$\rho$ : valószínűségi sűrűségfüggvény, csak  $\vec{r}$  - től függ.

Tehát a fizikai mennyiségek az időtől nem függnak, ezért stacionárius az állapot.

Ez ezt is jelenti, hogy a rendszer energia-sajátállapotban tartózkodik az idők végezetéig, tehát pl. az atomok gerjesztett állapota nem bomlik el fotont kibocsátva, hogy az energiaminimumot elérje. Fontos megjegyezni, hogy ez csak a „hagyományos” kvantummechanika szerint igaz. Ez a kvantummechanika azonban csak akkor alkalmazható, ha a részecskeszám állandó. A kvantummechanika nem alkalmas részecskék keletkezésének és eltűnésének leírására, ami képes erre, az a kvantum-elektrodinamika. A kvantum-elektrodinamika szerint például a gerjesztett állapot - bár stacionárius - előbb-utóbb egy foton kibocsátásával megszűnik. Tehát az általunk felírt állapotegyenlet hiányossága, hogy eltűnő és keletkező részecskére nem alkalmazható.

## A Schrödinger-egyenlet megoldása konkrét rendszerekre

Szabad részecske 1 dimenzióban:

A potenciál  $V=\text{const.}$ , ezt a  $V$  konstansat válasszuk 0-nak.

Ekkor stacionárius esetben igaz, hogy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = E\varphi(x)$$

ennek megoldásai a sin, cos és exp. függvények, pl.:

$$\boxed{\varphi(x) = Ae^{ikx}}$$

ahol a  $k$  tetszőleges.

Ez sajátfüggvénye  $p_x$ -nek. A megfelelő sajátérték egyenlet:

$$\hat{p}_x X(x) = p_x X(x),$$

ahol  $\hat{p}_x$  operátor,  $p_x$  sajátérték.

$$\text{azaz } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} Ae^{ikx} = p_x Ae^{ikx}$$

Elvégezve a deriválást:

$$\hbar k A e^{ikx} = p_x A e^{ikx}$$

ebből  $k = \frac{p}{\hbar}$ , vagyis  $k$  nem más, mint a korábban definiált hullámszám:  $\boxed{p = \hbar k}$ .

Ez hasonlóan elvégezhető az  $y$  és  $z$  koordinátára is, tehát három dimenzióban:

$$\varphi(\vec{r}) = K e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} = K e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

A szabad részecske stacionárius állapotban tehát a következő függvénnyel leírt állapotban tartózkodik:

$$\psi(\vec{r}, t) = K e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad \left( \text{mivel } \psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \right)$$

Ez pedig egy síkhullámot ír le.

### Megjegyzések:

1. Stacionárius állapotban a részecske mindig energia sajátállapotban tartózkodik, ez szabad részecskére egyúttal impulzus sajátállapot is. Tehát a részecske egyidejűleg rendelkezik meghatározott energiával és meghatározott impulzussal. Ez így van a klasszikus fizikában is.

Legyen pl. a részecske hullámfüggvénye  $\varphi_5(x) = e^{5ix}$ , ahol tehát  $k=5$  (a mértékegység pl. 1/m).

Ha erre haddatjuk a  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  operátort, akkor azt kapjuk, hogy  $p_x = 5\hbar$ , ez az impulzus-operátor

sajátértéke. Ha haddatjuk a mozgási energia  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$  operátorát, akkor azt kapjuk, hogy

$E = \frac{25\hbar^2}{2m}$ , ez az energia-sajátérték (ellenőrizzük le!). Ha viszont a részecske hullámfüggvénye a

$\varphi_{5,7}(x) = e^{5ix} + e^{7ix}$ , akkor 50% valószínűséggel  $p_x = 5\hbar$ , 50% valószínűséggel pedig  $p_x = 7\hbar$ -t kapnánk az impulzus mérésekor. Az impulzus várható értéke (átlagértéke)  $\bar{p}_x = 6\hbar$ , bár ezt az értéket sohasem kapjuk méréskor. Hasonló határozatlanság érvényesül az energiára is, vagyis  $\varphi_{5,7}$  nem energia-sajátállapot, tehát nem stacionárius állapot, azaz gyorsan megváltozik, átalakul az időfüggő Schrödinger-egyenletnek eleget téve.

2. Ebben az esetben viszont a szabad részecske helye teljesen határozatlan, mivel a síkhullámban tartózkodási valószínűség helytől független érték.

$$\rho = \psi^* \cdot \psi = K \cdot K = |K|^2 = \text{konstans}$$

Vagyis a síkhullámban a részecske egyáltalán nincs lokalizálva, bárhol ugyanolyan eséllyel tartózkodik. Az előző pontban felsorolt egyik  $\varphi$  függvény sem sajátfüggvénye a hely operátorának, mivel annak sajátfüggvényei csak egy pontban különböznek nullától. A szuperpozíció elve alapján azonban szabad részecskét leíró síkhullámokból is kikombinálhatunk olyan hullámcsomagot, amely már meghatározott térrészbe lokalizálható, ez viszont már nem lesz energia- és impulzus-sajátállapot, így nem is stacionárius.

3. Az energiára nem kaptunk feltételt, vagyis az energia ( $E$ ) értéke tetszőleges lehet. Tehát míg kötött állapotban a részecske diszkrét energiaértékekkel rendelkezik, addig szabad állapotban bármilyen, vagyis a szabad állapotú részecske energiaspektruma folytonos.



4. Gyakorlásként számoljuk ki ennek a síkhullámnak a hullámhosszát és a frekvenciáját!

A síkhullám – mint tudjuk - felírható a következő alakban is:

$$\psi(\vec{r}, t) = K e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}, \text{ ahol } \omega: \text{frekvencia, } \vec{k}: \text{hullámszámvektor}$$

$$\text{Tehát: } \omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow 2\pi f = \frac{2\pi E}{h} \Rightarrow f = \frac{E}{h}$$

Vagyis visszakaptuk a Planck-féle összefüggését.

$$k = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p}$$

Itt pedig visszakaptuk de Broglie hipotézist. Ez nem meglepő, hiszen az anyag hullámtermészetéből következnek ezek az egyenletek, de ahogy felírtuk ezeket, az még nem látszott rögtön. Most viszont láthatjuk, hogy ezek az egyenletek teljesen megfelelnek annak, amit de Broglie állított.

## Végtelen mély potenciálgödör

A következő potenciál a (0,a) intervallumra korlátozza a részecske mozgását:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha } x < 0 \\ 0, & \text{ha } 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{ha } x > a \end{cases}$$

ha  $x < 0$  vagy  $x > a$  akkor  $\varphi \equiv 0$ , hisz a részecske a (0,a) intervallumra van korlátozva. (Látni fogjuk, hogy ezt csak végtelenül nagy potenciállal lehet megtenni.)

A folytonosság miatt:  $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$

A gödör belsejében (a  $0 \leq x \leq a$  szakaszon) a Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = E \varphi$$

átrendezve ugyanazt az egyenletet kapjuk, mint szabad részecskére:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \varphi \quad (S1)$$

ahol  $2mE = p$ . Ezt felhasználva:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \varphi$$

A határfeltételekhez viszont most teljesen mások, mint a szabad részecskénél. A gödör szélén a függvénynek nullának kell lennie, a komplex exponenciális függvény viszont sehol sem nulla.

$$\text{Megoldás: } \varphi = A \cdot \sin\left(\frac{p}{\hbar} x\right),$$

mert ez az alak illeszkedik a határfeltételekhez. Fizikailag ez **állóhullámot** jelent.

$\varphi(0)=0$  automatikusan teljesül, de szükséges  $\varphi(a)=0$  fennállása is:

$$0 = A \sin \frac{p}{\hbar} a \Leftrightarrow \frac{p}{\hbar} a = n\pi, \text{ vagyis a hullámfüggvény: } \varphi_n = A \sin \frac{n\pi}{a} x$$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n\pi$$

$$2mEa^2 = n^2 \pi^2 \hbar^2 = n^2 \pi^2 \frac{h^2}{4\pi^2}$$

Tehát **az energia nem folytonos, hanem diszkrét** értékeket vesz fel, konkrétan az  $n$

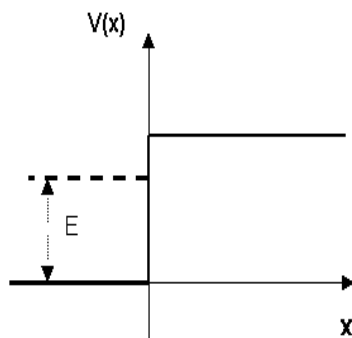
**kvantumszám** négyzetével arányos:  $E = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$

### Véges potenciálgödör:

A részecske véges valószínűséggel tartózkodik a klasszikus mozgástartományon kívül.  $\Rightarrow$  negatív kinetikus energia. Gerjesztett állapotban a klasszikusan megengedett mozgástartomány egyes pontjairól viszont kizorul a részecske.

### Potenciállépcső egy dimenzióban

Legyen a potenciállépcső a következő:



$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$

Általános megoldás az (1) tartományra hasonló, mint szabad részecskére:

$$\varphi_1(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} + B e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x}, \quad p_x > 0$$

Általános megoldás a (2) tartományra, a lépcső belsejére:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + V_0 \varphi_2(x) = E \varphi_2(x) \quad (\text{időtől független egyenlet})$$

Átrendezve:

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \varphi_2(x)$$

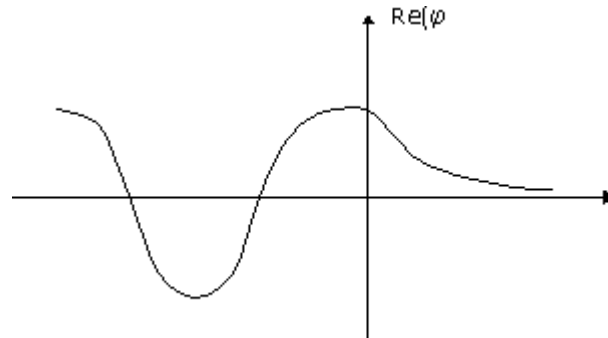
Tárgyaljuk azt az esetet, ha  $V_0 > E$ :

A fő különbség a két, látszatra nagyon hasonló Schrödinger-egyenlet között (a fenti S1 és a mostani között), hogy ez utóbbi esetben az energia kisebb, mint a potenciál értéke, vagyis a jobb oldalon az együttható **pozitív**. Ez pedig minőségileg más viselkedést eredményez. Ekkor a  $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}$  mennyiség **valós**, hiszen  $V_0 > E$ .

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} = \left(\frac{q}{\hbar}\right)^2 \varphi_2(x) \quad \varphi_2(x) = C e^{-\frac{q}{\hbar} x} + D e^{\frac{q}{\hbar} x}$$

de  $D=0$  kell, hogy legyen, mivel  $e^{\frac{q}{\hbar}x} \rightarrow \infty$ , ha  $x \rightarrow \infty$ , ami ellentmond a normálhatóságnak. Ez azt jelenti, hogy a pozitív kitevő nem fizikai megoldás.

Végeredményben a megoldás:  $\varphi_2(x) = Ce^{-\frac{q}{\hbar}x}$



tartózkodási valószínűsége sűrűség a 2. tartományban

$$\rho(x) = \phi^*(x) \cdot \phi(x) = C^* \cdot C \cdot e^{\frac{-2q}{\hbar}x} = |C|^2 \cdot e^{\frac{-\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar}x}$$

a részecske valamelyest **behatol** a 2. tartományba, de a valószínűség-sűrűség **exponenciálisan lecsengő**. Ez azt jelenti, hogy a részecske előbb-utóbb visszafordul; a visszaverődés 100%-os.

**Behatolási mélység:**  $x_b$  az a távolság amelyen a tartózkodási valószínűség-sűrűség az  $e$ -ad részére csökken

$$\rho(x_b) = \frac{\rho(0)}{e}$$

$$|C|^2 e^{\frac{-\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar}x_b} = e^{-1}|C|^2; \text{ a kitevőknek meg kell egyeznie.}$$

$$\frac{\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot x_b = 1 \Rightarrow x_b = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(V_0-E)}}$$

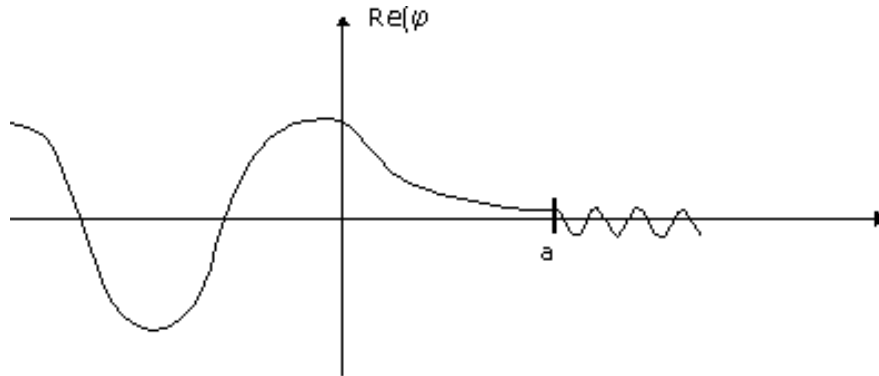
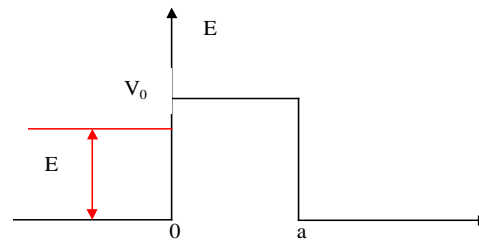
A részecske annál jobban be tud hatolni a klasszikus fizika szerint számára tiltott tartományba minél kisebb a tömege és minél kisebb a hiányzó energia.

## Alagúteffektus

## Véges vastagságú gát

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x \leq 0 \text{ vagy } x \geq a \\ V_0 & \text{ha } 0 < x < a \end{cases}$$

Emellett:  $E < V_0$



G: annak a valószínűsége hogy a részecske átjuthat a gáton. Jó közelítéssel az alábbi formula adja meg:

$$G \approx \frac{\rho(a)}{\rho(0)} = e^{-\frac{\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar}a}$$

Ez a kvantummechanikai alagúteffektus. (A klasszikus mechanikában ez az effektus hiányzik.)

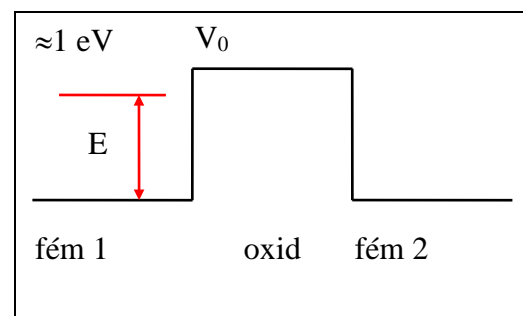
A részecske jó eséllyel átjut a gáton (G nagy), ha

- m kicsi
- $V_0 - E$  (azaz a hiányzó energia) kicsi, és
- a gát szélessége kicsi.

Az alagúteffektus a határozatlansági reláció megnyilvánulása. A gát túloldalán a részecske ugyanakkora energiával jelenik meg, mint a gát elérése előtt.

## Példák az alagúteffektusra

### 1. Vékony oxidréteg vezet.



$$x_b = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(V_0 - E)}} \approx \frac{10^{-34}}{\sqrt{10^{-29} \cdot 10^{-19}}} = 10^{-10} - \text{ez kb. egy oxidréteg vastagsága.}$$

Körülbelül egy réteg oxid csökkenti  $e$ -vel az elektronsűrűséget. Mivel a legtöbb vezető felülete a szabad levegőn oxidálódik, a mindennapokban ezt a jelenséget használjuk, pl. amikor bedugjuk a konnektorba a villásdugót.

A tranzisztoroknál a miniatürizálás miatt olyan vékony a vezérlő Gate elektródát a vezérelt csatornától elválasztó oxidréteg, hogy azon alagutazással átjuthatnak az elektronok, ami a vezérlő teljesítmény növekedését jelenti. Ez az egyik akadálya a további méretcsökkenésnek. Bizonyos memóriatípusok (EEPROM, Flash) esetében viszont ugyanez a jelenség hasznos, mivel az adat az elektromosan minden oldalról leszigetelt Gate elektródán töltés formájában tárolódik, aminek írása és olvasása alagutazással történik.

**2. Josephson-átmenet a szupravezetőknél:** Vékony szigetelő rétegen feszültség nélkül is folyhat áram.

## Az impulzusmomentum

### A pályaimpulzusmomentum

Az elektron atommag körüli mozgásához kapcsolódó perdület:

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$  a klasszikus fizikában.

$$L_z = xP_y - yP_x$$

$$L_x = yP_z - zP_y$$

$$L_y = zP_x - xP_z$$

A kvantummechanikában a fizikai mennyiségekhez operátort kell rendelni. Például:

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$L_z$  előállítás gömbi polár koordináta-rendszerben ezt az alakot ölti. A többi komponens bonyolultabb, nem vesszük. Az atomfizikában az origót az atommaghoz rögzítjük, az a viszonyítási pont.

### Mivel egyenlő a perdület nagysága?

Venni kell a koordináták négyzetösszegét:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad \text{azaz} \quad \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Az operátor négyzete azt jelenti, hogy kétszer kell alkalmazni.

### Állítás:

$L_x, L_y, L_z$  egymással nem felcserélhető, de  $\hat{L}^2$  bármelyikkel felcserélhető.

Pl:

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = ?$$

$$(\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y) * (\hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z) - (\hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z) * (\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y)$$

$$\hat{y}\hat{P}_z\hat{z}\hat{P}_x - \cancel{\hat{z}\hat{P}_y\hat{z}\hat{P}_x} - \cancel{\hat{y}\hat{P}_z\hat{x}\hat{P}_z} + \hat{z}\hat{P}_y\hat{x}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_x\hat{y}\hat{P}_z + \cancel{\hat{x}\hat{P}_z\hat{y}\hat{P}_z} + \cancel{\hat{z}\hat{P}_x\hat{z}\hat{P}_y} - \hat{x}\hat{P}_z\hat{z}\hat{P}_y$$

Csak a kanonikusan konjugált változók operátorai nem cserélhetők fel.

$$\hat{P}_z\hat{z} * (\hat{y}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_y) - \hat{z}\hat{P}_z * (\hat{P}_x\hat{y} - \hat{P}_y\hat{x})$$

$$(\hat{P}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{P}_z) * (\hat{y}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_y)$$

Mivel a szorzat első tagja egyenlő  $\frac{\hbar}{i}$ -vel, a második pedig  $-\hat{L}_z$  így a megoldás:

$$-\frac{\hbar}{i}\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_z$$

Ez az operátorok kommutátora.

### Következmény:

- $L_x$ ,  $L_y$  és  $L_z$  egyidejűleg nem határozhatók meg (mert nincs szimultán sajátfüggvényük, ezért nem lehet olyan állapot, amely mindhárom mennyiségre nézve sajátállapot).
- viszont  $L^2$  és valamelyik komponens ( pl.:  $L_z$  ) egyidejűleg meghatározható.

Szimultán sajátfüggvényekkel egyszerre két sajátérték-egyenletet is felírhatunk :

$$\begin{cases} \hat{L}^2\varphi = L^2\varphi \\ \hat{L}_z\varphi = L_z\varphi \end{cases} \quad \text{amelyek egyidejűleg megoldhatók.}$$

Megoldás nélkül a végeredmény :

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

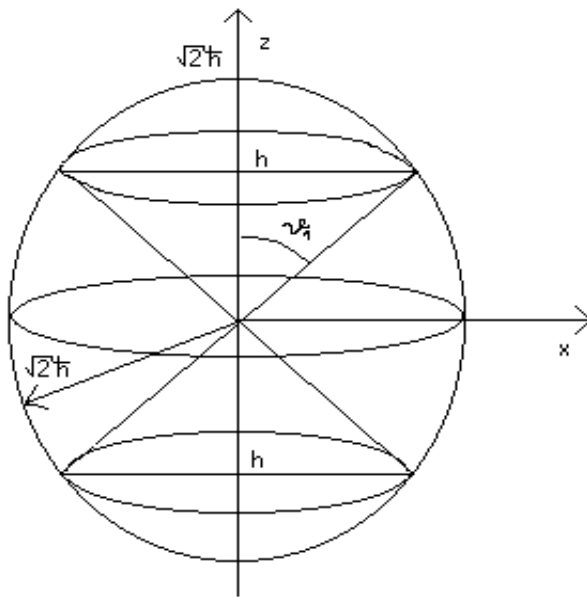
$$L_z = \hbar m \quad m = -l, -l+1, \dots, l \quad \text{szimultán sajátértékek}$$

$\varphi = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  szimultán sajátfüggvények ( gömbfüggvények ), ahol  $\vartheta$  azimut ,  
 $\varphi$  polárszög. A gömbfüggvények alakja a következő (nem kell megtanulni!)

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi},$$

ahol P az ún. asszociált Legendre polinom.

Pl.: a.) legyen  $l = 0$  ekkor  $L^2 = 0$  és  $L_z = 0$  egyáltalán nincs impulzus momentum.



b.) legyen  $l = 1$  ekkor

$$L^2 = \hbar^2 2$$

és  $L_z = -\hbar$  , ha  $m = -1$

$L_z = 0$  , ha  $m = 0$

$L_z = \hbar$  , ha  $m = 1$ .

A kapott eredményeket bal oldalt ábráztuk. Ez egy  $\sqrt{2}\hbar$  sugarú gömb amelyben

- a felső kúp alkotóvektorainak hossza  $\sqrt{2}\hbar$  , ennek függőleges vetülete  $\hbar$  , ez éppen megfelel az  $L_z = \hbar$  ha  $m = 1$  esetnek
- az alsó kúp alkotóvektorainak hossza  $\sqrt{2}\hbar$  , függőleges vetülete  $-\hbar$  , ez megfelel  $L_z = -\hbar$  ha  $m = -1$  esetnek
- a közepén lévő kör pedig a  $L_z = 0$  ,  $m = 0$  esetnek felel meg.

#### Következtetés:

a kitüntetett iránnyal az  $\vec{L}$  impulzusvektor nem zárhat be akármilyen szöget.

Pl.:  $\vartheta_1 = ?$

$$\cos \vartheta_1 = \frac{L_z}{L} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \Rightarrow \vartheta_1 = 45^\circ$$

hasonlóan elvégezve a többi esetben is

$$\vartheta = 45^\circ \quad m = 1$$

$$\vartheta = 90^\circ \quad m = 0$$

$$\vartheta = 135^\circ \quad m = -1$$

**IRÁNYKVANTÁLÁS :** tetszőlegesen felvett iránnyal a rendszer impulzusmomentum-vektora nem zárhat be akármilyen szöget. (Nobel-díj az igazolásáért)

Határozatlanság itt is van! Ha ismert az  $\vec{L}$  vektor egy komponense, a többi (a másik kettő) már bizonytalan. A vektort jellemző 3 adatból  $(x, y, z)$  vagy  $(r, \vartheta, \varphi)$  csak kettő határozható meg egyidejűleg.

Itt meghatároztuk  $r$ -t ,  $\vartheta$ -t , de  $\varphi$  határozatlan maradt.  $\Rightarrow$  **Az impulzusmomentum-vektor nem határozható meg teljes pontossággal!** (kivétel, ha  $\vec{L} = 0$  )

### Mi a helyzet centrális mezőben?

Ekkor  $L$  megmaradó mennyiség, mivel nincs forgatónyomaték.

A potenciális energia csak a centrumtól mért  $r$  távolság függvénye.  $V(\vec{r}) = V(r)$

Ekkor  $\hat{E}$  és egy tetszőlegesen választott  $L$  impulzusmomentum-komponens-operátor,  $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$  felcserélhető. Ennek következménye: vannak szimultán sajátfüggvényei, sajátállapotaik egyszerre léteznek.

A korábbiakat is hozzávéve:  $\hat{E}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$  operátorok szimultán sajátfüggvényekkel rendelkeznek, azaz egyidejűleg meghatározottak a rendszerre nézve (de ekkor az  $x$  és az  $y$  komponens nem határozható meg, kivéve, ha  $L=0$ ).

Ennek következménye:  $E, L^2$  és  $L_z$  egyidejűleg meghatározott értékekkel rendelkeznek.

**A sajátfüggvény alakja:**  $\varphi(\vec{r}) = f(r, \vartheta) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ , ahol  $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$  gömbfüggvényeket jelöl.

**Ez bármilyen centrális mezőben igaz.**

(Megjegyzés: klasszikus fizikában  $E$  és  $\vec{L}$  állandó a centrális mezőben).

### A spin

1925. Goudsmit és Uhlenbeck: az elektron rendelkezik saját impulzusmomentummal ( a pörgése miatt ). Ez a SPIN. Jele:  $\vec{S}$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$\vec{J}$  : teljes impulzusmomentum  
 $\vec{L}$  : pálya impulzusmomentum  
 $\vec{S}$  : spin

Az impulzusmomentumra vonatkozó sajátérték egyenletnek a spinre is igaznak kell lennie:

$$\hat{S}^2 \cdot \phi = S^2 \cdot \phi$$
$$\hat{S}_z \cdot \phi = S_z \cdot \phi$$

**Megoldás:** (levezetés nélkül, csak a sajátértékekkel foglalkozva)

$$S^2 = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1) \quad \text{de } s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = \hbar \cdot m_s \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad \text{azaz } m_s = \frac{1}{2} \quad \text{és} \quad m_s = -\frac{1}{2}$$

azaz kétféle beállítás létezik. A spinvektor nagysága behelyettesítéssel adódik:

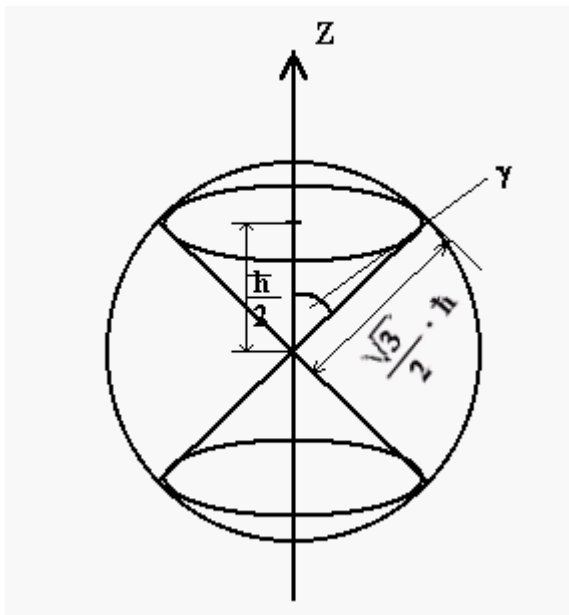
$$S^2 = \hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad S = |\vec{S}| = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar$$

Továbbá

$$\cos \gamma = \frac{S_z}{S} = \left( \hbar \cdot \frac{1}{2} \right) \div \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar \right) = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Tehát a spinvektor függőlegessel bezárt szöge:  $\gamma = \cos^{-1} \frac{\sqrt{3}}{3} = 54,7^\circ$





A kvantumszámok rendszere kiegészítendő egyelektronos atomok esetén:

**n, l, m, m<sub>s</sub>**

**m<sub>s</sub>: SPINKVANTUMSZÁM.** Tehát szigorúan véve nem a spin a kvantumszám, mert az mindig ugyanannyi, hanem a spin-vetület. Ennek felhasználásával:

$$S_z = \hbar \cdot m_s$$

$$m_s = \frac{1}{2} \text{ vagy } m_s = -\frac{1}{2}$$

A nemrelativisztikus kvantummechanika nem tudja levezetni vagy megindokolni a spin létezését, de axiómaként ellentmondásmentesen bevezethető az elméletbe. A relativisztikus kvantumelméletből kijön a spin léte (a spin egy relativisztikus effektus). Nem az elektron forgásából származik, hanem egy elválaszthatatlan (veleszületett) tulajdonság.

## A mágneses momentum

Az atommag körül keringő elektronnak nemcsak impulzusmomentuma (perdülete), hanem mágneses momentuma is van. Korábban láthattuk, hogy a köráram mágneses momentuma:  $\vec{m} = I\vec{A} = IAn\vec{n}$ , ahol  $\vec{A}$  nagysága a körlap területe ( $=r^2\pi$ ), iránya a jobbkéz-szabály szerint merőleges a körlapra, I pedig a keringő elektron által képviselt áram.

$$I = \frac{dq}{dt} = \frac{e}{T}$$

A későbbiekben  $\vec{M}$  legyen a jelölés

$$T = \frac{2r\pi}{v} \rightarrow \vec{M} = \frac{ev}{2r\pi} r^2 \pi \vec{n} = \frac{ev}{2} r\vec{n}$$

Ezekkel a keringő elektron mágneses momentumának nagysága:  $|\vec{M}| = \frac{evr}{2}$ .

Tekintve, hogy az  $m_e$  tömegű klasszikus elektron perdületének nagysága:  $L = m_e vr$ ,

$$\vec{M} = \frac{e}{2m_e} \cdot m_e vr \vec{n} = \frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Az elektronokra a negatív töltésük miatt természetesen  $\vec{m}$  és  $\vec{L}$  ellentétes irányú. Bár klasszikusan vezettük le, ez az összefüggés a kvantummechanika szerint is igaz marad, még akkor is, ha ott szó sincs keringésről. A z-komponensre hasonlóan kapjuk:

$$M_z = \frac{e}{2m_e} \cdot L_z; \quad L_z = \hbar \cdot m$$

azaz

$$M_z = \frac{e\hbar}{2m_e} m, \quad m = 0; \pm 1; \pm 2 \dots$$

Vezessük be a  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} (\approx 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T})$  **Bohr-magnetonnak** nevezett mennyiséget, ekkor az egyenlet egyszerűbbnek néz ki:

$$M_z = \mu_B m; \quad m \in [-\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell]$$

azaz a mágneses momentum z-komponense is kvantált, legkisebb egysége tehát a Bohr-magneton.

A spin esetén a mérések (és a haladottabb elmélet szerint) más a helyzet, ugyanis a spinhez tartozó mágneses nyomaték kétszeres, tehát:  $\vec{M}_s = \frac{e}{m_e} \cdot \vec{S}$ .

A z komponensre:

$$M_s^z = \pm \mu_B = \pm \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \hbar = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \hbar \cdot 2 \cdot m_s = \frac{e}{m_e} \cdot \hbar \cdot m_s = \frac{e}{m_e} \cdot S_z.$$

tehát mágneses szempontból a spin "duplán számít". Az elektron teljes mágneses momentumát és annak z komponensét a vektorok, ill. a komponensek összeadásával kapjuk:

$$\vec{M} = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \vec{L} + \frac{e}{m_e} \cdot \vec{S}$$

$$M_z = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot L_z + \frac{e}{m_e} \cdot S_z = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot (L_z + 2 \cdot S_z)$$

### Érdekesség:

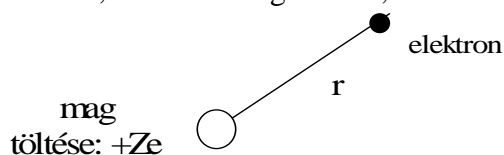
Kvantumelektrodinamikai korrekciók miatt a valóságban az elektron mágneses momentuma z irányú komponensének legkisebb értéke nem pontosan egyezik a Bohr-magnetonnal.

A pontos érték:  $M_s^z = 1.001\,159\,652\,18 \mu_B$

A kvantumelektrodinamikai elméleti számítás a kísérletileg mért értékkel 12 számjegyig megegyezik. Ez igen ritka pontosságot jelent.

## Az egyelektronos atom kvantummechanikai modellje

(Ha  $Z=1$ , akkor Hidrogénatom, más esetben ion)



$$V(r) = -k \frac{Ze^2}{r}$$

(Vonzó kölcsönhatás esetén a Coulomb-potenciál negatív).

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - k\frac{Ze^2}{r}\psi = E\psi;$$

A gömbszimmetria miatt úgy egyszerűbb kezelni a problémát, hogy az  $r, \vartheta, \varphi$  gömbi polárkoordinátákra térünk át, tehát a hullámfüggvény új változói:  $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$ .

Ekkor persze a Laplace operátort is át kell transzformálni, ezt nem részletezzük.

A (stacionárius) megoldások a következő (szeparált) alakban állnak elő:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

ahol az  $n, l, m$  paramétereket kvantumszámoknak nevezik, az  $R$  radiális hullámfüggvény pedig a gömbfüggvényekhez hasonlóan bonyolult.

Az elektronok jellemzésére tehát nem célszerű a koordinátáikat és a sebességüket használni, ehelyett az ún. **kvantumszámokat** használjuk, amelyek a hullámfüggvény paraméterei. Később látni fogjuk, hogy a kvantumszámokkal a többielektronos atomok elektronjait is jellemezhetjük, de csak közelítőleg, mivel egzakt jelentésük csak az egyelektronos atomra (a H atomra) van:

**$n$  főkvantumszám:** meghatározza az elektron energiáját (a Bohr modellel kapott képlet szerint):

$$E_n = -Z^2 \cdot E^* \cdot \frac{1}{n^2},$$

ahol  $E^* = 2,18aJ$  és  $n=1, 2, 3, 4, \dots$  (az ezeknek megfelelő héjakat sokszor K, L, M, N, ... betűkkel jelölik). A főkvantumszám meghatározza azon felületek számát is, amelyeken a hullámfüggvény zérus értéket vesz fel (csomófelületek).

**$\ell$  mellékkvantumszám:** meghatározza az elektron (pálya)impulzusmomentumának nagyságát:

$$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}, \text{ ahol } \ell \in [0, 1, \dots, n-1].$$

Ez határozza meg a „pálya”, az elektronfelhő szimmetriáját ( $\ell=0$  esetén gömbszimmetrikus,  $\ell=1$ -re inkább propellerhez hasonló). (A Bohr-modell  $L = n\hbar$  feltevése tehát helytelen.) A könnyebb áttekinthetőség kedvéért az  $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$  alhéjakat sokszor az **s, p, d, f, ...** betűkkel jelölik.

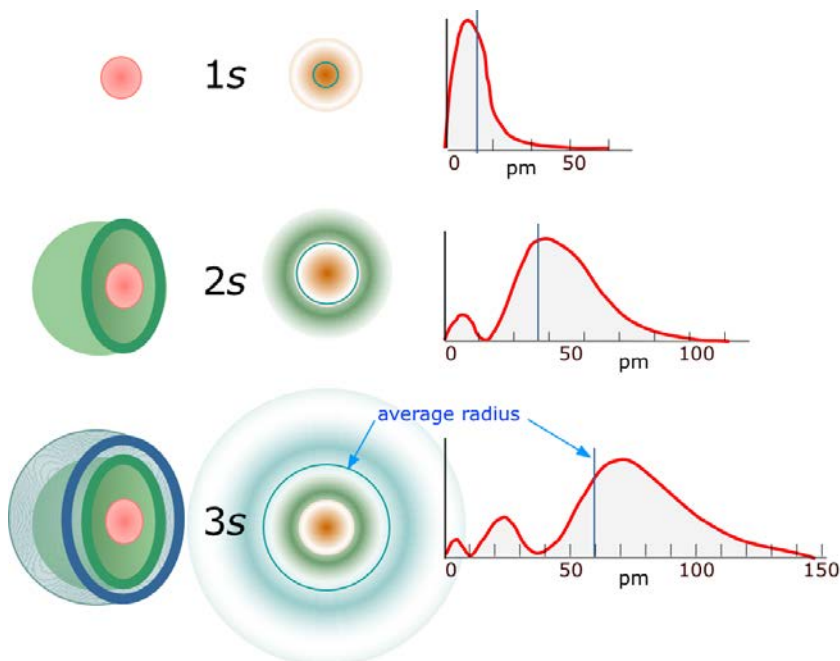
**$m$ : mágneses kvantumszám:** meghatározza az elektron (pálya)impulzusmomentumának  $z$  irányú komponensét:  $L_z = \hbar m$ , ahol  $m \in [-\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell]$ . Ezáltal meghatározza a „pálya” irányítását, pl.  $\ell=1$ -re a „propeller” nem állhat akármilyen irányban, csak néhány jól meghatározottban. Ez az iránykvantáltság a klasszikus mechanikához képest új elem.

**$m_s$ : spin-kvantumszám:** meghatározza az elektron saját impulzusmomentumának  $z$

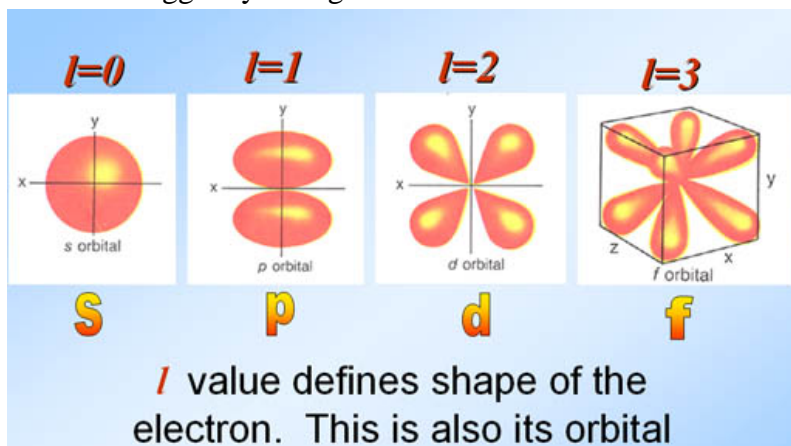
komponensét:  $S_z = \hbar m_s$ , ahol  $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ . A saját impulzusmomentum az elektron belső

tulajdonsága, a  $z$  tengelyhez képest kétféleképpen állhat és vetületének nagysága fele a pályamomentum minimális (de nem zérus) vetületének.

a  $\varphi$  függvény alakja:  $\varphi_{100} = Ke^{-Ar}$



A többi függvény nem gömbszimmetrikus:



pl:  $n=1 \rightarrow l=0 \rightarrow m=0$  a hidrogén alapállapotban 0 impulzusmomentummal rendelkezik.

$n=2 \rightarrow l=0 \rightarrow m=0$

vagy  $l=1 \rightarrow m=-1$

vagy  $m=0$

vagy  $m=1$ , ez az állapot négyszeresen degenerált!

## Az iránykvantáltság bizonyítékai

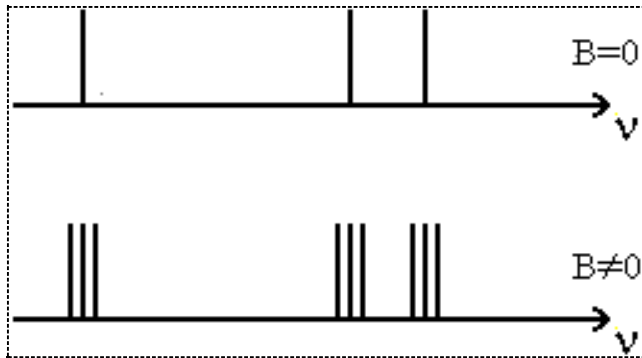
Korábban láttuk, hogy a mágneses momentum ugyanolyan módon kvantált, mint az impulzusmomentum, beleértve az iránykvantáltságot is. Viszont a mágneses momentum (ellentétben az impulzusmomentummal) egy jól mérhető mennyiség, mert kölcsönhat a mágneses

mezővel. A kölcsönhatás energiája:  $E_p = -\vec{m} \cdot \vec{B}$ .

Ha a mágneses indukció a z tengely irányába mutat, akkor:  $E_p = -m_z \cdot B = \mu_B \cdot B \cdot m$ , ahol  $m \in [-\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell]$  egész szám. A mágneses energia adagosságát két alapvetően különböző kísérlet is igazolja: a Zeeman-effektus és a Stern-Gerlach kísérlet.

## A Zeeman-effektus

Megfigyelés: A mágneses mezőbe helyezett atom színekvonalai felhasadnak.



Magyarázat: mágneses tér hiányában az atomi energiaszintek nem függenek a mágneses kvantumszámtól, (homogén vagy inhomogén) mágneses térben azonban igen.

Az  $E_p = -\vec{m} \cdot \vec{B}$  mágneses energia, ami az  $m$  mágneses kvantumszám előjelmének megfelelően

negatív és pozitív is lehet:  $E_p = \mu_B \cdot B \cdot m$ , vagyis a mágneses mező eltolja, felhasítja az eredeti szinteket. A foton kibocsátása során – amikor az atomi elektron alacsonyabb energiaszintre kerül – a mágneses kvantumszám vagy nem változik, vagy eggyel változik, tehát

$\Delta E_p = 0$  vagy  $\pm \mu_B \cdot B$ . Ezen átmenet során kibocsátott foton frekvenciája  $f = \Delta E / h$ , ennek

$$\Delta f = 0 \text{ vagy } \pm \frac{\mu_B \cdot B}{h} \text{ lehet. A}$$

eltolódása a mágneses mezőbe helyezett atom esetében

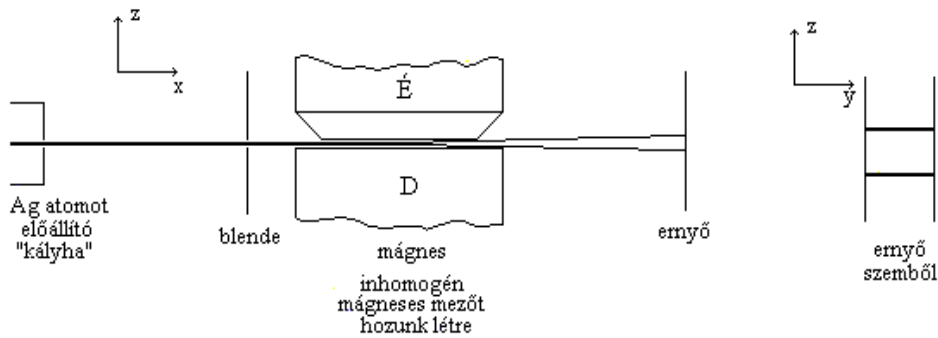
színekvonalak ebben a modellben tehát háromfelé hasadnak. Ha egy olyan elektront tekintünk, amelynek nincs pályamomentuma, csak spinje, akkor a kétféle spin-beállítás két különböző energiát jelent.

Megjegyezzük, hogy ez a Zeeman-effektus legegyszerűbb formája, általános esetben az elektronok spinje nagyon megbonyolítja a folyamatot.

## Stern-Gerlach kísérlet

Ez a kísérlet már közvetlen bizonyítékkal szolgált az iránykvantálásra. A kísérlet során egy "kályhát" használunk ami Ag atomokat állít elő. Ezt az "atom sugarat" inhomogén mágneses mezőn vezetjük át és azt tapasztaljuk hogy a sugár két részre hasad vagyis az ernyőn két foltot látunk, holott a klasszikus mechanika szerint egy elmosódott foltot kellene látnunk. Fontos hogy atomokat eresztünk át a mágneses mezőn és nem elektronokat, hiszen ebben az esetben az elektronok körpályára állnának a két mágneses pólus között. A kísérlet elvi rajzát az alábbi ábrákon láthatjuk. A felvett irányok tetszőlegesek, a mi esetünkben a kis koordináta rendszerek jelölik ezeket.

Inhomogén mágneses téren áthaladó atomnyaláb több (pl. két) elkülönült ágra szakad. Az inhomogén mezőt az ábrán különleges alakú mágneses pólusokkal hozzák létre. Az atomnyaláb közepén az elrendezés szimmetriasíkjában halad.



Magyarázat: inhomogén mágneses mezőben a mágneses momentumokra irányításuktól függően erő hat:

$$\vec{F} = -\nabla \cdot E_p = \nabla \vec{m} \vec{B}$$

Figyelembe véve, hogy a nyaláb helyén a mágneses indukció fölfelé (a z tengely irányába) mutat

és ebben az irányban is változik leginkább:  $F_z = -\mu_B \cdot m \cdot \frac{\Delta B}{\Delta z}$ . A vízszintesen induló atomokra tehát annyiféle függőleges eltérítő erő hathat, ahányféle mágneses kvantumszámuk lehet. Ez pedig az atomnyaláb m db ágra szakadását jelenti.

A kísérletet először ezüst atomokkal végezték el. Az ezüst atomban a lezárt héjakon kívül csak egy db (5s) elektron van, melyre  $n=5$ ,  $\ell=0$ . Ennek a pálya-impulzusmomentuma 0, de a spinje  $\frac{1}{2}$ , amely kétféleképp állhat be  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ . Ez az erő képletében csak annyi változást jelent, hogy az m helyébe  $2m_s = \pm 1$  írandó (mert a spinhez tartozó mágneses nyomaték kétszeres), tehát

$F_z = \pm \mu_B \cdot \frac{\Delta B}{\Delta z}$ . Ennek megfelelően az ezüstnyaláb a kísérletben két ágra szakadt szét.

## Kvantumstatistikák

### Azonos részecskék:

pl.: Egy atom tartalmaz N db elektront, hullámfüggvénye:  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N)$

Az atomban felcserélünk két elektront: 1.  $\leftrightarrow$  2. akkor a hullámfüggvény:  $\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_N)$

Két elektron felcserélése semmilyen mérhető fizikai mennyiségre nem lehet semmilyen hatással. Matematikailag csak abban nyilvánulhat meg a felcserélés, hogy  $\Psi$  kap egy egységnyi abszolút értékű  $e^{i\alpha}$  fázisszorozót

$$(\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N))^2 = (\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N))^2 \Rightarrow \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_N) = e^{i\alpha} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N); \quad \text{azaz} \quad |e^{i\alpha}| = 1$$

Ha most visszacseréljük a két elektront.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N) = e^{i\alpha} \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_N) = \underbrace{(e^{i\alpha})^2}_1 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N),$$

tehát  $e^{i\alpha} = \pm 1$ . Tehát elvi szinten két lehetőség van, vagy változik az előjel, vagy nem.

A valóságban mindkét lehetőség megvalósul, attól függően, milyen részecskéről van szó.

1. ha  $e^{i\alpha} = 1$  akkor a hullámfüggvény **szimmetrikus** a 2. részecske felcserélésére.  
 $\Rightarrow$  **bozonok**, a spinvetületük  $\hbar$  egész számú többszöröse. (Pl.: fotonok, egyes atomok, pl. He).

2. Ha  $e^{i\alpha} = -1$  akkor a hullámfüggvény **antiszimmetrikus** a két részecske felcserélésére.  
 $\Rightarrow$  **fermionok** spinvetületük  $\frac{\hbar}{2}$  illetve  $-\frac{\hbar}{2}$  lehet (pl.: elektron, proton, neutron).

A fermionokra, így az elektronra is érvényes a Pauli elv, melynek általános alakja:

**A természetben csak antiszimmetrikus elektronállapotok valósulnak meg.**

Az állítást indirekt bizonyítjuk. Tegyük fel, hogy két elektron ugyanabban az állapotban van:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots) = \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_3, \dots)$$

De az antiszimmetria miatt

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots) = -\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_3, \dots)$$

Vagyis a hullámfüggvény egyenlő önmaga mínusz egyszeresével, ami csak úgy lehetséges, hogy a függvény azonosan nulla, vagyis ilyen rendszer nulla valószínűséggel létezik. Bármely két változóra különböznie kell a függvénynek, mert különben az antiszimmetria nem teljesül.

## A klasszikus-, a Bose-Einstein- és a Fermi-Dirac statisztika

### Emlékeztető

A **fázistér** egy olyan absztrakt tér, amely a hely- és sebességkoordinátákból van „összerakva”. Tömegpont háromdimenziós mozgása esetén 3+3 időfüggő adat írja le a tömegpont aktuális állapotát. Ezt a 6 adatot, mely leírja a mozgást, ábrázolhatjuk egy hatdimenziós koordináta-rendszer egy pontjaként. Tehát a fázistérben a dinamikai rendszer összes lehetséges állapotai szerepelnek, még hozzá a rendszer minden egyes lehetséges állapota a fázistér egyetlen pontjának feleltethető meg.

**A Boltzmann statisztika alapfeltevései** voltak:

1. Az azonos részecskék megkülönböztethetők.
2. A fáziscella tetszőlegesen kicsire választható (azaz a fázistér egymáshoz tetszőlegesen közel lévő pontjai megkülönböztethetők).
3. Egy cellában tetszőlegesen sok részecske elhelyezhető.

A kvantummechanikának mindhárom alapfeltevéssel szemben ellenvetései vannak:

1  $\leftrightarrow$  A mikrorészecskék megkülönböztethetetlenek

Nem hordoznak ismertetőjegyeket, nem követhető a pályájuk

$$2 \leftrightarrow \Delta\Omega = \Delta U \Delta V = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \cdot \Delta x \Delta y \Delta z = \Delta p_x \Delta x \cdot \Delta p_y \Delta y \cdot \Delta p_z \Delta z \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^3$$

$$\text{mivel } \Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}. \text{ Tehát}$$

$$\Delta\Omega \geq \frac{\hbar^3}{8} \quad \text{a fáziscella nem lehet tetszőlegesen kicsi.}$$

3. Igaz a szimmetrikus hullámfüggvényű részecskékre (bozonokra)

Bose-Einstein statisztika igaz rájuk

Nem igaz az antiszimmetrikus hullámfüggvényű részecskékre (fermionokra)

Fermi-Dirac statisztika igaz rájuk

pl.: 2 részecske 3 cellában: Hány lehetőség van?

Boltzmann

ab		
	ab	
		ab
a	b	
b	a	
a		b
b		a
	a	b
	b	a

Bose-Einstein

**		
	**	
*	*	
*		*
	*	*
		**

Fermi-Dirac

*	*	
*		*
	*	*

Ezekből itt nem részletezett módon adódnak az **eloszlásfüggvények**. Legyen  $Z_i$  a fáziscellák száma az  $E_i$  állapotban.

**Boltzmann:**  $N_i = \frac{Z_i}{A} e^{-\frac{E_i}{k \cdot T}}$  (A : a részecskeszámra vonatkozó mellékfeltételből számolható)

$$\text{Bose-Einstein: } N_i = \frac{Z_i}{A \cdot e^{\frac{E_i}{k \cdot T}} - 1}$$

$$\text{Fermi-Dirac: } N_i = \frac{Z_i}{A \cdot e^{\frac{E_i}{k \cdot T}} + 1}$$

ahol az A állandó a hőmérséklettől függ, az egyes eloszlásokra külön számítható.

Megjegyzések:

1, Ha az exponensben nagy szám szerepel, akkor  $A \cdot e^{\frac{E_i}{k \cdot T}} \gg 1$ , azaz a három statisztika ugyanarra az eredményre vezet. Ebben az esetben a kvantumstatisztikák tartanak a klasszikushoz.

A klasszikus (Boltzmann) akkor jó közelítés, ha  $E_i$  elég nagy, és a részecskék nincsenek nagyon sűrűn. Most már érthető, hogy miért adott helyes eredményt a Boltzmann statisztika nem túl szélsőséges állapotú gázokra. Tehát a nagy energiás állapotok mindhárom statisztika szerint kb. ugyanúgy vannak betöltve, ezért az egyszerűbb Boltzmann statisztikát lehet használni. Az eloszlás nagyenergiás részét Boltzmann-faroknak is nevezik.

2, Ha  $E_i$  kicsi vagy igen nagy a sűrűség, akkor nem alkalmas a Boltzmann statisztika (a gáz nem tekinthető ideálisnak - *elfajult gáz*)

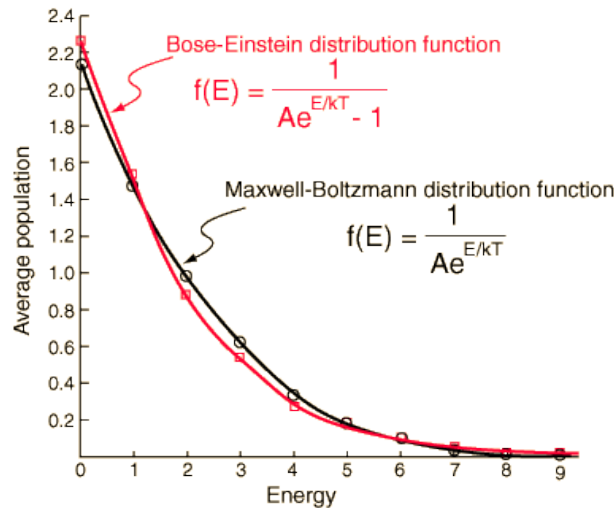


Az atomok **Bose-kondenzációja**: Igen alacsony hőmérsékleten az összes atom egyetlen (energia)fáziscellába rakható. Ez a 90-es évek atomfizikájának igen lényeges eredménye. Lényegében a Bose kondenzáció témakörébe tartozik néhány makroszkopikusan is megnyilvánuló kvantummechanikai effektus: a szuperfolyékonyság és a szupravezetés.

## 2. Bose–Einstein-statisztika alkalmazása fotonokra

A fotonok egymástól megkülönböztethetetlenek, egy fáziscellába tetszőleges számú kerülhet.

**Nincs részecskeszám megmaradás előírva** (keletkezhettek, eltűnhetnek szabadon). Ez utóbbi következménye, hogy  $A = 1$ . (bizonyítás nélkül)

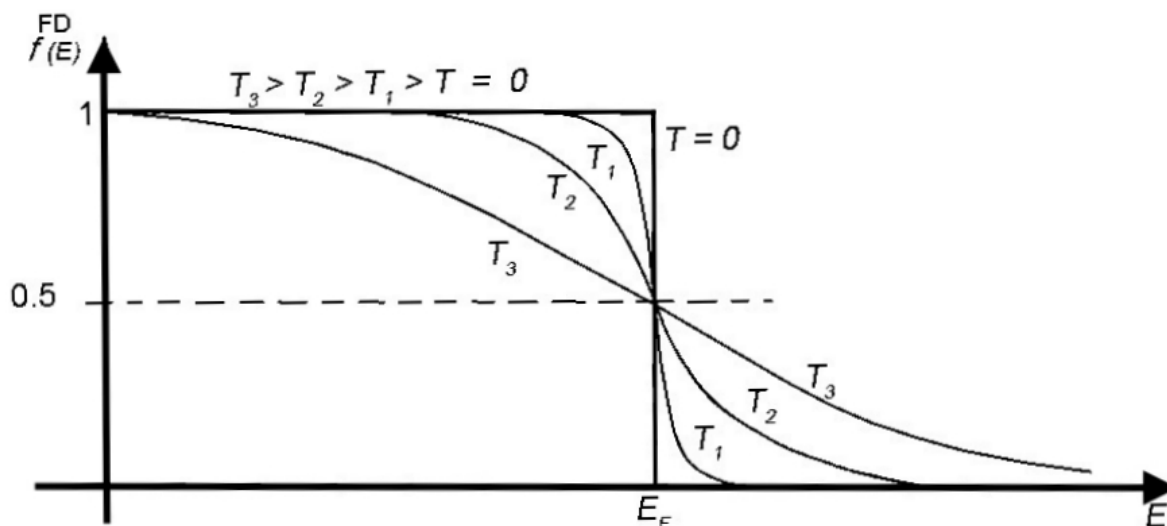


## 3. Fermi-Dirac-statisztika alkalmazása "elektronokra"

Itt a részecskeszámról vonatkozó mellékfeltételből kijön, hogy  $A = e^{\frac{-E_F}{kT}}$ , így kapjuk

$$\frac{N_i}{z_i} = \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1}$$

Itt  $E_F$  neve: **Fermi-energia**. Az összefüggésből látszik, hogy  $N_i / z_i$  nulla és egy közé esik, vagyis egy fáziscellában maximum egy részecske lehet (adott spinvetülettel), tehát ez egy betöltési **valószínűség**. A Fermi-eloszlás grafikonja különböző hőmérsékletekre:



$E_F$ -nél a fáziscellák éppen 50%-a van betöltve.  $T \rightarrow 0$  esetben a Fermi-szint alatti állapotok mind betöltve, fölötté üresek. Az elektronok többségének az energiája nem változik a hőmérséklettel.

Következmény:

A fémek fajhőjéhez a szabad elektronok csak elhanyagolható járulékot adnak.

(pl.: 1000K –nél a járulék 2 %)

A fémekben lévő szabad (vezetési) elektronokra **nem érvényes az ekvipartíció tétele**, legfeljebb azzal a megkötéssel, hogy az elektronok többségének nincs szabadsági foka.

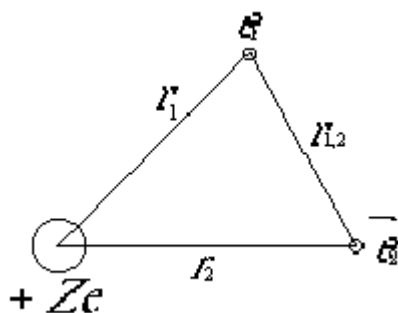
Összefoglalás: A fizikában három kategóriát használnak a részecskék leírására:

1. **Klasszikus részecskék:** megkülönböztethetők, egy fáziscellában tetszőlegesen sok lehet, Boltzmann-statisztika.
2. **Bozonok:** Megkülönböztethetetlen részecskék, egy fáziscellában tetszőlegesen sok lehet, szimmetrikus a hullámfüggvényük, Bose-Einstein statisztika érvényes. Ezek felelősek a kölcsönhatások közvetítéséért, őket nevezhetjük a világ építőkövei közötti ragasztónak vagy habarcsnak.
3. **Fermionok:** Megkülönböztethetetlen részecskék, egy fáziscellában csak két részecske lehet ellentétes spinnel, antiszimmetrikus a hullámfüggvényük, Fermi-Dirac statisztika érvényes. Ezeket nevezik a világ építőköveinek („két téglát nem lehet egy helyen”).

## A többielektronos atomok

Az egyelektronos atomra elméleti úton egzakt eredmény kapható. A többielektronos atomok kellően pontos leírása viszont a kvantummechanika legnehezebb problémái közé tartozik. E leírás, különösen nagy rendszámú atomok esetén, csak hatékony közelítő módszerekkel lehetséges. Látni fogjuk, hogy a legáltalánosabban használt közelítésben egy atom minden elektronját egy-egy, a H-atom elektronjának leírásakor már bevált kvantumszám-négyessel írjuk le.

Már a kételektronos atom esete is csak numerikus közelítéssel oldható meg, de tetszőleges pontossággal.



Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2)\varphi - k \frac{Ze^2}{r_1}\varphi - k \frac{Ze^2}{r_2}\varphi + k \frac{e^2}{r_{1,2}}\varphi = E\varphi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2)\varphi \quad \text{kinetikus energia}$$

$$-k \frac{Ze^2}{r_1}\varphi - k \frac{Ze^2}{r_2}\varphi \quad \text{a mag és elektron kölcsönhatás}$$

$$-k \frac{e^2}{r_{1,2}}\varphi \quad \text{elektron – elektron kölcsönhatás}$$

Még több elektron esetén sokkal több tag van a Hamilton-operátorban:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i - ke^2 Z \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} + ke^2 \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}}_{i>j} \right] \varphi = E\varphi$$

ahol

$$\varphi = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad \varphi: \text{a helykoordináták függvénye}$$

3N darab változó szerepel a függvényben. Például vas esetén N=26.

Ha egy-egy változó 100 pontjában tároljuk a függvényértékeket (ennyi a megfelelő pontossághoz feltétlenül szükséges), akkor összesen

$$100^{3N} = 100^{3 \cdot 26} = 100^{78} \rightarrow 10^{156} \text{ darab}$$

függvénypontról van szó.

Mekkora számítógép kell ennyi adat tárolásához ?

$$1 \text{ kg} \approx 10^{26} \text{ atomból áll}$$

$$1 \text{ naprendszer} \approx 10^{30} \text{ kg}$$

$$1 \text{ galaxis} \approx 10^{11} \text{ naprendszer}$$

$$1 \text{ világ} \approx 10^{11} \text{ galaxist tartalmaz}$$

$$\text{tehát } 1 \text{ világ} \approx 10^{78} \text{ atomból áll}$$

Mivel egy függvényérték tárolásához legalább egy atom kell (sőt belátható időn belül egynél jóval több), ezért ekkora számítógép elvileg sem építhető, és még nem is beszéltünk arról, hogy differenciáloperátorokat kellene hajtani erre a függvényre. Tehát átlagos atomméret esetén

pusztán numerikus közelítő módszerrel nem oldható meg a probléma. **Másfajta, hatékonyabb, fizikai alapokon álló közelítés szükséges !**

**Közelítés egyrészecske hullámfüggvényekkel (független részecske közelítés).** A hullám fgv-t egyrészecske hullámok szorzataként képzeljük el.

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \dots \varphi_N(\vec{r}_N)$$

Ezt a függvényt már könnyebben tudjuk tárolni. Így ha egy darab  $\varphi$ -t  $100^3 = 10^6$  ponton ábrázolunk, az összesen  $N \cdot 10^6$  pont. A számítás azonban nem egyszerű.

A közelítésben a Schrödinger-egyenlet szétesik N darab különálló egyenletre.

$$\left[ -\frac{\hbar}{2m} \cdot \Delta_i - ke^2 Z \frac{1}{r_i} + ke^2 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \varphi_i(\vec{r}_i) = E \varphi_i(\vec{r}_i)$$

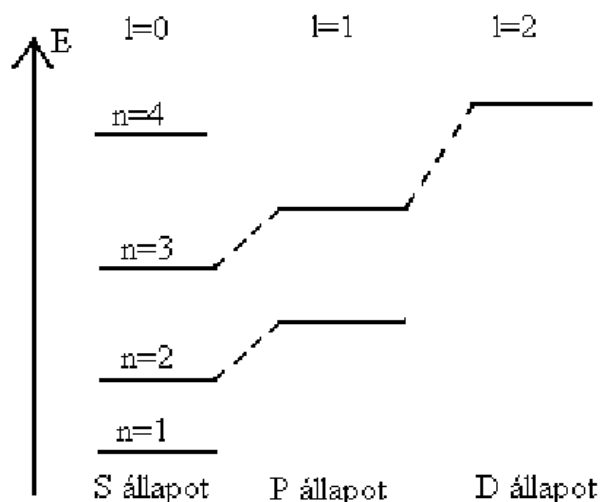
Itt nem részletezett módszerrel az egyenlet numerikusan megoldható. Az eredmény: néhány százalékra pontos energiaértékek kaphatók. A legfontosabb változás, hogy

**az energia most már a főkvantumszám mellett a mellékkvantumszámtól is függ.** Konkrétabban, ugyanazon n-re  $\ell$ -lel növekszik az energia:

$$E_{n,\ell} < E_{n,\ell+1}$$

Ez azt jelenti, hogy a kvantumszámok jelentése módosul egy kicsit.

Oka: Ha több elektron van, a belső elektronok taszítják a külsőket, vagyis leárnyékolják számukra az atommag vonzását, ezért a potenciális energia abszolút értékben csökken. A magasabb  $\ell$  értékű elektronok pályája távol van a gömbszimmetriától, ezek az elektronok átlagosan távolabb vannak a magtól és így jobban érzik a leárnyékolást, tehát a mag Coulomb-vonzása csökken, a potenciális energia abszolút értékben csökken, az össz-energia nő.



Látható, hogy ez a függés nem elhanyagolható, hanem olyan mértékű, hogy a nagyobb főkvantumszámú elektronnak kisebb lehet az energiája:

$$E(2s) < E(2p) < E(3s) < E(3p) < E(4s) < E(3d)$$

A teljes sorrend, nagyobb betűmérettel jelölve a sorban hátrébb csúszott állapotokat:

**1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p**

Megjegyzés: ma már ezreléknél is pontosabb közelítések is vannak, amelyek számos itt nem tárgyalt hatást is figyelembe vesznek. Ezek ismertetése meghaladja e tárgy kereteit.

## A periódusos rendszer

A következő törvényeket tekintetbe kell vennünk:

1. **Pauli elv:** (független részecske közelítésben) ugyanazzal a  $n, l, m, m_s$  kvantumszám négyessel nem rendelkezhet két elektron egy atomon belül.

2. **Energiaminimumra** való törekvés, azaz a létező energiaszintek alulról kezdve töltődnek fel.

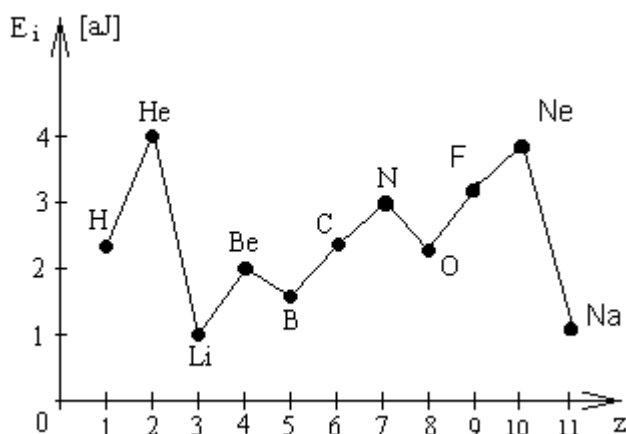
3. **Hund-szabály:** azonos energiájú szintek közül a térbelileg különbözőek töltődnek be először. Így vannak az (egymást elektrosztatikusan taszító) elektronok a legmesszebb egymástól. Ráadásul az eredő spinvetület maximális, tehát az elektronok először különböző mágneses és megegyező spinkvantumszámmal kerülnek az atomba, ahogy ez az alábbi táblázatban is látható pl. a nitrogén sorára tekintve.

Elem	Elektronkonfiguráció	Utolsó elektron kvantumszámai				Eredő spin vetülete
		n	l	m	$m_s$	
H	1s	1	0	0	pl. $\pm 1/2$	$1/2$
He	$(1s)^2$	1	0	0	-1/2	0
Li	$(1s)^2 2s$	2	0	0	1/2	$1/2$
Be	$(1s)^2 (2s)^2$	2	0	0	-1/2	0
B	$(1s)^2 (2s)^2 2p$	2	1	1	1/2	$1/2$
C	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$	2	1	0	1/2	1
N	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^3$	2	1	-1	1/2	$3/2$
O	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^4$	2	1	1	-1/2	1
F	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^5$	2	1	0	-1/2	$1/2$
Ne	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6$	2	1	-1	-1/2	0
Na	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 3s$	3	0	0	1/2	$1/2$

PERIÓDUS CSOPORT		s-elemek I II		AZ ELEMEEK PERIÓDUSOS RENDSZERE																p-elemek III IV V VI VII 0							
K	1	1,01 <b>H</b> 1 Hidrogén	<div>relativ atomtömeg — 26,98</div> <div>vegyjel — <b>Al</b><sup>3</sup><sub>8</sub><sup>2</sup></div> <div>rendszám — 13 — az elektronok eloszlása az energiaszinteken</div> <div>Alumínium</div>																								
L	2	6,94 <b>Li</b> 3 Lítium																	9,01 <b>Be</b> 4 Berillium								
M	3	22,99 <b>Na</b> 11 Nátrium																	24,31 <b>Mg</b> 12 Mágnezium								
				III	IV	V	VI	d-elemek VII VIII VIII I II																			
N	4	39,10 <b>K</b> 19 Kálium	40,08 <b>Ca</b> 20 Kalcium	44,96 <b>Sc</b> 21 Szkandium	47,90 <b>Ti</b> 22 Títán	50,94 <b>V</b> 23 Vanádium	52,00 <b>Cr</b> 24 Króm	54,94 <b>Mn</b> 25 Mangán	55,85 <b>Fe</b> 26 Vas	58,93 <b>Co</b> 27 Kobalt	58,71 <b>Ni</b> 28 Nikkel	63,55 <b>Cu</b> 29 Réz	65,39 <b>Zn</b> 30 Cink	69,72 <b>Ga</b> 31 Gallium	72,59 <b>Ge</b> 32 Germánium	74,92 <b>As</b> 33 Ársén	78,96 <b>Se</b> 34 Szelen	79,90 <b>Br</b> 35 Brom	83,80 <b>Kr</b> 36 Kripton								
O	5	85,47 <b>Rb</b> 37 Rubídium	87,62 <b>Sr</b> 38 Stroncium	88,91 <b>Y</b> 39 Ittrium	91,22 <b>Zr</b> 40 Cirkónium	92,91 <b>Nb</b> 41 Nióbium	95,94 <b>Mo</b> 42 Molibdén	98,91 <b>Tc</b> 43 Technécium	101,07 <b>Ru</b> 44 Ruténium	102,91 <b>Rh</b> 45 Ródium	106,4 <b>Pd</b> 46 Palládium	107,87 <b>Ag</b> 47 Ezüst	112,41 <b>Cd</b> 48 Kadmium	114,82 <b>In</b> 49 Indium	118,71 <b>Sn</b> 50 Ólom	121,75 <b>Sb</b> 51 Antimon	127,60 <b>Te</b> 52 Tellúr	126,90 <b>I</b> 53 Jód	131,30 <b>Xe</b> 54 Xenon								
P	6	132,91 <b>Cs</b> 55 Cézium	137,33 <b>Ba</b> 56 Bárium	57-71	178,49 <b>Hf</b> 72 Háfium	180,95 <b>Ta</b> 73 Tantál	183,85 <b>W</b> 74 Volfrám	186,21 <b>Re</b> 75 Rénium	190,2 <b>Os</b> 76 Ozmium	192,22 <b>Ir</b> 77 Iridium	195,09 <b>Pt</b> 78 Platina	196,97 <b>Au</b> 79 Arany	200,59 <b>Hg</b> 80 Higany	204,37 <b>Tl</b> 81 Tallium	207,2 <b>Pb</b> 82 Ólom	208,98 <b>Bi</b> 83 Bizmut	209 <b>Po</b> 84 Polónium	210 <b>At</b> 85 Asztácium	222 <b>Rn</b> 86 Radon								
Q	7	223 <b>Fr</b> 87 Francium	226,03 <b>Ra</b> 88 Rádium	89-103	261 <b>Rf</b> 104 Rutherfordium	262 <b>Ha</b> 105 Hánium	263 <b>Unh</b> 106 Unnilhexium	262 <b>Uns</b> 107 Unnilseptium	265 <b>Uno</b> 108 Unniloctium	266 <b>Une</b> 109 Unnilennium	*Az elemek ideiglenes elnevezése – 104 Rf – Rutherfordium – 104 Ku – Kurtschatovium – 105 Ha – Hanium – 105 Ns – Nielsbohrium																
				f-elemek																							
LANTANOIDÁK				138,91 57 Lantán	140,12 58 Cérium	140,91 59 Prázédimium	144,24 60 Neodimium	145 61 Prometium	150,4 62 Szamárium	151,96 63 Európium	157,25 64 Gadólínium	158,93 65 Terbium	162,50 66 Diszprézium	164,93 67 Holmium	167,26 68 Erbium	168,93 69 Tulium	173,04 70 Itterbium	174,97 71 Lutécium									
AKTINOIDÁK				227,03 89 Aktínium	232,04 90 Tórium	231,04 91 Protaktínium	238,03 92 Urán	237,05 93 Neptúnium	244 94 Plútónium	243 95 Americium	247 96 Kürium	251 97 Berkélium	254 98 Kalifornium	257 99 Einsteinium	258 100 Fermium	259 101 Mendelevium	260 102 Nobelium	260 103 Lawrencium									

Ha tehát (képzletben) a +Ze töltésű atommaghoz egyesével adagoljuk az elektronokat, akkor az első elektron a legkisebb energiájú, azaz az 1s állapotba megy ( $n=1, l=0, m=0$  és pl.  $m_s=1/2$ ). A második elektron még mehet az 1s állapotba, mert  $m_s=-1/2$  is lehet. A harmadik elektron már nem „fér be” az  $n=1$  állapotba, ezért az eggyel magasabb energiájú, az  $n=2$  főkvantumszámú állapotba fog menni. Számoljuk össze, hogy ez az állapot hányféle kvantumszám kombinációban tölthető be, azaz hány elektron „fér el rajta”. Ha  $n=2$ , akkor  $l$  kétféle értéket vehet fel: 0 és 1. Ezen belül  $l=0$ -ra  $m=0$ , mivel  $m_s$ -nek két lehetséges értéke van, ez két lehetőség.  $n=2, l=1$ -re  $m$  háromféle lehet: -1, 0 és 1, a spin miatt kétféle szorozva 6 lehetőség, azaz összesen 8 lehetséges kombináció. Tehát az  $n=2$  főkvantumszámú héjon max. 8 elektron lehet, azaz összesen 8 olyan kémiai elem lehetséges, amelynek legkülső elektronja az L héjon van. A periódusos rendszerre pillantva láthatjuk, hogy az első sorban valóban 2, a másodikban 8 elem van.

Ha az energia nem függne a mellékvantumszámtól, akkor a harmadik sorban már 18 elem lenne, mert az argon után elkezdene betöltődni a 3d alhéj. Viszont a valóságban a 4s alhéj mélyebb energiájú, tehát az argon után ismét egy, a nátriumhoz hasonló viselkedésű alkálifém, a kálium következik.



$E_i$  ionizációs potenciál: az az energia, amellyel a leglazábban kötött elektron leszakítható a semleges atomból.

Az ionizációs potenciál, mint a legtöbb atomi tulajdonság a rendszámnak periodikus függvénye. Ezek a tulajdonságok a legkülső elektrontól függenek.

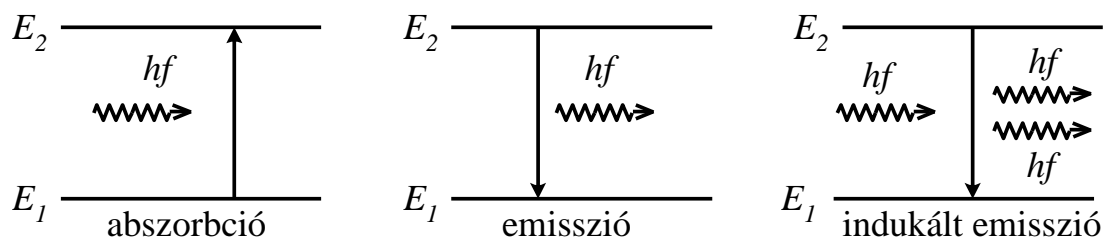
## A lézer

### Indukált emisszió

Az atomokban az elektronok diszkrét energiákkal rendelkeznek, és energiaminimumra törekszenek. Mint ismeretes, abszorpció folyamata során az atom elnyel egy fotont, és ennek következtében az egyik elektronja egy alacsonyabb energiájú állapotból egy magasabb állapotba kerül. A gerjesztett állapot élettartama általában  $\sim 10^{-8}$  s, az úgynevezett metastabil állapotoké  $\sim 10^{-3}$  s. A fordított folyamatot spontán emisszióknak nevezzük, ekkor az elektron magától egy alacsonyabb energiaállapotba kerül, és az atom kibocsát egy ennek megfelelő energiájú fotont:

$$E_2 - E_1 = hf$$

Einstein 1916-ban megjósolt egy harmadik folyamatot, az indukált emissziót. Ilyenkor az atom gerjesztett állapotban van, és elhalad mellette egy olyan energiájú foton, amit ő maga is ki tudna bocsátani. Ez a foton indukálhatja, hogy az atom gerjesztettsége megszűnjön emisszió révén.



Az abszorpció, az emisszió, és az indukált emisszió jelensége

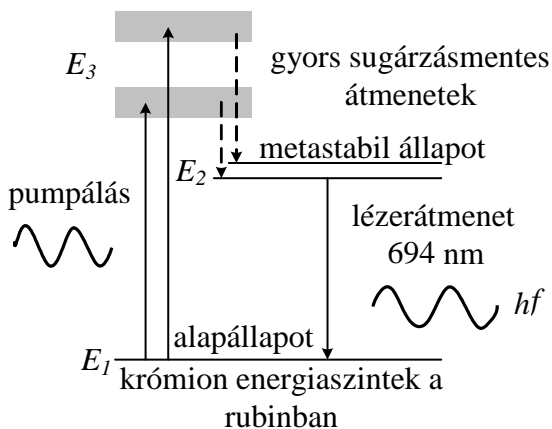
A keletkező foton az eredetivel megegyező frekvenciájú, vele azonos irányban halad, fázisuk azonos, tehát úgy is tekinthető, mintha az eredeti foton megduplázódott volna. Az ilyen tulajdonságú fotonok koherensek.

### A lézer működése

A lényeg tehát, hogy most már egy foton helyett kettő van, tehát a fény erősödött. Angolul *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, ami azt jelenti, hogy fényerősítés indukált emisszió révén, az első betűkből származik a LASER, magyarul lézer. Azonban annak is van esélye, hogy a foton egy olyan atommal találkozik, ahol az elektron  $E_1$  állapotban van. Ekkor abszorpció jön létre, az elektron  $E_2$  állapotba kerül, a fény gyengül. Ha több elektron van  $E_1$ -ben,

mint  $E_2$ -ben (és általában, egyensúlyi eloszlás esetén ez a helyzet), akkor átlagosan több foton nyelődik el, mint gerjesztődik, nem jön létre erősítés. Tehát el kell érni, hogy az  $E_2$  gerjesztett állapotú atomok száma nagyobb legyen, mint az  $E_1$  alapállapotúaké - ezt *inverz populációnak*, vagy *populáció-inverzió*nak nevezik – és ekkor lesz az indukált emisszió valószínűsége nagyobb, mint az abszorpcióé: egy nem-egyensúlyi eloszlást, populáció-inverziót kell létrehozni. Ezt úgy érik el, hogy valamilyen módon többlet energiát pumpálnak a rendszerbe és felhasználnak más nívókat (pl.  $E_3$  energiaszint) is.

Példa: Rubinlézer (szilárdtest lézer). Anyaga krómoxiddal szennyezett alumínium oxid, a mesterségesen növesztett egykristályból hengert csiszolnak. Nagyintenzitású fényimpulzussal gerjesztik az  $E_3$  nívót, ezután úgynevezett sugárzásmentes átmenet történik az  $E_2$  nívóra  $10^{-7}$  s alatt. Mivel az  $E_2$  egy metastabil nívó és élettartama  $\sim 10^{-3}$  s, így létrejön a populáció inverzió, az  $E_2$  és  $E_1$  közötti lézerátmenet során  $\lambda = 694,3$  nm-es sugárzás jelenik meg. A rubinlézer impulzusüzemű lézer, azaz rövid impulzusokban bocsájtja ki a fényt.



A rubinlézer működésének vázlata az energiaszintek segítségével

Gyakran használják még a He-Ne gázlézert is, amely folytonos üzemű.

A lézerfény tulajdonságai:

nagyfokú monokromatikusság (a fotonok frekvenciája lényegében megegyezik),  
kismértékű divergencia (széttartás),  
nagyfokú térbeli és időbeli koherencia,  
nagy felületi teljesítménysűrűség (lencsével  $10^{-8}$  m<sup>2</sup>-es felületre fókuszálható),  
nagy spektrális teljesítménysűrűség (mivel egy adott frekvenciára koncentrálódik az összes energia).

Lézerek alkalmazásai:

megmunkálás, fúrás, ponthegesztés,  
műtéti beavatkozás, sebészet retina ponthegesztés,  
génsebészet,  
vonalkód leolvasó berendezés,  
CD-DVD lemezejátszó lézer olvasófej,  
interferencián alapuló hosszúság, és sebességmérés,  
holográfiára alkalmas fényforrás, (Gábor Dénes: holográf = teljes kép).