

Atomfizika

Csanád Máté

2019. november 12.

Tartalomjegyzék

| | |
|---|-----------|
| 1. Az atomelmélet és az első atommodellek | 4 |
| 1.1. Kémiai reakciók és az atomelmélet | 4 |
| 1.2. Az elektron felfedezése, a Thomson-modell és az elemi töltés | 6 |
| 1.3. A hatáskereszmetszet | 8 |
| 1.4. Szóródás centrális erőterben | 10 |
| 1.5. Az atommag felfedezése, a Rutherford-modell | 12 |
| 1.6. Az atomok mérete és tömege | 13 |
| 2. Atomosság és kvantáltság makroszkópikus jelenségekben | 14 |
| 2.1. Brown-mozgás | 14 |
| 2.2. Sörétzaj | 16 |
| 2.3. Sűrűségingadozások gázokban | 17 |
| 2.4. Fényszóródás | 18 |
| 2.5. Energiaeloszlások gázokban | 20 |
| 2.6. Feketetest-sugárzás | 22 |
| 3. Az atomok energiaszintjei és az első kvantált atommodellek | 22 |
| 3.1. Gázok abszorpciós és emissziós vonalai | 22 |
| 3.2. Az atomok energiaszintjei | 24 |
| 3.3. A Bohr-modell | 26 |
| 3.4. Az atomok mágneses momentuma és perdülete | 27 |
| 3.5. A Sommerfeld–Wilson-féle kvantálás, a „régikvantumelmélet” | 29 |
| 3.6. A hidrogénatom Sommerfeld-modellje | 31 |
| 4. Az elektromágneses sugárzás részecsketermészete | 32 |
| 4.1. A fény hullámtermészete | 32 |
| 4.2. A fotoelektromos jelenség | 33 |
| 4.3. Az elektromágneses sugárzások kettős természetű | 35 |
| 4.4. A Compton-jelenség | 35 |
| 4.5. Kísérletek a fény természetének megállapítására | 38 |
| 4.6. Az elektromágneses tér termodinamikája | 39 |
| 4.7. A Planck-törvény levezetése és alkalmazásai | 41 |
| 4.8. A foton impulzusa, Doppleres hűtés és Mössbauer-jelenség | 42 |
| 5. Anyaghullámok | 44 |
| 5.1. Elektronok elhajlása | 44 |
| 5.2. Atom- és molekulanyalábok elhajlása | 45 |
| 5.3. Terjedési amplitúdó és hullámfüggvény | 48 |
| 5.4. Határozatlanság és hullámcsomagok | 49 |
| 5.5. A kvantummechanika értelmezései, rejtett változók vizsgálata | 50 |

| | |
|---|-----------|
| 6. A kvantummechanika alapjai | 52 |
| 6.1. A kvantummechanika matematikai képe | 52 |
| 6.2. A fizikai mennyiségeknek megfelelő operátorok | 54 |
| 6.3. A Schrödinger-egyenlet | 56 |
| 6.4. A harmonikus oszcillátor | 57 |
| 6.5. A valószínűségi áram | 58 |
| 6.6. A Schrödinger-egyenlet alkalmazásai | 58 |
| 6.7. Az időfüggetlen perturbációs számítás | 61 |
| 7. Perdület és sajátperdület a kvantummechanikában | 61 |
| 7.1. A pályaperdület kvantálása | 62 |
| 7.2. A perdület és a forgatások kapcsolata | 63 |
| 7.3. A spin és a giromágneses faktor | 64 |
| 7.4. A spin mint kvantumtulajdonság, a Pauli-egyenlet | 66 |
| 8. A hidrogénatom részletes spektruma | 69 |
| 8.1. A hidrogénatom a Schrödinger-egyenlet alapján | 69 |
| 8.2. A finomfelhasadás | 72 |
| 8.3. A hiperfinom felhasadás | 74 |
| 8.4. A Lamb-féle eltolódás | 75 |
| 8.5. Többelektronos atomok szerkezete | 76 |

„Általában az alábbi módon keressük az új természeti törvényeket. Első lépésben felteszünk egy elméletet. Aztán megvizsgáljuk a feltételezésünk következményeit, hogy lássuk, mit jelentene, ha az elméletünk igaz lenne. Majd a számítások eredményeit összehasonlítjuk a Természettel, közvetlenül a megfigyelésekkel, kísérlet vagy tapasztalat által, hogy lássuk, működik-e. **Ha ellentmond a kísérleteknek, akkor az elméletünk hibás.**

Ebben az egyszerű állításban van a tudomány kulcsa. Nem számít, milyen szép az elméletünk, nem számít, milyen okosak vagyunk, hogy ki találta ki az elméletet, hogy őt hogy hívják – ha ellentmond a kísérleteknek, akkor hibás.”

Richard P. Feynman

1. Az atomelmélet és az első atommodellek

1.1. Kémiai reakciók és az atomelmélet

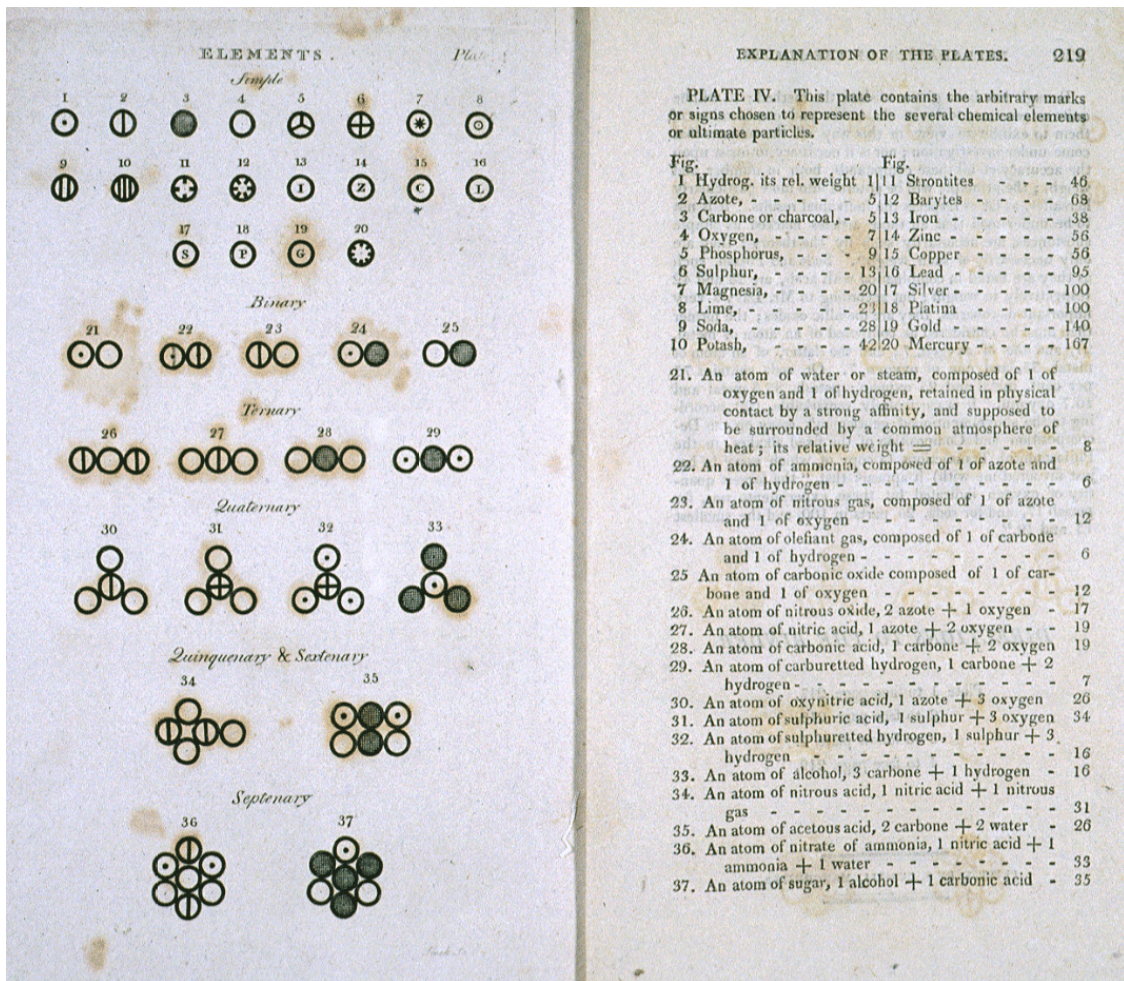
Bár az atomelmélet filozófiai értelemben az ókori Görögországból származik, természettudományos értelemben a XIX. század elejére datálhatjuk megjelenését. Az első kísérleti előjelek a kémiai reakciókban mutatkoztak meg, alább ezeket soroljuk fel:

- Lavoisier, 1789: **tömegmegmaradás kémiai reakciókban**. Lavoisier arra jött rá, hogy kémiai reakciókban a reagensek és a termékek tömege azonos (ma már természetesen tudjuk, hogy az energianyereség tömegvesztéssel járhat, de ez kémiai reakciók esetén elhanyagolható hatás).
- Proust, 1799: **állandó arányok törvénye**. Proust azt állapította meg, hogy vas-oxidban a vas és az oxigén aránya mindig ugyanannyi, és ez igaz mindenféle, ónnal, higanyal, ólommal és mindenféle egyéb anyaggal lefolyó kémiai reakcióra.
- Dalton, 1804: **többszörös arányok törvénye**. Dalton ón-oxiddal (SnO) és ón-dioxiddal (SnO_2) kísérletezett, és Dalton azt találta, hogy 100 g ónhoz 13,5 g vagy 27 g oxigénre van szükség (illetve ennyire bomlik), azaz az arány 1:2. Ehhez hasonlóan azt vehetjük észre, hogy nitrogén és oxigén keverésekor 1 gramm nitrogénre a végterméktől (N_2O , N_2O_3 , NO , NO_2 , stb.) függően különböző mennyiségű oxigén jut, és az oxigén aránya a különböző végtermékek esetén kis egész számok szerint adódik, 1:2, 2:3, 1:4, stb. Egyszerű molekuláknál ez kiválóan működik, bonyolult szénhidrogénekénél (pl. $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ és $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$, itt 121:120 a H aránya) már nem annyira.
- Dalton ez alapján megalkotta az **atom-elméletet** (1. ábra). Szerinte minden kémiai elem egyedülálló és egyedi atomokból áll, amelyeket nem lehet kémiai módon lebontani vagy megváltoztatni. Néhány tévedése volt: nem tudta, hogy létezik H_2 típusú molekula, illetve azt hitte, bármely két elemből a legegyszerűbb molekula az 1:1 arány képzése során jön létre. A méréseiben is volt jelentős hiba, például az oxigén és a hidrogén tömegarányát 5,5-nek hitte, aztán későbbi mérések alapján 7-nek.
- Avogadro, 1811: **Avogadro törvénye**, amely szerint azonos térfogatú gázok azonos hőmérsékleten és nyomáson azonos mennyiségű molekulát tartalmaznak (azaz a térfogat nem függ a molekulatölemtől). Avogadro ez alapján ki tudta következtetni a kétatomos, egy elemből álló molekulák természetét. Például két liter hidrogéngáz egy liter oxigéngázzal reagál, és ebből két liter gőz lesz, azaz az oxigénmolekulák felbomlanak. Ez alapján pontosabban meg tudta határozni az atomok tömegét, illetve megkülönböztette az elemeket és a molekulákat.

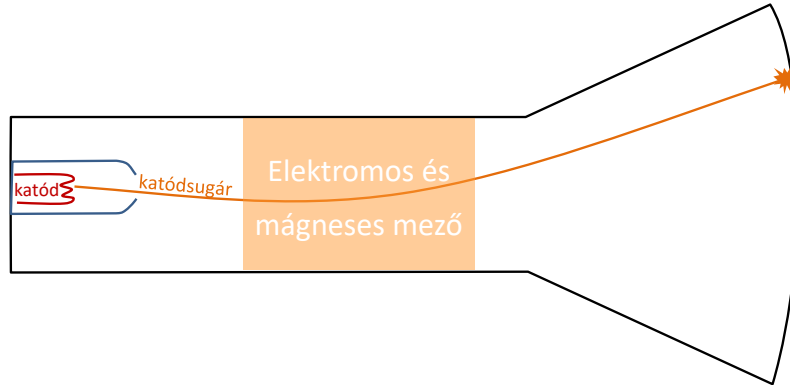
Az atomelmélet a 19. század folyamán nem nyert elismerést, pusztán hipotézisnek vették, amelynek nincs köze a valósághoz (Ez ma aktuálisabb, mint valaha: mennyire valóságosak a mai elemi részecskék, extra dimenziók, kölcsönhatási terek, illetve mennyire csak elméleti konstrukciók, amelyek segítenek leírni a valóságot? Van egyáltalán különbség?)

A mai értelemben vett atomok létezése még a XIX. század második felében sem egyértelmű. Lord Kelvin 1867-es „Atomi vortexek” című tanulmányában amellettt érvel, hogy az atomok valójában az éter (ld. a fénysebesség kutatását és a relativitáselmélet történetét) csomósodásai. Elméletével sokféle jelenséget le tudott írni – a csomók rezgései és kölcsönhatásai jól magyarázták a megfigyeléseket. Az elmélet mögött érdekes matematika is húzódott (amelyben Peter Trait segített Lord Kelvinnek), de ennek részleteit csak később tártak fel: a csomók elmélete ma is aktívan kutatott matematikai tudományterület. Ez a történet kiváló példa arra, amikor amikor az fizikai elegancia és a matematika sajnálatos módon nem találkozik a kísérleti igazság később napvilágra kerülő részleteivel. (Érdekes kérdés, hogy a bizonyos aspektusok tekintetében hasonló helyzet merre fejlődik majd a hűrelmélet, a részecskefizika és a gravitáció tekintetében.) Nézzünk azonban néhány további kísérleti bizonyítékot, amelyet a mai értelemben vett atomelmélet kiválóan meg tudott magyarázni:

- Brown, 1827: **Brown-mozgás**, pollen-részecskék a vízben látszólag ok nélkül véletlenszerűen mozognak. Ez lesz az atomelmélet első elfogadott bizonyítéka később. Részletesebben lásd a következő fejezetben.
- Faraday, 1834: **az elektrolízis törvénye**, az elektródokon képződő anyag tömege (m) arányos az áthaladó elektromos töltésmennyiséggel (Q). Másrészt a töltésmennyiség arányos az



1. ábra. A Dalton-féle atomelmélet. Az első sor elemei sorban (1-8 számokkal jelölve): H, N, C, O, P, S, Mg, Ca. Az ezekből felépített első néhány molekula sorban (21-29-es számokkal): HO, HN, NO, HC, CO, N₂O, NO₂, CO₂, CH₂, stb. Az elmélet néhány molekulát helyesen, másokat hibásan épít fel. Például a CO₂ molekula helyesen szerepel (28-as számmal), míg a vízmolekula helytelenül (HO, 21-es).



2. ábra. A katódsugárcső felépítése. Egy fűtött katódból elektronok lépnek ki, amelyeket a katód és az anód(ok) által létrehozott tér gyorsít. A sugárzást elektromos vagy mágneses mezővel is lehet téríteni, ez volt Thomson felfedezésének legfontosabb pontja.

anyagmennyiséggel is, ez $n = m/M$ -ként fejezhető ki, ha M a mólonkénti tömeg. Ez alapján:

$$Q = ZFn = Z \frac{F}{M} m \quad (1)$$

ahol Z egész szám (később kiderült, hogy ez a kötési elektronok száma), és $F = 9,65 \cdot 10^4$ C/mol, a Faraday-féle állandó. Ez egyszerűen az elemi töltés és az Avogadro-állandó szorzata, mint később kiderült ($1,6 \cdot 10^{-19}$ C \times $6 \cdot 10^{23}$ / mol).

1.2. Az elektron felfedezése, a Thomson-modell és az elemi töltés

J. J. Thomson 1897-es, **katódsugarakkal** végzett kísérletéig az volt az elképzelés, hogy az anyag legkisebb, oszthatatlan egységét az atomok alkotják. A Crookes-csővel végzett vizsgálatok során (lásd 2. ábra) kiderült, hogy a katódsugarakat, amelyek fényt keltenek a fluoreszcens rétegen, eltéríti az elektromos tér. Ez alapján leszűrte, hogy ezek a sugarak **nem a fény egy formáját** jelentik, hanem könnyű, **negatív töltésű részecskékből**, „korpuzkulákból” állnak. Thomson azt hitte, hogy a részecskék a gáz molekuláiból válnak ki, azaz az atom felosztásának vélte a jelenséget. A részecskéket később nevezték el elektronoknak. A kísérletet mágneses térrel kiegészítve, a Lorentz- és a Coulomb-erő felhasználásával Thomson megmérte az elektronok töltés/tömeg arányát is. Miután az elektromos tér okozta gyorsulás $a = F/m = eE/m$, a repülési idő $t = l/v$, a mágneses tér okozta Lorentz-erő pedig a centripetális erővel egyezik meg ($mv^2/r = evB$), így a következőket kapjuk:

$$\text{Elektromos térben az eltérülés: } y = \frac{1}{2}at^2 = \frac{eEl^2}{2mv^2}. \quad (2)$$

$$\text{Mágneses térben a pályasugár: } r = \frac{mv}{eB}. \quad (3)$$

$$\text{A kettő mérésével: } \frac{e}{m} = \frac{El^2}{2B^2yr^2}. \quad (4)$$

Így a (nehezen mérhető) sebesség ismerete nélkül megkapható a töltés/tömeg arány. Thomson konkrét mérésének a lényege az volt, hogy az adott elektromos tér miatti ϕ eltérülést éppen kioltó mágneses tért állított be. Ha a két erő éppen kioltja egymást, akkor $E = vB$, azaz a sebesség a kettő hányadosa, $v = E/B$. Ekkor az elektromos tér miatti eltérülést mérte, és ebből határozta meg a töltés/tömeg arányt:

$$\text{Az elektromos eltérülés: } \phi = \frac{y}{l} = \frac{eEl}{2mv^2} \quad (5)$$

$$\text{Innen a sebesség ismeretében: } \frac{e}{m} = \frac{2\phi v^2}{El} = \frac{2E\phi}{B^2l} \quad (6)$$

Így ehhez az r pályasugár helyett az eltérülés ϕ mértékére van szükség – érdekes végiggondolni, hogy ez és az előző módszer matematikailag szinte ugyanaz, ugyanakkor mérés technikailag mégis különbség van köztük! A mérés eredménye szerint az elektron tömeg/töltés aránya három nagyságrenddel kisebb a H^+ ionénál. Miután a töltésük megegyezik (ahogy azt ma tudjuk), ezért ez a H atomnál ezerszer könnyebb részecskét jelent. Az eredmények fontos pontjai közé tartozott az is, hogy a töltés/tömeg arány nem függ a kibocsátó katódtól, illetve a radioaktív anyagokból kijövő sugárzás is ugyanebbe a kategóriába tartozik. Álljon alább egy idézet Thomsontól:

„A katódsugarak negatív elektromos töltést hordoznak: eltérülnek az elektrosztatikus erő hatására, mint ha negatív elektromosságuk lenne, hat rájuk a mágneses erő éppen úgy, mint ahogy hasonló pályán mozgó negatív töltésű testekre hatna. Nem látok tehát más lehetőséget, mint hogy arra következtessünk, hogy a katódsugarak negatív töltést hordozó anyagi részecskékből állnak.” (Cathode rays, Philosophical Magazine, 44, 293 (1897).)

Gyakorló feladat

Egy ismeretlen részecske 50 cm hosszú pályán 100 kV/m elektromos tér hatására 0,5 fokkal térül el. Ezt az eltérülést 5 mT mágneses térrel tudjuk kompenzálni (ha a mágneses tér merőleges az elektromos térre és a részecske sebességére is). Mi ezen részecske töltés/tömeg aránya, illetve milyen típusú részecske lehet?

1902-ben Kaufmann béta-sugárzással azt találta, hogy nagyon gyors elektronokra ez az arány változik, amit Hupka és Bucherer mérései megerősítettek – nem volt azonban egyértelmű a változás mértéke. Einstein relativitáselméletének jóslata szerint a test tehetetlensége és egyúttal energiája egy $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ faktorial változik, ha v sebességgel halad. Ez a gondolat nem volt gyökeresen új, hiszen korábban is voltak feltételezések arra nézve, hogy egy elektromos sugárzással töltött térfogat úgy viselkedik, mintha tehetetlen tömege lenne. Einstein forradalmi gondolata szerint azonban minden energiához tehetetlen tömeg tartozik. Günther Neumann 1914-es, illetve Guye és Lavanchy 1915-ös mérései azt mutatták, hogy a v sebességű elektron tehetetlensége éppen az einsteini formulának megfelelően változik meg, tehát a tömeg/töltés arány $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ faktorial nő.

Katódsugaras kísérleteinek értelmezése alapján Thomson 1904-ben megalkotta a „plum pudding” névvel illetett **első atommodell**t (amelyért Nobel-díjban részesült). Ebben az atom egy pozitív töltésű levesből áll, amelyben úsznak a negatív töltésű elektronok. Ezt az 1909-es aranyfóliával végzett szórás kísérlet cáfolta, lásd a következő alfejezetben.

A lehető legkisebb töltés mértékét Robert A. Millikan vizsgálta a XX. század első éveiben, majd 1913-ban publikálta ezzel kapcsolatos mérései eredményét (miután doktorandusza, Harvey Fletcher javaslatai alapján korrigálta az elrendezést, aki gyorsan elpárolgó vízpára helyett olaj használatát javasolta), amelynek következtetéseként egyfajta **elemi töltés** létezését állapította meg, illetve lényegében megmérte az elektron tömegét. (És ezért 1923-ban Nobel-díjban részesült.) Kísérletében porlasztott olajcseppekre ható elektromos erőt mérte sebességük megfigyelésén keresztül. A Newton-egyenlet az egyenletesen mozgó olajcseppekre felírva így néz ki (figyelembe véve a Stokes-törvényt adta közegellenállást):

$$mg - F_{\text{fel}} = \frac{4\pi r^3}{3}(\rho_{\text{olaj}} - \rho_{\text{lev.}})g = 6\pi\eta r v_0, \quad (7)$$

ahol m a cseppek tömege, r a mérete, ρ a sűrűség, η a levegő viszkozitása, v_0 a cseppek állandó sebessége. A cseppek mérete innen kiszámítható: $r^2 = 9\eta v_0 / (2g\Delta\rho)$. Ha ezekre a Q töltésű cseppekre E térerősséget kapcsolunk, a sebességük v lesz, és a fenti egyenlet így módosul:

$$\frac{4\pi r^3}{3}(\rho_{\text{olaj}} - \rho_{\text{lev.}})g + QE = 6\pi\eta r v, \quad (8)$$

azaz

$$Q = 6\pi\eta r(v - v_0)/E \quad (9)$$

lesz a töltésük. Értelemszerűen $+E$ és $-E$ térerősséget is kipróbálhatunk, ekkor a fenti formulában $(v_+ - v_-)/2E$ jelenne meg – de ez nem változtat érdemben a kísérleten. Mindenesetre a fenti egyenletbe visszahelyettesíthetjük az előzőekben kapott cseppméretet. Millikan végeredményben azt találta, hogy a töltések mindig egy $e = 1,592(2) \cdot 10^{-19}$ C konstans egész számú többszöröse. Ennek mai pontos értéke $1,60217649(4) \cdot 10^{-19}$ C. A jelenség jelentése az, hogy a természetben csak e egész számú többszöröse jelenhetnek meg, és ez az elektron illetve az atom további építőköveinek a töltése. Ezen mérés kapcsán érdemes felidézni Feynman kommentárját (ld. „Surely You’re Joking, Mr. Feynman!”):

„Millikan megmérte az elektron töltését olajcseppek zuhanását vizsgáló kísérletében, és eredménye enyhén pontatlan volt. ... Érdekes megnézni az elektron töltésére vonatkozó, Millikant követő méréseket. Ha az idő függvényében ábrázoljuk ezeket, látjuk, hogy az első kicsit nagyobb Millikan értékénél, a következő még nagyobb, és így tovább, míg egy bizonyos, Millikan értékénél nagyobb számnál meg nem állapodnak. Miért nem mérték egyből helyesen az értéket? ... Amikor a kísérlet vezetője Millikanénél lényegesen nagyobb számot kapott, azt gondolta, biztos valamit rosszul csinált – és megkereste ennek okát. Ha Millikanhez közeli értéket talált, akkor nem olyan alaposan nézte át a kísérletet.”

Később a neutron élettartamával is hasonló történet játszódott le, úgyhogy minden fizikusnak kiemelten oda kell figyelni arra, hogy az ismeretei ne torzítsák a megfigyeléseit.

1.3. A hatáskeresztmetszet

Fizikai hatáskeresztmetszetnek egy adott szórási vagy elnyelési folyamat valószínűségét meghatározó effektív felületet nevezünk. Legyen adott a bejövő áramsűrűség (időegységre és felületegységre vetített részecskeszám, energia vagy valószínűség), amely valamilyen „céltárggyal” találkozik. Ha a folyamatban résztvevő (azaz abban érintett, eltérülő, „kijövő”) részecskék számát (N) vagy az energia mennyiségét (E), esetleg a folyamat valamiféle valószínűségét (P) elosztjuk a bejövő áramsűrűséggel, akkor kapjuk meg a hatáskeresztmetszetet:

$$\dot{N}_{ki} = j_{be}^N \sigma, \quad (10)$$

$$\dot{E}_{ki} = j_{be}^E \sigma, \quad (11)$$

$$\dot{P}_{ki} = j_{be}^P \sigma. \quad (12)$$

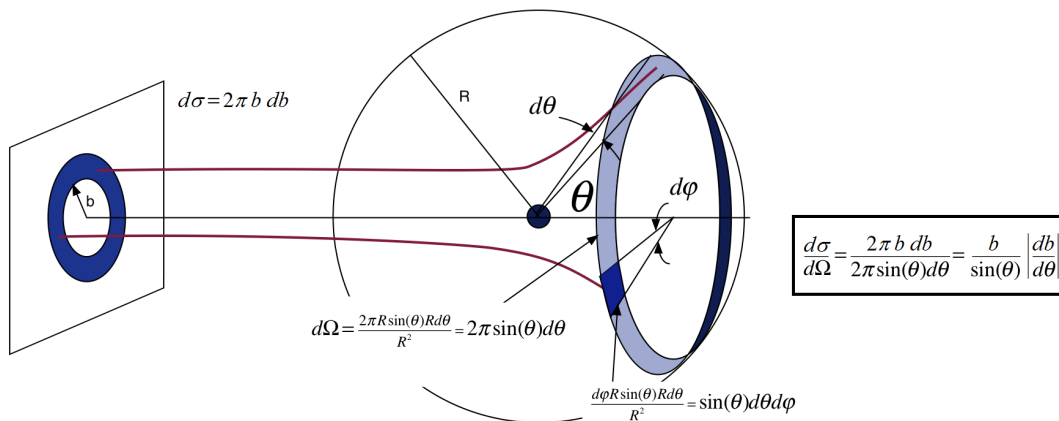
A következőkben a részecskeszámmal megadott definíciót járjuk körül jobban (de tartsuk észben, hogy a bejövő áramsűrűség lehet az energia vagy más fizikai mennyiség sűrűsége is, és a kvantummechanikában például a valószínűség-áramon keresztül adhatjuk majd meg a hatáskeresztmetszetet).

Elemi folyamatnak azt az esetet nevezzük, ha csak két részecske vesz részt a folyamatban, például egyszerű ütközés nyomán. Ilyenkor az időegységenkénti bekövetkezések, azaz az időegységenként „kijövő” részecskék száma \dot{N}_{ki} száma megegyezik az időegységenként bejövő részecskék \dot{N}_{be} időegységenkénti számával, megszorozva az ütközés valószínűségével. Ez a valószínűség úgy kapható meg, hogy elosztjuk az összes $N_{\text{céltárgy}}$ darab céltárgyrészecske által nyújtott felületet ($N_{\text{céltárgy}} \cdot \sigma$) a teljes nyalábkeresztmetszettel (A). Itt az egy céltárgyrészecske által nyújtott felület az úgynevezett **hatáskeresztmetszet** (σ), és ez alapján:

$$\dot{N}_{ki} = \dot{N}_{be} \cdot \langle \text{ütk. val.} \rangle = \dot{N}_{be} \frac{N_{\text{céltárgy}} \sigma}{A} = j_{be} N_{\text{céltárgy}} \sigma \quad (13)$$

ahol tehát A a nyaláb keresztmetszete és σ a folyamat hatáskeresztmetszete, továbbá a bejövő áramsűrűség $j_{be} = \dot{N}_{be}/A$ módon írható fel. Úgy is fogalmazhatunk, j bejövő energiaáram-sűrűségből kiindulva, hogy a „kiszóródott” teljesítmény mértéke $P_{ki} = j_{be} \sigma$, vagy általánosan, tetszőleges mennyiség Φ fluxusával kifejezve $\Delta \Phi = -\Phi \sigma / A$, ahol $\Delta \Phi$ a szóródás miatti fluxusváltozás és A a bejövő nyaláb keresztmetszete. Fontos továbbá megemlíteni, hogy ha egy A keresztmetszetű, I intenzitású nyaláb közegen halad át, amelynek részecskéivel való ütközésének σ a hatáskeresztmetszete, akkor egy dx vékony rétegen a nyalábintenzitás változása

$$-\frac{dI}{I} = \langle \text{ütk. val.} \rangle = N_{\text{céltárgy}} \frac{\sigma}{A} = n \cdot \sigma \cdot dx, \quad (14)$$



3. ábra. A differenciális hatáskeresztmetszet klasszikus értéke az impact paraméter és a szóródási szög összefüggéséből.

ahol $n = N_{\text{céltárgy}}/(A dx)$ a céltárgyrészecskék számsűrűsége. Innen tehát vékony céltárgyra a nyalábintenzitás megváltozása $dI = I n \sigma dx$, vastag céltárgy esetén pedig a nyalábintenzitás helyfüggése:

$$I(x) = I(0)e^{-n\sigma x}. \quad (15)$$

Ezen felül definiáljuk a **differenciális hatáskeresztmetszetet**, többnyire a térszögegységenkénti hatáskeresztmetszetként, ennek jelölése $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi)$, ahol Ω a térszöget jelöli, és ez azt jelenti, hogy egy adott (θ, ϕ) irány esetén (ahol θ a polár-, ϕ az azimut szöget jelöli) az ekörül infinitezimális $d\Omega$ térszögtartományba történő szóródáshoz mekkora infinitezimális felület tartozik. Ezt úgy értjük, hogy egy adott irányban elhelyezkedő $\Delta\Omega$ tartományba érkező részecskék száma

$$\dot{N}_{\text{ki}, \Delta\Omega} = j_{\text{be}} N_{\text{céltárgy}} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega \quad (16)$$

Praktikus gömbi koordinátákban felírni ezt, itt $d\Omega = d\phi \sin\theta d\theta$ a térszögelem, illetve ϕ -ben vett forgási szimmetria esetén (amely többnyire fennáll, hiszen a szórócentrumok véletlenszerűen orientáltak, ráadásul gömbszimmetrikusak) $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$, és ekkor $d\sigma/d\Omega$ csak a θ változótól függ.

Legyen egyetlen szórócentrumunk ($N_{\text{céltárgy}} = 1$), és vegyük az ezzel kölcsönhatásba lépő részecskenyalábot, amelynek b impact paraméterrel érkező részecskéi θ szögben haladnak tovább. Ha a bejövő nyaláb b és $b + db$ intervallumba eső részét nézzük, ez egy θ és $\theta + d\theta$ szögtartományba történő szóródásnak felel meg. Ekkor a bejövő részecskék egy $2\pi b db$ felületen oszlanak el, tehát $j_{\text{be}} = \dot{N}_{\text{be}}/2\pi b db$. Ugyanezen részecskék a szóródás után egy $\Delta\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ térszögbe érkeznek, ekkor tehát $\dot{N}_{\text{be}} = \dot{N}_{\text{ki}}$, és mivel egy szórócentrummal számoltunk, így a fentiek és a (16) egyenlet alapján

$$\dot{N}_{\text{ki}} = \frac{\dot{N}_{\text{be}}}{2\pi b db} \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin\theta d\theta, \text{ azaz} \quad (17)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|, \quad (18)$$

ahol az abszolútértékre azért van szükség, mert növekvő b esetén θ csökken. A levezetés illusztrációjaként lásd a 3. ábrát. Fontos látni ugyanakkor, hogy ezen egyszerű modellben a kijövő és a bemenő részecskék száma azonos, azaz itt **mindenki szóródik**, avagy a teljes hatáskeresztmetszet végtelennek tekinthető!

Gyakorló feladat

Egy részecskenyaláb szórását figyeljük meg. A részecskék 1%-a szóródik az 5 cm vastag, 10^{23} db/cm³ számsűrűségű céltárgyon. Mekkora volt a hatáskeresztmetszet? Hogy viszonyul ez egy tipikus atommag keresztmetszetéhez?

1.4. Szóródás centrális erőtérben

Vizsgáljuk meg ezután a centrális erőtérben való szóródást, illetve az ott tapasztalt $b(\theta)$ összefüggést (azaz hogy adott b impakt paraméterrel érkező részecske milyen θ szöggel halad tovább). Írja le egy részecske pályáját az $(r(t), \theta(t))$ függvény. Ekkor a centrális erőtér miatt a gyorsulás kizárólag sugárirányú, és a centrumtól vett távolság második deriváltjából továbbá a centripetális gyorsulásból kiszámítva

$$a = a_r = \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 \quad (19)$$

módon adódik. Az időfüggést kezeljük úgy, hogy definiáljuk az

$$u = \frac{1}{r} \circ \theta^{-1} \quad (20)$$

függvényt (ahol a $^{-1}$ a függvényinverzet jelöli, és ezzel a (θ, r) koordinátákra egy $(\theta(t), u(\theta(t)))$ pályát írhatunk fel. A reakciósiókban vett polárszög $\theta(t)$ időfüggését továbbra is az előzőeknek megfelelően kezeljük. (A reakciósióból pedig a centrális erőtér miatt nem tér ki az ütköző részecske.) Ekkor a hely deriváltja az $r(t) = 1/u \circ \theta$ összefüggésből adódik, a perdület $J = mr^2\dot{\theta} = m\dot{\theta}/u^2$ definícióját is felhasználva:

$$\dot{r} = -\frac{u'}{u^2}\dot{\theta} = -u'\frac{J}{m}, \quad (21)$$

ahol a szokásos fizikus egyszerűsítő rendszerben egyes tagok vagy tényezők végére még egy $\circ\theta$ kifejezést oda kell képzelni (hogy a fenti függvényekre vonatkozó egyenletben minden tag végső soron tisztán időtől függjön, különben nem lehet összeadni őket szigorúan matematikai értelemben – erre általában nem szoktunk odafigyelni, és többnyire nem is kell). A második derivált ezek után a perdület megmaradása ($\dot{J} = 0$) miatt, illetve a $\dot{\theta} \leftrightarrow J$ kapcsolatot kihasználva

$$\ddot{r} = -u''\dot{\theta}\frac{J}{m} = -u''u^2\frac{J^2}{m^2}. \quad (22)$$

A gyorsulás fenti $a = \ddot{r} - r\dot{\theta}^2$ kifejezésében a második tagban a perdület definíciója miatt $r\dot{\theta}^2 = u^3J^2/m^2$, így a Newton-egyenlet végső soron a következőképpen írható át:

$$F = ma = -\frac{u^2J^2}{m}(u'' + u), \text{ azaz } u'' + u = -\frac{Fm}{J^2u^2} \quad (23)$$

ahol utóbbit Binet-egyenletnek nevezzük. Érdemes itt észrevenni, hogy $1/r^2$ -es erőterek esetén F/u^2 állandó, így a fenti egyenlet megoldása egyszerűen szinusz- és koszinuszfüggvény összegeként adódik.

Coulomb-kölcsönhatás ($F = kq_1q_2u^2$) esetén, a perdületet a kezdeti sebességgel és az impakt paraméterrel $J = mvb$ módon felírva

$$u'' + u = -k\frac{q_1q_2}{mv^2b^2} = -\kappa \text{ (konstans)} \quad (24)$$

adódik, ahol $q_{1,2}$ töltések, k pedig a Coulomb-állandó. Ennek megoldása

$$u(\theta) = c_1 \cos \theta + c_2 \sin \theta - \kappa. \quad (25)$$

Gondoljuk meg, hogy mivel $\theta = \pi$ esetén $u = 0$ igaz, (az $r \rightarrow \infty$ pontból jön a nyaláb), ezért $c_1 = -\kappa$ és $u(\theta) = -\kappa(\cos \theta + 1) + c_2 \sin \theta$ adódik. Figyelembe véve, hogy (ahogy fentebb írtuk) $u' = -m\dot{r}/J$, a $\theta = \pi$ esetre (azaz kezdetben):

$$u'(\theta = \pi) = -\frac{mv}{J} = -\frac{1}{b} \quad (26)$$

adódik, ahonnan $c_2 = 1/b$. Az ennek is megfelelő megoldás az

$$u = -\kappa(\cos \theta + 1) + \frac{1}{b} \sin(\theta) \quad (27)$$

formában adódik. Figyelembe véve, hogy $\theta \neq \pi$ esetén

$$\sin \theta = \frac{2\text{tg}(\theta/2)}{1 + \text{tg}^2(\theta/2)} \quad \text{és} \quad \cos \theta + 1 = \frac{2}{1 + \text{tg}^2(\theta/2)}, \quad (28)$$

u fenti kifejezését b -vel szorozva adódik, hogy

$$ub = -\frac{2\kappa b}{1 + \text{tg}^2(\theta/2)} + \frac{2\text{tg}(\theta/2)}{1 + \text{tg}^2(\theta/2)}. \quad (29)$$

Ezek után a szóródás szögét az $u(\theta) = 0$ egyenlet megoldásai adják meg, hiszen az a kérdés, hogy $r = \infty$ milyen θ szögek esetén valósul meg – nyilván az egyik a $\theta = \pi$ lesz. A fenti egyenlet alapján u két pontban lesz nulla a $[0, \pi]$ intervallumon: $\theta = \pi$ (ez az eredeti egyenletből, avagy a kezdeti feltételből adódik) és $\theta = 2 \arctan(b\kappa)$ értékeknél. Az első a bejövő nyaláb szöge, a második a kirepülő részecskéé. Az eltérülési szög éppen a második, és erre (az $E = mv^2/2$ mozgási energia bevezetésével):

$$\text{tg} \frac{\theta}{2} = k \frac{q_1 q_2}{mv^2 b}, \quad \text{azaz} \quad (30)$$

$$b = k \frac{q_1 q_2}{2E} \text{ctg} \frac{\theta}{2}. \quad (31)$$

Vegyük észre, hogy tehát kis θ szöghöz itt nagy impakt paraméter (b) tartozik, és fordítva. A fentieket a (18) egyenletbe helyettesítve $\text{ctg}' = -\sin^{-2}$ miatt azt kapjuk, hogy

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k \frac{q_1 q_2}{2E} \text{ctg} \frac{\theta}{2}}{\sin \theta} k \frac{q_1 q_2}{4E} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} = \left(k \frac{q_1 q_2}{2E}\right)^2 \frac{1}{4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{k q_1 q_2}{E}\right)^2 \frac{1}{16 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (32)$$

Ez tehát a rögzített q_1 töltésű részecske elektromos terében szóródó v sebességű vagy E energiájú, q_2 töltésű részecskék differenciális hatáskeresztmetszete, ezt Rutherford- vagy Coulomb-szórásnak is hívjuk.

Fontos látni, hogy ez θ -ra integrálva (0 és π között, vagy a $\theta = 0$ pontot tartalmazó bármilyen, „jobbra” nyílt halmazon) végtelent ad, tehát ennek a szórásnak végtelen a teljes hatáskeresztmetszete, azaz bármilyen távolságban érzékelik a nyaláb, *valamennyire* mindenképpen eltérül, azaz mindenképpen sor kerül reakcióra (a Coulomb-kölcsönhatás végtelen hatótávolsága miatt). Ez a végtelen úgy értelmezhető például, hogy ha bejön N_{be} darab részecske, akkor a *teljes* térre nézve ezek áramsűrűsége nulla, és ezt szorozzuk a végtelen hatáskeresztmetszettel. Ugyanakkor véges, de az összes bejövő részecskét tartalmazó felületre „regularizálva” a kifejezést, az $N_{\text{be}} = N_{\text{ki}}$ összefüggésre jutunk. Ezt a kvantumelméletben tapasztalt véges hatáskeresztmetszetekkel érdemes összehasonlítani, amely az erők (a magerő vagy az erős kölcsönhatás) véges hatótávolsága miatt van.

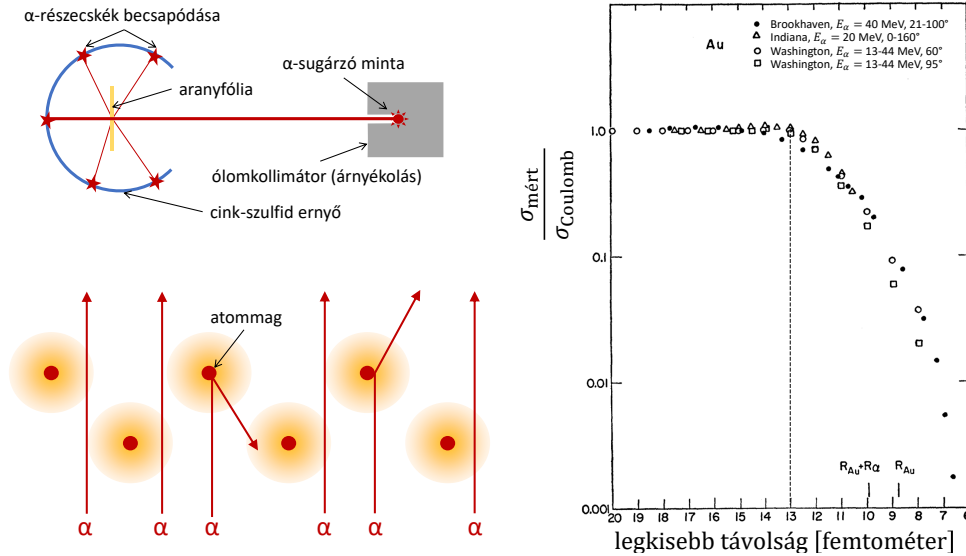
Érdemes azt is megemlíteni, hogy folytonos mezők szórásának elméleteiben (például a kvantummechanikában) \mathbf{k} hullámszám-vektorral rendelkező síkhullám szórása esetén a kimenő hullámot

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (33)$$

módon, a továbbfutó síkhullám és a hozzá képest $f(\theta)$ *szórási amplitúdójú* gömbhullám összegeként írható fel. Ezzel a differenciális hatáskeresztmetszet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (34)$$

módon adódik. A szórási amplitúdó viszont, mint kiderül, az úgynevezett Born-közelítésben a szóró potenciál $\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{K} = \mathbf{k}_{\text{be}} - \mathbf{k}_{\text{ki}}$ változókkal elvégzett Fourier-transzformálásával kapható meg – szórási kísérletekben tehát tulajdonképpen a potenciál alakját mérhetjük meg. Ezen a ponton idézzük fel, hogy az $1/r$ Coulomb-potenciál Fourier-transzformáltja az $1/\mathbf{K}^2$ kifejezéssel arányos módon adódik (ha a rendes, disztribúciókon vagy négyzetesen integrálható függvényeken vett Fourier-transzformáltat vesszük, nem az egyszerű, integrálható függvényekre felírt verziót), és mivel



4. ábra. A Rutherford féle kísérlet. Az (a) ábrán a kísérleti elrendezés, a (b)-n a magyarázatának illusztrációja látható. A (c) ábra az, ami tudományosan is bizonyítja az atommag létét. Ez azt mutatja, hogy kis impakt paraméterekre (d) eltérést találunk a Coulomb-kölcsönhatásból számolt Rutherford hatáskeresztmetszettől (σ/σ_{Cb} , ennek oka az, hogy itt már érintkezik a mag és az alfa részecske, és új kölcsönhatások lépnek fel).

$|\mathbf{k}_{be}| \approx |\mathbf{k}_{ki}| \approx k$ közelítésben $|\mathbf{K}| = 2k \sin(\theta/2)$, így a Rutherford-szórás differenciális hatáskeresztmetszetére kapott fenti eredményt egyszerűen visszakapjuk. A teljes hatáskeresztmetszet pedig a szórási amplitúdó nullában vett értékéből (illetve ennek imaginárius részéből)

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(0) \quad (35)$$

módon adódik, ahogy ezzel későbbi tanulmányokban „optikai tétel” címszó alatt találkozunk.

Gyakorló feladat

Egy 6 MeV mozgási energiájú, $3,73 \text{ GeV}/c^2$ tömegű és $-2e$ töltésű részecske 5 femtométeres impakt paraméterrel közelít meg egy 197 GeV tömegű, $-79e$ töltésű szórócentrumot. Mekkora szöggel térül el? (A feladathoz érdemes felhasználni, hogy $ke^2 \approx 1,442 \text{ MeV}\cdot\text{fm}$.)

1.5. Az atommag felfedezése, a Rutherford-modell

Rutherford (Geigerrel és Mardsennel) 1911-ben mérte alfa-bomlásból származó részecskék arany fólián való szóródásában a differenciális hatáskeresztmetszetet (lásd 4. ábra). A Thomson-féle atommodell alapján túlnyomórészt kisszögű szórást vártak, hiszen ha az atom egy egyenletes töltéseloszlású gömb, egy néhány MeV energiájú alfa részecske alig néhány század fok eltérést szenvedhet! Ezzel szemben a részecskék jó része visszaszóródott. Ezt egyfajta **pontszerű maggal** lehetett magyarázni, illetve annak **centrális erőterében** való eltéréssel, ahogy azt alább megmutatjuk.

Egy E energiájú α részecske egy Z rendszámú, (anyagban) rögzített magot a kezdeti mozgási energia és a Coulomb-potenciál egyenlősége ($E = 2kZe^2/d$) alapján $d = 2kZe^2/E$ távolságra tudná megközelíteni (ez pl. 6 MeV-es α -részecske és arany atommag esetén kb. 38 fm távolság), ha $b = 0$ impakt paraméterrel érkezne. Az előző szakaszban kapottakat ezzel kifejezve:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = k^2 \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{d^2}{16 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (36)$$

Rutherford ezzel megegyező differenciális hatáskeresztmetszetet mért, mivel ólom α bomlásból származó nyalábot használt, amelynek energiája nem teszi lehetővé, hogy az α mag és az

arany atommag annyira megközelítsék egymást, hogy a mageró szerepe is megjelenjen. Mindössze annyit tudott megállapítani, hogy az atommag sugara kisebb, mint $3,4 \cdot 10^{-14}$ méter, ami **több nagyságrenddel kisebb**, mint az arany atom 10^{-10} méteres mérete.

Nagyobb energián viszont nagy szögekre (azaz kis impakt paraméterre) eltérést találtak a fenti formulától (lásd a 4.c ábrán), ugyanis ekkora impakt paraméterekre már **nem tekinthető pontszerűnek a mag**, az α részecske lényegében közvetlenül nekiütözik (és így az elektromos kölcsönhatáson kívül a mageró is szerepet játszik). Ez az impakt paraméter a mag méretét jelenti lényegében, illetve a két mag sugarának és a mageró hatótávolságának összege.

A mag tehát egy, az atom \hat{A} nagyságrendű méreténél tíz- vagy százezerszer kisebb objektum, az atom méretét pedig a szinte elhanyagolható tömegű elektronfelhő adja. Kézenfekvő az atomra mint egy miniatűr Naprendszerre gondolni, ahol a gravitációs erő helyébe az elektromos vonzás lép. Ez a **Rutherford-féle atommodell** lényege.

1.6. Az atomok mérete és tömege

Miután áttekintettük az atom és az atommag felfedezését, szenteljünk egy rövid szakaszt ezek méretének és tömegének is. Vegyük először is észre, hogy a móltömeg és az Avogadro állandó ismeretében megkaphatjuk az **atomok tömegét**. Ezt atomi tömegegységben (azaz Daltonban) fejezhetjük például, ez a ^{12}C tömegének $1/12$ -ed részét jelenti. Dalton a hidrogén tömegét javasolta egységnek, később Ostwald az oxigén $1/16$ -át, ez az izotópok felfedezésével problémát jelentett (a természetes oxigénkeverék a kémiai tömegegység, az ^{16}O a fizikai tömegegység volt). 1961-ben vezették be az új egységet, amely már a szén-12 izotópra épült. Ma sokféle tömegspektrográffal (Nier-féle, Mattauch-féle) mérik a tömegeket, a mágneses térben létrejövő körpálya sugara és az impulzus között fennálló $p = qBr$ összefüggés alapján. Az atomok tömege pedig kb. a tömegszám és az atomi tömegegység szorzatával egyezik meg, mert, mint később kiderült, a tömeget a proton és a neutron adja lényegében, ezek számát jelenti a tömegszám. Később, a magfizikai tanulmányok során derül majd ki, hogy az atommag kötési energiája hogyan módosítja ezt.

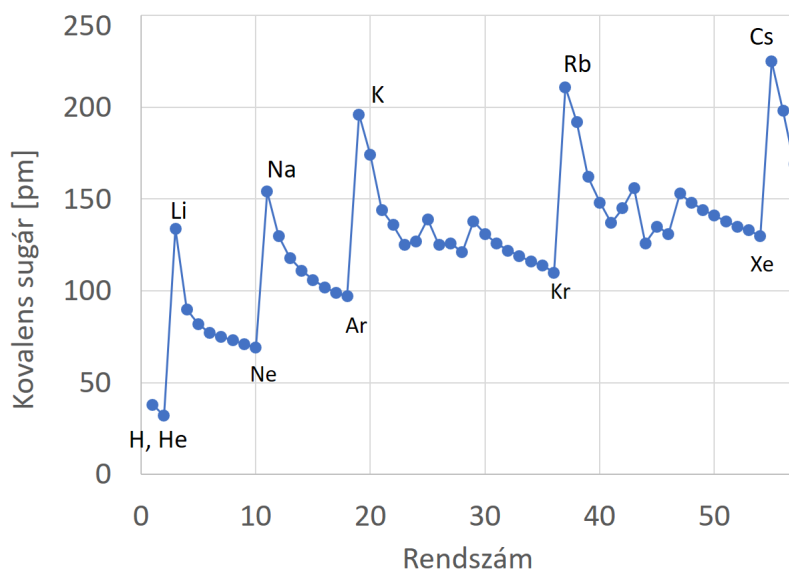
Az **atomok méretének** nagyon sok definíciója van (van der Waals, ionos, kovalens, fémes, Bohr), mindet máshogy lehet mérni. Az értékek nyomásfüggetlenek, az elektronszerkezet határozza meg, és tipikusan 1 \AA , azaz 10^{-10} m avagy $0,1 \text{ nm}$. Az azonos elektronszerkezetű, de különböző maggal rendelkező atomok esetén a méret csökken, ahogy a mag nő, ahogy ezt egy ilyen ionsorra a kristályrácsokban felvett ionos sugár változásával illusztráljuk (a neon nem vesz részt kristályrácsban, ezért hiányzik):

| atom | C^{4-} | N^{3-} | O^{2-} | F^- | Na^+ | Mg^{2+} | Al^{3+} |
|---------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------------|---------------|------------------|------------------|
| méret ($\text{\AA}=0,1 \text{ nm}$) | 2,60 | 1,71 | 1,40 | 1,36 | 0,95 | 0,65 | 0,5 |

Az elektronfelhő mérete növeli az atom sugarát, és a két effektus alapján az alkáli fémek mérete a legnagyobb (távoli külső elektron, kis mag), míg a nemesgázoké a legkisebb (fele-harmada az azonos főkvantumszámú alkáli fémnek), lásd 5. ábra. A hidrogén és a hélium atomok a legkisebbek, méretük kb 30 pm , míg a legnagyobbak közé tartozik a cézium (Cs , $Z = 55$), melynek kovalens sugara kb. $230\text{-}240 \text{ pm}$ (méréstől függően). A még nagyobb rendszámú atomok mérete nehezebben mérhető, de a legtöbb mérésben a cézium vagy a francium a legnagyobb atom (például az uránatom vagy az ólomatom is kisebb a káliumatomnál is)

Az atomok (vagy molekulák) méretét legegyszerűbben a következő **gondolatkísérletből** kaphatjuk meg (amely Marx György „Atommagközélen” könyvében is szerepel). Ha felforraltunk egy m^3 folyadékot, az ekvivalens azzal, hogy a tér három irányában addig szabdaljuk a kockát, míg a részek atomnyi nem lesznek. Ekkor a felületi feszültség ellen dolgozunk, és ha egy molekula d méretű, a kocka oldala a , akkor a/d darab vágásra lesz szükség, mindegyikkel $2a^2$ felületet létrehozva. Ehhez $6\gamma a^3/d$ energiára van szükség, míg a forráshővel $L\rho a^3$. Víze $0,2 \text{ nm-t}$ kapunk így ($L = 2250 \text{ kJ/kg}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\gamma = 72 \text{ mJ/m}^2$), héliumra (amely egyatomos) pedig $0,026 \text{ nm-t}$ ($L = 25 \text{ kJ/kg}$, $\rho = 130 \text{ kg/m}^3$, $\gamma = 0,014 \text{ mJ/m}^2$), ez jó egyezést ad.

Érdeemes megemlíteni, hogy **Einstein doktori értekezése** is hasonló témában íródott: a címe „A molekulák méretének új meghatározása” volt. Einstein azt vizsgálta, hogy a folyadék mozgását hogyan befolyásolja egy benne szuszpendált nagyon kicsiny gömb. Arra jut, hogy a viszkozitás miatt disszipálódott energia mértéke megnő, ha szuszpendált gömbök (oldott molekulák) vannak jelen, és a viszkozitási együttható $\eta' = \eta \cdot (1 + \phi)$ módon változik, ha $\phi = \nu \cdot 4r^3\pi/3$ molekulák



5. ábra. Az atomok kovalens sugara pikométerben, kisebb rendszámokra (a nagyobb rendszámú atomok méretének meghatározása során sok a bizonytalanság).

térfogathányada, és ν a számsűrűségük, r a méretük. A molekulák tömegének ismeretében számsűrűségük meghatározható ($\nu = \rho/m$), és így a méretük is! Einstein még hozzáfűzi, hogy a diffúziós állandó $D = RT/N_A 6\pi\eta r$ kifejezésén keresztül (lásd a Brown-mozgásról szóló 2.1 részt) ebből az Avogadro-állandó értéke is meghatározható – amely ekkoriban még nem volt igazán ismert (Perrin kapott érte Nobel-díjat 1926-ban).

Végezetül említsük meg, hogy az atommag mérete elég jó közelítéssel követi az $R = R_0 \cdot A^{1/3}$ összefüggést, ahol A a tömegszám, $R_0 \approx 1,2$ fm pedig egy empirikus állandó (a formula

Gyakorló feladat

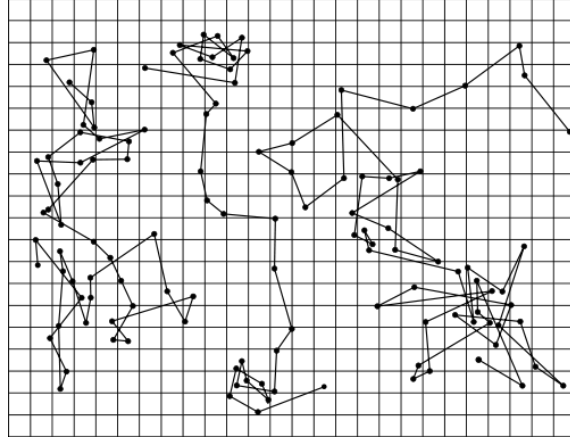
Az $R = R_0 \cdot A^{1/3}$ formula (ahol $R_0 \approx 1,2$ fm) alapján mekkora az atommagok sűrűsége? Mekkora lenne a Föld sugara, ha ilyen sűrűsége lenne? (A Föld tömege $6 \cdot 10^{24}$ kg.)

2. Atomosság és kvantáltság makroszkópikus jelenségekben

2.1. Brown-mozgás

A XIX. század végére az atomhipotézis számos megfigyelés magyarázatául szolgált, sokak véleménye azonban az volt, hogy a hőelmélet területén már nem alkalmazható sikeresen. Ezzel kapcsolatban a legfontosabb eredményeket a folytonos közegbe helyezett részecskék **Brown-mozgása** szolgáltatta. Ezt Lucretius már Kr. e. 60-ban megfigyelte (a levegőben szálló porszemcsék fény hatására látható „táncát”), illetve Ingenhousz is 1785-ben (ő koromszemcsék mozgását vizsgálta alkohol felületén). Brown volt az azonban, aki természettudományos módszerekkel fogott a jelenség vizsgálatához. 1827-ben virágpór vízen történő véletlenszerű mozgását figyelte meg, ma ehhez kötik a jelenség felfedezését, illetve első tudományos dokumentációját. Felmerült, hogy ez a mozgás az élet egyfajta megnyilvánulása lenne, ezért Brown apró szerves részecskékkkel is megismételte kísérletét, és hasonló eredményre jutott. A Brown-mozgás (lásd a 6. ábra) fontos tulajdonságai:

- független az időtől (nem csillapodik az idővel)
- független a folyadék kémiai összetételétől (kivéve annak folyékonyságát/viszkozitását)
- térben rendezetlen
- nagyobb hőmérsékleten gyorsabb
- nagyobb részecske esetén lassabb



6. ábra. Egy $0.53 \mu\text{m}$ méretű kolloid részecske mozgása mikroszkóppal való megfigyelés által három alkalommal feljegyezve. A pozíciók között harminc másodperc telt el, a rácsméret $3.2 \mu\text{m}$. Az ábra forrása: J. B. Perrin, "Mouvement brownien et réalité moléculaire" Ann. de Chimie et de Physique (VIII) 18, 5-114 (1909)

A jelenséget sokan próbálták az atomok létezésére és ezek hőmozgására (azaz az atomok kinetikus elméletére) visszavezetni (Ramsay, Gouy, Exner), azonban cáfolatok is születtek (Nägeli). Einstein 1905-ben (és tőle függetlenül Smoluchowski 1906-ban) adott magyarázata már tudományos konszenzushoz vezetett. Ennek eredménye szerint az adott pontban elszórt szemcsék kezdeti helyüktől való eltávolodásának négyzetének átlagos értéke $\overline{x^2} = \frac{kT}{3\pi\eta r}t$, ahol k a Boltzmann-állandó, T az anyag hőmérséklete, η a viszkozitása, r a szemcseméret és η a viszkozitás. Ez pontosan a megfigyeléseket támasztja alá – inentől tekinthetjük az atomelméletet elfogadottnak. Perrin hosszú kísérletsorozata, amelynek első részletei 1908-ban láttak napvilágot, addig példa nélkül álló pontossággal igazolta Einstein lényegében összes jóslatát. Einstein levezetésének lényege az, hogy a diffúziós egyenletet és az ozmózisnyomást (és azon keresztül a kinetikus gázelméletet) összekapcsolja, az alábbi módon.

Vegyünk egy folytonos közeget, amelyben szuszpendált részecskék vannak elhelyezve, azaz ezek egyfajta híg oldatát. Ekkor az ozmózisnyomás ezek parciális nyomásából származik,

$$p(x) = \nu(x)kT \quad (37)$$

módon, ahol $\nu(x) = N(x)/V$ a részecskék lokális számsűrűsége. Ekkor a részecskére ható ozmotikus erő úgy számolható, hogy ha valamely dx vastagságban dN molekula van, és itt dp a nyomásváltozás, akkor adott A felület esetén $F_o = -Adp/dN$. Ebből (a formulát átalakítva dx -szel „bővítve”)

$$F_o = -\frac{1}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{kT}{\nu} \frac{\partial \nu}{\partial x} \quad (38)$$

adódik (egy dimenzióban kifejezve, az egyszerűség kedvéért). Ha a részecskék ennek hatására mozognak, akkor a Stokes-törvény szerint v sebesség esetén $F_k = -6\pi\eta r v$ közegellenállási erő hat rájuk (η viszkozitású közegben). Ebből az egyensúlyi sebességük ($F_k + F_o = 0$ alapján)

$$v = -\frac{kT}{6\pi\eta r \nu} \frac{\partial \nu}{\partial x} \quad (39)$$

Ez azt jelenti, hogy egy adott felületen időegységenként

$$\nu v = -\frac{kT}{6\pi\eta r} \frac{\partial \nu}{\partial x} \quad (40)$$

mennyiségű részecske áramlik át, azaz egy kis térfogatban a kontinuitásnak megfelelően

$$\frac{\partial \nu}{\partial t} = -\frac{\partial(\nu v)}{\partial x} = \frac{kT}{6\pi\eta r} \frac{\partial^2 \nu}{\partial x^2} \quad (41)$$

mértékben változik a számuk (a térfogat jobb- és baloldalán való ki- és beáramlás különbségéből számolva kaphatjuk meg az első egyenlőséget).

Mindezekből a **diffúziós egyenlet** adódik: $\dot{\nu} = D\nu''$. Ennek megoldása egy dimenzióban, Gauss kezdeti feltétel esetén, N_{tot} számú részecske esetén

$$\nu(x, t) = \frac{N_{\text{tot}}}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (42)$$

Ebből x^2 várható értéke (a részecskék átlagos, origótól vett távolság-négyzete), azaz az eloszlás második momentuma egy részecskére vonatkoztatva

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 \nu(x, t) dx = 2Dt = \frac{kT}{3\pi\eta r} t \quad (43)$$

amely összhangban van a fent összefoglalt kísérleti tényekkel.

A Langevin-féle levezetést is érdemes megemlíteni. Ez a részecske Newton-egyenletét veszi alapul, rá ható $F(x)$ véletlenszerű erőből és a közegellenállásból kiindulva; majd ezt $2x$ -szel szorozza:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x(t) - 6\pi\eta r \frac{dx}{dt} \quad (44)$$

$$m 2x \frac{d^2 x}{dt^2} = m \frac{d^2 x^2}{dt^2} - 2m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = 2F_x(t)x - 6\pi\eta r \frac{dx^2}{dt} \quad (45)$$

Ha itt az időben vett várható értéket vesszük, és észrevesszük, hogy $\langle xF_x \rangle_t = 0$, mivel ezek korrelálatlanok (és „szimmetriasértés” lenne ennek bármely nem-nulla értéke); ezen felül az átlagolást és a differenciálást felcseréljük, akkor ezt kapjuk:

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + \frac{6\pi\eta r}{m} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = 2 \left\langle \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right\rangle = \frac{2}{m} kT \quad (46)$$

ahol az utolsó egyenlőség az ekvipartíció tétele miatt áll fenn. Ez egy differenciálegyenlet $d \langle x^2 \rangle / dt$ -re, a megoldása pedig $(f'(t) + af(t) = b \Rightarrow f(t) = \exp(-at) + b/a$ alapján):

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{6\pi\eta r} + c \exp \left[-\frac{6\pi\eta r}{m} t \right] \quad (47)$$

ez kellően nagy időkre (ha az exponenciális tag járuléka már nem számít, azaz már nem a részecske tehetetlensége, hanem tényleg a Brown-mozgás a döntő) az Einstein-féle

$$\langle x^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\eta r} t \quad (48)$$

formulát adja vissza.

A Brown-mozgás és a diffúzió kapcsán fontos megemlíteni, hogy ennek rengeteg alkalmazása van, akár táplálékgyűjtő állatok mozgásától gazdasági folyamatok leírásáig. Az ilyen folyamatokban kialakuló Gauss-eloszlások megjelenése a centrális határeloszlás-tételnek köszönhető. Ha azonban az ezt kialakító elemi lépések/folyamatok eloszlása „nehéz végű”, hatványfüggvény alakot ölt (azaz nincsenek momentumai), akkor anomális diffúzió lép fel, amelynek felépítő folyamata a Mandelbrot által definiált Lévy-repülés: ebben, szemben a hagyományos diffúziós mozgással (Rayleigh-repülés), gyakran „anomálisan nagy” ugrások fordulnak elő. Az ilyen folyamatokban Lévy-stabil eloszlások jönnek létre, amelyek a Gauss-eloszlás általánosításainak tekinthetők.

2.2. Sörétzaj

Schottky 1926-ban megfigyelte, hogy nagy frekvenciánál és alacsony hőmérsékletnél egy érdekes zaj jelenhet meg. Ennek magyarázata később az volt, hogy a **töltéshordozók kvantáltak**, vagyis az áram véges számú elemi töltés mozgásából áll össze. Ezek száma fluktuál, és végső soron ez adja a zajt. Például egy mikrohullámú áramkör esetében, amely nanoszekundumos skálán működik, ha

az áram 16 nanoamper, akkor 1 ns alatt 100 elektron halad el. A binomiális eloszlás szerint ennek fluktuációja kb. 10, azaz a zaj a jel tizedét adja.

Az elektromos áram a töltéshordozók (elektronok) áramlásából adódik, és a t időtartam alatt átfolyt elektronok n számából $I = en/t$ módon adódik. Az n random fluktuációjából az áram szórását (ingadozását) is megkaphatjuk:

$$(\Delta I)^2 = \langle (I(t) - \langle I \rangle)^2 \rangle = \frac{e^2}{t^2} \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \frac{e^2}{t^2} (\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2) \quad (49)$$

Vegyünk egy kellően nagy T időtartamot, ekkor $N = nT$ az elektronok száma a teljes intervallumon. Egy t intervallumra kell ebből n darabot kiválasztanunk. Ekkor az erre vonatkozó **binomiális eloszlás**:

$$W(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}, \quad (50)$$

ahol $p = t/T$. Ebből az eloszlásból kiszámolhatóak az alábbi várható értékek és a szórás:

$$\langle n \rangle = Np = N \frac{t}{T} \quad (51)$$

$$\langle n^2 \rangle = Np + N(N-1)p^2 = N \frac{t}{T} + N(N-1) \frac{t^2}{T^2} \quad (52)$$

$$(\Delta n)^2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = N \frac{t}{T} - N \frac{t^2}{T^2} = N \frac{t}{T} \left(1 - \frac{t}{T}\right) \quad (53)$$

$$(\Delta I)^2 = \frac{e^2}{t^2} (\Delta n)^2 = \frac{Ne^2}{tT} - \frac{Ne^2}{T^2} = \frac{e \langle I \rangle}{t} \left(1 - \frac{t}{T}\right) \quad (54)$$

ahonnan végül a t időtartamra a következő relatív áramingadozás adódik:

$$\frac{\Delta I}{\langle I \rangle} = \sqrt{\frac{e}{\langle I \rangle t} \left(1 - \frac{t}{T}\right)} \xrightarrow{T \gg t} \frac{\Delta I}{\langle I \rangle} \approx \sqrt{\frac{e}{\langle I \rangle t}} = \sqrt{\frac{1}{\langle n \rangle}} \quad (55)$$

Ez tehát egy véletlen t időtartam során mért áramerősség átlagos eltérése a „teljes” időtartam átlagos áramerősségétől.

Figyeljük meg, hogy a fenti binomiális eloszlás esetén $\langle n \rangle \approx (\Delta n)^2$, ha $p \ll 1$. Az egyenlőség egzaktul teljesül a Poisson-eloszlás esetén, amely éppen a binomiális eloszlás $p \rightarrow 0$ határesetete. A $\langle n \rangle \approx (\Delta n)^2$ kifejezésből az $I = en/t$ egyenlőség használatával egyébként közvetlenül is látható, hogy $e \langle I \rangle / t \approx (\Delta I)^2$, amiből a fenti (54) kifejezés is adódik.

Ha van egy olyan rezonáns áramkörünk, amely f frekvencián érzékeny, akkor ez éppen az ennek megfelelő $t = 1/2f$ időtartam alatti áramingadozást fogja érzékelni, illetve ezt felerősíteni. Ebben a tartományban az áramingadozás négyzete tehát $2eIf$, ami tulajdonképpen a zaj erősségét jelenti. Ezen zaj mellett megjelenhetnek más zajok, az $1/f$ -es flicker (villódzási) zaj és a hőmérséklettel arányos Johnson-Nyquist zaj is. Ezek azonban alacsony hőmérsékleten és nagy frekvenciánál kisebbek lehetnek, mint a sörétzaj.

2.3. Sűrűségingadozások gázokban

A sörétzajhoz hasonlóan a gázok kvantáltsága (atomokra osztottsága) sűrűségingadozást hoz létre. az átlagos $\nu = N/V$ számsűrűség körül. Itt is a teljes N részecskeszámából választunk ki n darabot egy ΔV térfogatban, ennek eloszlása a fentiekhez hasonlóan binomiális, azaz

$$W(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}, \text{ ahol} \quad (56)$$

$$p = \frac{N_{\Delta V}}{N} = \frac{\nu \Delta V}{\nu V} = \frac{\Delta V}{V}. \quad (57)$$

Amennyiben $p \ll 1$, azaz a teljes térfogat egy kis hányadát választjuk ki, akkor ebből a

$$W(n) = \frac{(pN)^n}{n!} \cdot \exp[-pN] \quad (58)$$

Poisson-eloszlás adódik (a $p \rightarrow 0$ határesetben). Ekkor

$$\langle n \rangle = (\Delta n)^2 = pN = \nu \Delta V. \quad (59)$$

A ΔV térfogatban található molekulák várható száma tehát $\langle n \rangle = pN$, abszolút szórása pedig $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle}$, relatív szórása $\Delta n / \langle n \rangle = 1 / \sqrt{\langle n \rangle}$.

Ideális gázra normál állapotban a számsűrűség $\nu = 2,78 \cdot 10^{25}$ molekula/m³, a zöld fény $0,5 \mu\text{m}$ -es hullámhosszának megfelelő térfogatban ez kb. $3,48 \cdot 10^6$ molekula. Innen $\Delta n / \langle n \rangle = 1 / \sqrt{\langle n \rangle} = 0,05\%$ fluktuáció adódik. Ekkora térfogatban tehát átlagosan 0,05 százalékot ingadozik a molekulák száma.

Reális gázokban a molekulák térfogata módosítja a képet. Itt érdekes jelenségek lépnek fel, például a kritikus pont körül megnövekvő fluktuációk, ezeket most nem tárgyaljuk.

Gyakorló feladat

Egy köbcéntiméter levegőben $2,5 \cdot 10^{19}$ molekula van. Mennyi az ilyen köbcéntiméteres kockákban lévő levegő sűrűségének átlagos relatív szórása (százalékban kifejezve)? És mekkora az átlagos relatív szórás egy 100 nm-es kockában?

2.4. Fényszóródás

A gázok **sűrűségfluktuációi** érdekes következményt vonnak maguk után a **fényszórásra** nézve. Ennek az az alapja, hogy a számsűrűség összefügg a gázcella törésmutatójával. Legyen a molekulák polarizálhatósága α , azaz E elektromos tér hatására $p = \alpha E$ dipólmomentumuk lesz, a számsűrűségük pedig ν . A közegben haladó fény terjedését az n törésmutató határozza meg (figyelem, a korábbi két alfejezetben ez a részecskeszám volt, de itt megváltoztattuk a jelölést) amely viszont a ν számsűrűségtől függ, hiszen a Clausius–Mossotti-reláció szerint

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{\nu \alpha}{3\epsilon_0}, \text{ ahonnan} \quad (60)$$

$$n = \sqrt{\frac{3\epsilon_0^2 + 2\alpha\nu}{3\epsilon_0^2 - \alpha\nu}}, \text{ azaz} \quad (61)$$

$$\Delta n = \frac{9\alpha\epsilon_0}{2n(\alpha\nu - 3\epsilon_0)^2} \Delta\nu, \text{ továbbá} \quad (62)$$

$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{(n^2 + 2)(n^2 - 1)}{6n^2} \frac{\Delta\nu}{\nu} = \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} + \frac{1}{2}\right)^{-1} \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} - 1\right)^{-1} \frac{\alpha\Delta\nu}{\epsilon_0} \quad (63)$$

Ez alapján azt mondhatjuk, hogy a számsűrűség ingadozása hozza létre a fényszórást.

Ha most egy kicsit más megközelítést alkalmazunk, és azt mondjuk, hogy a fény a hullámhossznál lényegesen kisebb, d méretű, n törésmutatójú gömbön szóródik (amely a Clausius–Mosotti reláción keresztül egy α polarizálhatóságú molekulával ekvivalens), akkor kiderül (ezt a számolást itt nem végezzük el), hogy a szórt fény intenzitása a θ szórási szög és a szórócentrumtól mért r távolság függvényében

$$I(r) = I_0 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2r^2} \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^4 \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{d}{2}\right)^6 \quad (64)$$

módon változik, és innen a gömbön a teljes szórási hatáskeresztmetszet (azaz a kimenő teljesítmény és a bejövő áramsűrűség (intenzitás) hányadosa, az 1.3. szakaszban is említett $P_{\text{ki}} = j_{\text{be}} \sigma$ összefüggésnek megfelelően):

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} = \frac{2\pi^5}{3} \frac{d^6}{\lambda^4} \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0}\right)^2. \quad (65)$$

A fenti formula kis λ értékekre nagy szórást ad, tehát a **kék fény erősen szóródik, a vörös pedig lényegesen kevésbé**. A Nap sugárzási spektrumából a kék tehát kiszóródik, a vörös viszont benemarad. **Ezért kék az ég és vörös a lemenő Nap**. Mindezt az alábbiakban mikroszkóppikusan is megvizsgáljuk.

Vizsgáljuk meg, hogy az elektromágneses sugárzás hogyan szóródik kis polarizálható molekulákon. A hatáskeresztmetszetet a bejövő és a kimenő energiaáram segítségével számíthatjuk ki. Ennek kulcsa a **dipólusugárzás**. Ha két vezető gömböt összeköt egy vezeték, és a töltés oda-vissza áramlik a kettő között, akkor Hertz-féle dipólusunk van, amely lényegében megfelelő modellje egy polarizálható molekulának. Legyen a bejövő tér $E_0 \sin(\omega t)$, ennek energiaárama $|\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}| = c\epsilon_0 E_0^2/2$. Ez oszcillációra kényszeríti a töltéseket, ezt egy elektron mozgásán keresztül modellezhetjük. Ennek mozgására $m_e \ddot{z}(t) = -eE_0 \sin(\omega t)$ lesz igaz, azaz $z(t) = eE_0/(m_e \omega^2) \sin(\omega t) = z_0 \sin(\omega t)$, ahol $z_0 = eE_0/(m_e \omega^2)$. A dipólmomentum amplitúdója a kitérés szorozva a töltéssel, azaz $p_0 = ez_0 = e^2 E_0/(m_e \omega^2)$ amplitúdójú dipólmomentum-ingadozást kapunk. Ezzel a bejövő energiaáram és a dipólus-amplitúdó kapcsolata

$$|\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}| = \frac{p_0^2 \omega^4 \epsilon_0 m_e^2 c}{2e^4}. \quad (66)$$

Legyen az egyik pólus töltése $q(t) = q_0 \sin(\omega t)$, ekkor a két pólus közötti áram ennek deriváltja, $I = I_0 \cos(\omega t)$, ahol $I_0 = \omega q_0$. Legyen a dipólus hossza l (azaz a dipólnyomaték amplitúdója $p_0 = q_0 l = I_0 l/\omega$), ezzel kiszámítható az elektromos és a mágneses tér, illetve az ezek által elvitt energia (Poynting vektor) átlagos értéke a θ szög által kijelölt r irányban:

$$\langle \mathbf{S}_{\text{ki}} \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{\mu_0} \right\rangle = \frac{\omega^2 l^2 I_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \mathbf{e}_r = \frac{\omega^4 p_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \mathbf{e}_r \quad (67)$$

illetve a térszögegységre vett **kisugárzott teljesítmény** (figyelembe véve, hogy $dP_{\text{ki}} = |\langle \mathbf{S}_{\text{ki}} \rangle| r^2 d\Omega$)

$$\frac{dP_{\text{ki}}}{d\Omega} = \frac{\omega^4 p_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \sin^2 \theta \quad (68)$$

amelynek integrálja 4π térszögére (a $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ helyettesítéssel élve) a teljes kisugárzott teljesítmény: $P_{\text{ki}} = \frac{\omega^4 p_0^2}{12\pi \epsilon_0 c^3}$.

Ebből kiszámítható a fény szabad elektronon történő szórásának, a **Thompson szórásnak** a hatáskeresztmetszete. A (66) és a (68) formulákat figyelembe véve megkapjuk a hatáskeresztmetszet értékét, mivel a ez a bejövő energiaáram és a kisugárzott teljesítmény hányadosa. Így a differenciális hatáskeresztmetszet az alábbiaknak megfelelően adódik:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{|\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}|} \frac{dP_{\text{ki}}}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 m_e c^2} \right)^2 \sin^2 \theta = r_e^2 \sin^2 \theta \quad (69)$$

ahol

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 m_e c^2} = \frac{ke^2}{m_e c^2} = \frac{\hbar c \alpha}{m_e c^2} = 2,818 \text{ fm} \quad (70)$$

a klasszikus elektronsugár (a k Coulomb-állandóval illetve az α finomszerkezeti állandóval kifejezve), a teljes hatáskeresztmetszet pedig $\sigma_{\text{Thomson}} = 8\pi r_e^2/3$. Figyeljük meg, hogy ezzel szemben a töltött részecskék egymáson szóródásának teljes hatáskeresztmetszete nem véges!

Ha azonban nem a szabad elektronon, hanem az atomban kötött elektronon történő szóródást vizsgáljuk, akkor a Rayleigh-szórásra jutunk. Itt az $m_e \ddot{z} = -m_e \omega_0^2 z - eE_0 \sin(\omega t)$ egyenlet lesz igaz (ha ω_0 az atom sajátrezgéséből adódó körfrekvencia). Ennek megoldása $z = eE_0/(m_e(\omega^2 - \omega_0^2)) \sin(\omega t)$, azaz $z_0 = eE_0/(m_e(\omega^2 - \omega_0^2))$, és így a dipólmomentum amplitúdója $p_0 = ez_0 = e^2 E_0/(m_e(\omega^2 - \omega_0^2))$. Az előzőekhez hasonlóan számolva a hatáskeresztmetszet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2} r_e^2 \sin^2 \theta \quad (71)$$

Ha (ahogy az a látható fény és a légkör atomjai esetén igaz) a bejövő sugárzás frekvenciája sokkal kisebb, mint az elektron kötési energiájának megfelelő sajátfrekvenciája (azaz $\omega \ll \omega_0$, ami teljesül többnyire, hiszen a fény frekvenciájához tartozó energia 1 eV nagyságrendben van, az elektronok kötési energiája viszont inkább 100 eV nagyságrendben van, ahogy később látni fogjuk), akkor

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4 r_e^2 \sin^2 \theta \quad (72)$$

illetve a teljes hatáskeresztmetszet is ennek megfelelően

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4 \cdot \sigma_{\text{Thomson}} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4 \frac{8\pi r_e^2}{3}. \quad (73)$$

A Rayleigh-szórás sokkal gyengébb a Thomson-szórásnál, viszont erős, **negyedik hatványos** a frekvenciafüggése: emiatt van, hogy ég kék, a Nap sárga, a naplemente pedig piros (hiszen a nagyfrekvenciás kék fény sokkal erősebben szóródik, mint a piros fény – amely ködben is messzire látszódik). Az tehát, hogy az ég kék, a levegő atomosságából következik.

Érdeemes még megemlíteni, hogy a Rayleigh-szórás általánosságban az elektromágneses sugárzás aktuális hullámhosszával lényegesen kisebb részecskéken való szórását jelent. Az előzőekben tárgyaltuk a polarizálható (avagy törésmutatóval rendelkező) gömbökön és dipólusokon történő szórást is, de a lényeg mindkét esetben az, hogy a teljes hatáskeresztmetszet a hullámhossz negyedik hatványával fordítottan arányos.

Gyakorló feladat

A Naptól jövő fény szóródjon 50 eV kötési energiájú (azaz ennek megfelelő sajátfrekvenciájú) molekulákon. Ha $3 \cdot 10^{25}$ db/m³ a számsűrűség, és 10 km-es a levegőréteg, akkor a 300 nm-es, illetve a 600 nm-es fény hányadrésze szóródik ki? Ehhez érdemes figyelembe venni, hogy $hc \approx 1240$ eV·nm (azaz 1240-et a hullámhossz nanométerben vett értékével osztva az energiát kapjuk elektronvoltban), illetve hogy ω/ω_0 aránya az energiáknak felel meg.

2.5. Energiaeloszlások gázokban

Ahogy korábban említettük, a hőtan atomi elveken való magyarázata igen fontos bizonyítéka volt az atomelméletnek. Tulajdonképpen a Maxwell–Boltzmann-eloszlás ezen gondolatmenet „csúcsa”, úgyhogy vizsgáljuk meg ezt - kérjünk egy makroszkópikus anyag makroállapotának a megfigyelhető tulajdonságait nevezzük, míg mikroállapotait a benne lévő részecskék konkrét elhelyezkedése adja meg. Egyszerű példát szolgáltat erre a pénzfeldobás: négy érmét eldobunk, a „fele fej, fele írás” egy makroállapot, amely hat különböző mikroállapot esetén valósul meg. Ha nem kétféle, hanem k féle állapot lehet, és N részecskén van, akkor az $\{N_1, N_2, \dots, N_k\}$ eloszlás (ahol $N = \sum_i N_i$) lehetséges mikroállapotainak száma

$$W_k(N_1, N_2, \dots, N_k) = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_k!}. \quad (74)$$

hiszen az $N!$ -féle sorrenden belül az egyes állapotban lévő N_1 számú részecske sorrendje érdektelen, így $N_1!$ -sal oszthatunk (ezt hívjuk ismétléses permutációnak). Az adott makroállapot létrehozó mikroállapotok száma tulajdonképpen a makroállapot valószínűségét jelenti, ha minden mikroállapot azonos valószínűségű. A W függvénynek (a k alsó indexet innentől elhagyjuk) $N_1 = N_2 = \dots = N_k$ esetén maximuma van, ezért ez valósul meg a legnagyobb valószínűséggel (például $W(9, 0, 0) = 1$, míg $W(3, 3, 3) = 1680$, tehát ez utóbbi 1680-szor valószínűbb).

Ennek a $W(N_1, N_2, \dots, N_k)$ függvénynek a $\sum_i N_i = N$ és $\sum_i N_i E_i = E$ feltételek melletti maximumát keressük tehát. Először is a $N! \approx N^N e^{-N}$, azaz $\ln N! = N \ln N - N$ Stirling-formulával (amelyben még egy $\sqrt{2\pi N}$ faktor is szerepel, ez ennek logaritmusában azonban elhanyagolható korrekciót okoz a legalább N nagyságrendű további tagokhoz képest) átalakítjuk W -t:

$$\ln W = \ln N! + \ln \left[\prod_i \frac{1}{N_i!} \right] \approx N \ln N - N + \sum_i (N_i - N_i \ln N_i) \quad (75)$$

és miután egy függvény szélsőértékénél a logaritmusának is szélsőértéke van, így ennek maximumát keresve W maximumát, azaz a legvalószínűbb állapotot találjuk meg. Ezután a maximumot a Lagrange-multiplikátorok módszerével keressük, amelynek lényege az, $f(x, y)$ extrémumát keressük $g(x, y) = 0$ feltétel mellett. Ezt úgy is fogalmazhatjuk, hogy egy $f(x, y)$ szintfelület extrémumát keressük – adott $g(x, y) = 0$ görbe mentén mozogva. Az extrémumban a felületre vetített görbe

merőleges $f(x, y)$ gradiensére, másképpen mondva párhuzamos az $f(x, y)$ adott pontban húzott szintvonalával. Ebből $\nabla f = \lambda \nabla g$ adódik, tehát $\nabla(f - \lambda g) = 0$. Ezért esetünkben a

$$\mathcal{L}(N_1, N_2, \dots, N_n) = \ln(W) + \alpha(N - \sum N_i) + \beta(E - \sum N_i E_i), \text{ azaz} \quad (76)$$

$$\mathcal{L}(N_1, N_2, \dots, N_n) = \text{const}(N, E) + \sum_i (-N_i \ln N_i + (1 - \alpha)N_i - \beta N_i E_i) \quad (77)$$

függvény összes parciális deriváltját tesszük egyenlővé nullával, ahol E_i az adott héjhoz tartozó energia. Ezt az egyes N_i -k szerint deriválva a $-\ln N_i - \alpha - E_i \beta$ kifejezésre jutunk. Ezt nullával egyenlővé téve

$$N_i = e^{-\alpha - \beta E_i} \quad (78)$$

azaz a legvalószínűbb eloszlás esetén a fenti kifejezés lesz az i . állapot (azaz az E_i energiaszint) multiplicitása. Az α értéke egyfajta normálást ad, és megkapható a $\sum_i N_i = N$ egyenletből:

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \quad (79)$$

azaz

$$N_i = N \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}. \quad (80)$$

A termodinamika alapjainak ismeretében ugyanakkor közvetlenül meghatározhatjuk β értékét is. Vegyük figyelembe, hogy ha az m tömegű részecskék mozgási energiája adja az E_i értékeket, akkor valójában $E_i = mv_i^2/2$. Ezzel áttérhetünk megszámlálhatatlanul sok állapotra, azaz az i . mikroállapot helyett a \vec{v} sebességhez tartozó állapotról beszélünk, amely körül egy infinitezimális $d^3\vec{v}$ állapottérbeli térfogatban $N(\vec{v})d^3\vec{v}$ részecske van – azaz $N(\vec{v})$ egyfajta állapotsűrűséget jelöl. Ekkor

$$\sum_i N_i = N \text{ helyett } \int N(\vec{v})d^3\vec{v} = \int e^{-\alpha - \beta mv^2/2} 4\pi v^2 dv = N \quad (81)$$

adódik, ahonnan $e^{-\alpha} = N(\beta m/2\pi)^{3/2}$, azaz a sebességeloszlás

$$\frac{d^3n}{d^3v} = N(\vec{v}) = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-\beta \frac{mv^2}{2}\right) \quad (82)$$

Innen az $mv^2/2$ energia várható értéke

$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \int \frac{mv^2}{2} N(v) 4\pi v^2 dv = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \int \frac{mv^2}{2} \exp\left(-\beta \frac{mv^2}{2}\right) v^2 dv = \frac{3}{2\beta} \quad (83)$$

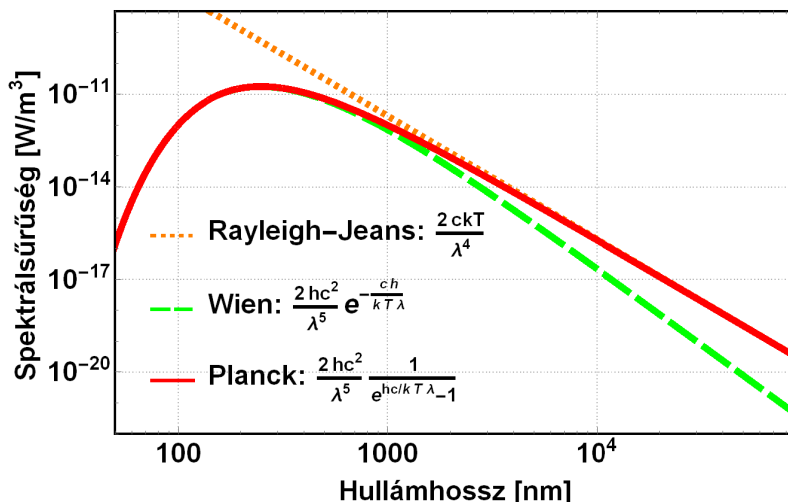
ami az ekvipartíció tétele miatt éppen $3kT/2$ (három dimenzióban), úgyhogy $\beta = 1/kT$. A T hőmérsékletű gázban megvalósuló **Maxwell–Boltzmann-féle sebességeloszlás** tehát

$$\frac{d^3n}{d^3v} = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) \quad (84)$$

$$\frac{dn}{dv} = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4\pi v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) \quad (85)$$

Ezzel az átlagos sebesség értéke $\sqrt{8kT/(m\pi)}$, és ahogy vártuk, a négyzetes sebességátlag $\sqrt{3kT/m}$. Tipikus várható sebességek nulla Celsius hőmérsékletű gázra: 1693 m/s (hidrogén), 567 m/s (víz), 536 m/s (neon), 454 m/s (nitrogéngáz), 425 m/s (oxigén), 362 m/s (szén-dioxid), 170 m/s (higany).

A gázokban megfigyelhető szabad úthossz vizsgálható ez alapján. Ha a részecskék sugara r_0 , akkor az ütközési hatáskeresztmetszet $\sigma = 4r_0^2\pi$. Ha egy nagyon gyorsan mozgó részecskét veszünk,



7. ábra. A Rayleigh-Jeans formula, a Wien-közelítés és a Planck-törvény összehasonlítása, $kT = 1$ eV hőmérséklet esetén.

a szabad úthossza $\lambda = 1/(\sigma n)$. Ha az összes részecske egyformán mozog, akkor $\lambda = 1/(\sqrt{2}\sigma n)$. Innen az időegységenkénti ütközések száma v/λ , erre és a szabad úthosszra tipikus értékek: 0,0839 mm és 43,5 millió/s (hidrogén), 0,0454 mm és 21,2 millió/s (levegő), 0,0395 mm és 26,6 millió/s (széndioxid). Nagy vákuumban (mikrobár értékek mellett) ez néhány méteresre is nőhet.

Fontos megemlíteni, hogy a fenti levezetés megkülönböztethető, egyesével beazonosítható részecskékre vonatkozott. Később kiderül, a kvantumvilágban ez nem érvényes, ugyanis a kvantumfizikai részecskék felcserélhetőek, megkülönböztethetetlenek. Ekkor az energiaeloszlás szempontjából bizonyos mikroállapotok azonosak lesznek, ezért kicsit máshogy kell számolni, ahogy arra később visszatérünk.

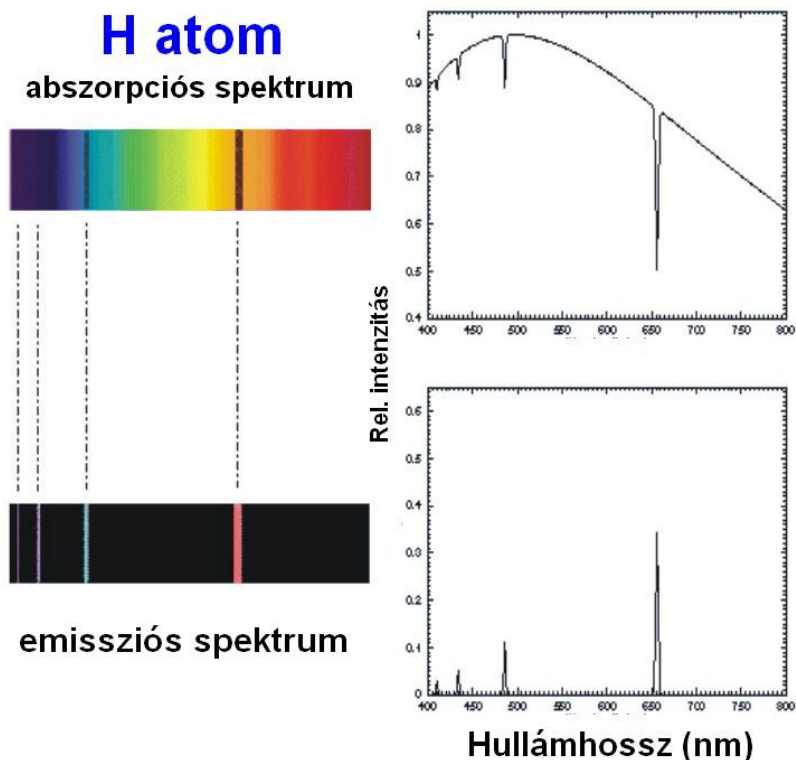
2.6. Feketetest-sugárzás

Addig is érdemes összefoglalni, ahogy a 7. ábrán látható, Wien 1896-ban a kis hullámhosszak esetén vett spektrális sűrűségére (a felületre és térszögére jutó merőleges sugárzási teljesítmény hullámhossz- vagy frekvencia-egységként) a $\frac{2hc^2}{\lambda^5} e^{-\frac{hc}{\lambda kT}}$ összefüggést vezette le. Rayleigh 1900-ban nagy hullámhosszú spektrális sűrűségére a $\frac{2ckT}{\lambda^4}$ értéket vezette le, a levezetést 1905-ben Jeansszel együtt pontosították. Wien eredménye a mérések szerint nagy frekvencián téves, a Rayleigh-Jeans törvény pedig a teljes spektrumra (a hullámhosszra) integrálva végtelent ad (ez az ultraibolya katasztrófa, minél több ultraibolya komponenst veszünk figyelembe, a teljes kisugárzott teljesítmény annál nagyobb, és végül végtelenhez tart). Hogy újabb, helyesebb eredményt kapjon, Planck ebből empirikusan a $\frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$ összefüggést adta meg. Magyarozatként a Boltzmann-eloszláshoz hasonló módszert választva feltette, hogy az összes energia $hc/\lambda = h\nu$ egységekben helyezhető el egy rezonátor módusain. Ezen egységeket azonosította később 1905-ben Einstein fotonokként. A magyarázatot néhány fejezettel később tárgyaljuk részletesen, itt is megemlítenő azonban, hogy a helyes Planck-képlet csak akkor adódik, ha a rezonátor módusain diszkrét energiaértékek lehetségesek csak - folytonos energiaeloszlással helytelen eredmény adódik.

3. Az atomok energiaszintjei és az első kvantált atommodellek

3.1. Gázok abszorpciós és emissziós vonalai

Gázok és gőzök elektromágneses válaszára készíttetését vizsgálták az **elnyelési spektrum** (amelyet úgy kapunk meg, hogy a bejövő E-M sugárzásból „eltűnt” komponenseket vesszük) és a **kibo-**



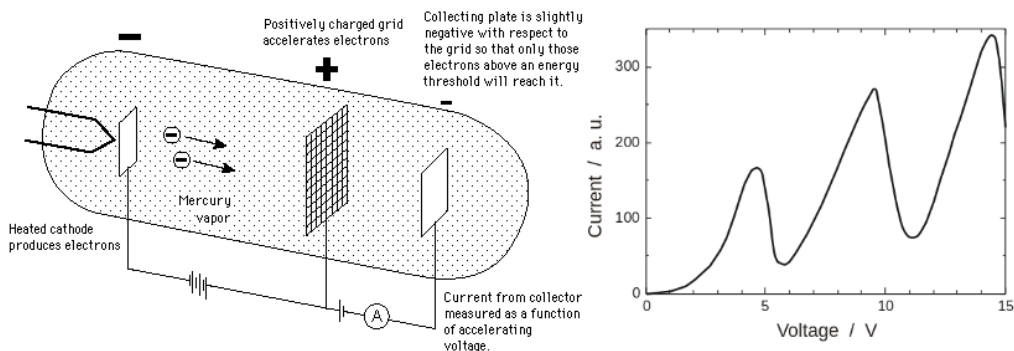
8. ábra. A H atom adszorpciós és emissziós spektruma.

csátási spektrum (amelyet a gerjesztett anyag, például forró gáz bocsát ki) mérésével. Ezek tanulmányozása alapján kiderült, hogy a spektrumok szerkezete fix, az atomokra jellemző. Elsőként Fraunhofer vizsgálta 1814-ben a Nap sugárzásában megjelenő „vonalakat”: 574-et talált. A vonalakat nem csak a látható tartományban (380 – 780 nm, avagy $7.9 \cdot 10^{14} - 3.8 \cdot 10^{14}$ Hz) kell keresni, de extrém kis hullámhossznál már folytonos a spektrum, illetve a rádió- és mikrohullámok esetében is. Összességében az a tapasztalat, hogy adott gázra az **emissziós és abszorpciós vonalak** ugyanott jelennek meg (lásd 8. ábra).

Ma óriási adatbázisok állnak rendelkezésre, például a NIST (National Institute and Technology) oldalán is szabadon elérhetően. Ezek rengeteg információt tartalmaznak, például nátriumnak 10 és 1000 nm között 6174 vonala van, ebből a látható tartományban 628. A vonalak helye fix, viszont az intenzitása, szélessége (és egyáltalán, a láthatósága), és a mögöttük lévő háttér is függ a körülményektől (nyomás, hőmérséklet, lásd Doppler-kiszélesedés). Többatomos gázok spektruma sávokat tartalmaz: rotációs, vibrációs és egyéb gerjesztések is megjelennek, egyes vonalak összemosódnak. Szilárd testek gerjesztései még bonyolultabbak. Az egyatomos gázokra összességében tehát a következő megfigyeléseket tehetjük:

- A vonalak helye az abszorpciós és az emissziós színekben is **ugyanott van, az atomra jellemző**. Ez erős támasza annak, hogy az abszorpciós spektrumokat saját frekvenciával rendelkező csillapított dipólusok kényszerrezgéseként, az emissziós spektrumokat pedig elektromos dipólusok szabadrezgéseként írjuk le. (A vonalak helyét a Doppler-hatás azért módosíthatja.)
- Nagyon sok vonal található, növekvő frekvenciával csökken az intervallumuk, **szabályos sorozatok** választhatóak ki közülük.
- Az adott atomra jellemző hullámhossz (kis rendszámú atomoknál 100-200 nm, nagy rendszám esetén több nagyságrendet változhat) alatt eltűnik a vonalas szerkezet, **folytonos spektrumot** látunk. Ezen energiaszint felett bármekkora energiát felvehetnek az elektronok, hiszen az atom ionizálódik.

A vonalak felfedezésekor az úgynevezett **spektrum-termeket** vezették be, $\tau_\alpha, \bar{\tau}_\alpha$ sorozatokban. Ezekkel egy adott frekvenciát a $f_{\alpha\beta} = |\tau_\alpha - \bar{\tau}_\beta|c$ értéként kaphatjuk meg. A $\tau, \bar{\tau}$ értékek



9. ábra. A Frank-Hertz kísérlet. Balra a kísérleti elrendezés, jobbra pedig a mért áram a gyorsító-feszültség függvényében.

szokásos egysége a kayser, avagy cm^{-1} , és ez tulajdonképpen a hullámhossz inverze. Például a La^{++} ion emissziós spektrumának vonalai (cm^{-1} egységben) felírhatóak 4+4 term segítségével:

| $\tau, \bar{\tau}$ | 42015 | 45111 | 93232 | 94461 |
|--------------------|-------|-------|-------|-------|
| 13591 | 28424 | 31520 | 79641 | 80870 |
| 82347 | 40332 | 37236 | 10885 | 12114 |
| 110210 | 68193 | 65097 | 16977 | 15748 |
| 124504 | 82489 | 79393 | 31272 | 30043 |

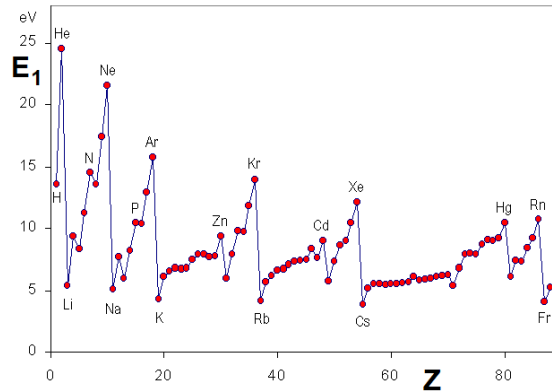
Rengeteg ehhez hasonló mátrix-szal összegezték a tapasztalatokat. A gyakorlatban azonban nem minden termkülönbséget lehetett megfigyelni – ezt ma azzal magyarázzuk, hogy az elektromos dipólátmenet valószínűsége lényegesen nagyobb, mint a kvadrupólé, vagy akár a mágneses átmeneteké (amelyeket az átmenet részletes tulajdonságai különböztetnek meg, és később szelektációs szabályok néven ismerjük meg őket).

A **hidrogén spektrumának** elemzése során sokféle vonal-sorozatra derült fény: 1884-ben Balmer átható tartománybeli vonalakat talált, 1904-ben Lyman UV vonalakat, később Paschen és Bach, Brackett is Pfund is továbbiakat. Ezek vizsgálatában fontos lépés volt a Rydberg-Ritz féle kombinációs szabály (1908), amely kimondta, hogy bármely vonal frekvenciája más vonalak összege vagy különbsége alapján adódik. Többek között ennek segítségével kiderült, hogy a τ és $\bar{\tau}$ termek ugyanazok, továbbá sorozatba rendeződnek: $\tau_n = 110\,000 \text{ cm}^{-1} \frac{1}{n^2}$, és ezekből össze lehet rakni az összes vonalat. A Balmer-sorozat $f_{n,2} = \tau_n - \tau_2$ módon adódik, a Lyman-sorozat $f_{n,1} = \tau_n - \tau_1$ módon, illetve a Paschen-Bach ($n, 3$), Brackett ($n, 4$) és Pfund ($n, 5$) sorozatok is összerakhatóak. Ezeket tehát úgy adhatjuk meg le, mint $\frac{1}{n^2}$ és $\frac{1}{m^2}$ erősségű termek különbségeit. Ennek felismerésében fontos lépés volt a Rydberg-Ritz féle kombinációs szabály (1908-ból, Rydberg formulája alapján alkotta meg Ritz), amely kimondta, hogy bármely vonal frekvenciája más vonalak összege vagy különbsége alapján adódik, hiszen itt $(\tau_n - \tau_m) = (\tau_n - \tau_k) - (\tau_m - \tau_k)$. A $110\,000 \text{ cm}^{-1}$ konstans c -vel szorozva $3,3 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$, ez h -val szorozva $2,2 \cdot 10^{-18} \text{ J}$, ami $13,6 \text{ eV}$.

3.2. Az atomok energiaszintjei

Az atomok energiaszintjeit (amelyet a fix kilépési munkák is indikálnak) elektronok és atomok ütköztetésével vizsgálhatjuk. Erre szolgál a **Franck-Hertz kísérlet**, amelyet James Franck és Gustav Hertz (a „hertz” egységről is ismert Heinrich Hertz nagybátyja) végeztek el, és 1925-ben Nobel-díjat kaptak érte. Ebben vákuumcsőben három elektródát helyeztek el: egy elektron-kibocsátó katódot, egy gyorsítófeszültséget létrehozó hálót, és egy előbbihez képest enyhén pozitív anódot, lásd 9. ábra. A létrejött tér tehát a rácsnál enyhe minimummal rendelkezik, ezután megint nő. Így a rácstól elhagyó elektronok számára egy minimális elérendő energia-gát jön létre.

A kísérletben az anódáramot mérték a gyorsítófeszültség függvényében. Azt találták, hogy kis feszültségek esetén az áram erősen nő a feszültséggel, majd egy bizonyos értéknél ($4,9 \text{ V}$ higanygőznél, 19 V neonnál, $3,8 \text{ V}$ Cs esetén) az áram erősen visszaesik. Ezután megint növekedés látható, de az eredeti érték többszöröseinél mindig visszaesés tapasztalható, lásd 9. ábra. Frank és Hertz úgy magyarázta a jelenséget, hogy alacsony feszültségnél a gyorsított elektronok energiája kicsi, ezért tisztán rugalmasan szóródnak a gáz atomjain (és mivel sokkal könnyebbek azoknál, ilyenkor



10. ábra. Az atomok első ionizációs energiája: leggyengébben kötött (külső) elektron energiája.

az összes energiájuk megmaradt). A feszültség növelésével nő az anódot elérni képes elektronok száma. Az adott U feszültségen áthaladás esetén az elektronok energiája eU , és ha ez eléri azt a bizonyos kritikus értéket, gerjeszthet egy elektront, elvesztve az energiáját (és átadva egy kötött elektronnak). Ezután már nem tudja legyőzni a rács után jövő enyhén negatív teret. Ahogy megint növeljük a feszültséget, az elektronok már *két* rugalmatlan ütközést is szenvedhetnek, és így tovább. A gerjesztési energiák az atomokra jellemzőek, és hogy melyik konkrét energiaszint jelenik meg, abban a hatáskeresztmetszeteknek van fontos szerepe.

Neon gáz esetén a kritikus feszültség elérésének helyén (a rácshoz közel) narancssárga fény jelenik meg, majd ez egyre hátrébb kúszik, végül dupla feszültségnél két fénylő régió jelenik meg, és így tovább. Ennek oka, hogy a gerjesztett atomok visszatérnek egy kisebb energiájú állapotba (az eredeti, 18.7 eV körüli gerjesztési energiájából 16.6 eV körüli energiára, amely tehát 2 eV energia-különbségnek és így körülbelül 600 nm-nek felel meg). A Hg energiájának 254 nm hullámhosszú fény felel meg, így az nem látható.

A kísérlet bonyolult, mert jól definiált energiájú, intenzív, kollimált nyalábra van hozzá szükség, azaz egyfajta elektronágyúra van szükség. Emellett a gáz nyomása igen alacsony kell hogy legyen, centiméter körüli szabad úthosszal, jól ismert sűrűségű egyatomos gázból, amelyben lehetőleg kicsi a sűrűségfluktuáció (azaz mégsem lehet nagyon kicsi a sűrűség).

Megint atomszámmal és elektronszámmal arányos jelenséget látunk, azaz itt is elemi folyamatot kell feltételeznünk. Ma is végeznek ezzel kísérleteket, a valódi áram-feszültség függés bonyolultabb, sok csúccsal rendelkezik az elektronszerkezetnek megfelelően. Atomok és molekulák különböző kölcsönhatásainak teljes hatáskeresztmetszete mérhető így. Az alapállapotba való visszatérést sokszor fénykibocsátás kíséri, és ez a legjobb módszer az energiaszintek tanulmányozására - a mechanizmustól függetlenül a kibocsátott foton energiája közvetlenül az energia-szintkülönbségnek felel meg.

A fenti kísérleti tapasztalatok összegzéseként azt mondhatjuk, hogy az atomoknak meghatározott, diszkrét energiával bíró stacionárius állapotai vannak. Az **alapállapot** felett **gerjesztett állapotok** vannak, amelyek egyre sűrűbben helyezkednek el. Az atomokat adott energia felett **ionizálni** lehet, ekkor a spektrum folytonossá válik.

Fotoeffektussal (ennek leírását ld. a 4.2. alfejezetben) és a Frank-Hertz kísérlettel is megfigyelhető a leggyengébben kötött elektron kötési energiája, azaz az ionizációs energia. Efelett új kritikus energiák jelennek meg, kötöttebb elektront kilökve vagy többszörös ionizációt létrehozva. Az első ionizációs energia az alkáliaktól a nemesgázokig erősen nő, de nagyobb atomokra valamelyest csökken, tehát fűrészfog jellegű függvény, amely tipikusan 5-25 eV között van (lásd 10. ábra). A legnagyobb értéket a héliumnál veszi fel. Egy adott pályán lévő elektron kötési energiája a rendszámmal nő, és erősen csökken az elektronpálya függvényében: a külső elektronok sokkal kevésbé kötöttek. Ennek kiszámítása a kvantummechanika nyelvén lehetséges, de ott is csak numerikusan és/vagy különféle közelítéseket (például perturbációs számítást) alkalmazva.

A Rutherford-modellen tehát túl kell lépni, hiszen abban tetszőleges energiájú pályák megengedettek, továbbá egy másik megoldatlan probléma is felmerül: a körpályán mozgó, és ezért gyorsuló töltések miért nem sugároznak? Ezekre a problémákra ad választ a Bohr-modell.

3.3. A Bohr-modell

Bohr az előző alfejezet végén olvasható kérdésekre konzisztens választ adó modellt épített fel. Ennek lényege:

- az elektronok perdulata csak $L = mvr = pr = nh/2\pi = n\hbar$ lehet,
- az ilyen pályákon nincsen gyorsulásból fakadó sugárzás.

Minden pályának ebből adódó (Coulomb+mozgási) energiaszintek felelnek meg, és a fény elnyelése és kibocsátása ezen pályák közötti átmenetnek felel meg. Az első posztulátumot a de Broglie-féle $\lambda = h/p$ feltevéssel úgy is meg lehet fogalmazni, hogy a $2r\pi$ kerületű pályákra éppen egész számú hullám fér rá, azaz $n\lambda = 2r\pi$. Ez azt jelenti, hogy a pályákon kvázi **állóhullámok** jelennek meg, és kizárólag ezen pályák nem sugároznak. Mindjárt látni fogjuk, hogy ez az egyszerű feltevés jó eredményre vezet!

Az energiaszinteket úgy lehet kiszámolni, hogy kiindulunk a Coulomb-erő (a Ze töltésű mag és az e töltésű elektron között) és a pályán tartó centripetális erő egyenlőségéből, azaz

$$k \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} = \frac{p^2}{mr}, \text{ innen } L^2 = p^2 r^2 = kZe^2 mr = n^2 \hbar^2, \text{ tehát} \quad (86)$$

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{kZe^2 m} = \frac{n^2}{Z} r_{\text{Bohr}}, \quad p_n = \frac{n\hbar}{r_n} = \frac{n\hbar kZe^2 m}{n\hbar} = \frac{\hbar Z}{nr_{\text{Bohr}}}, \text{ és } v_n = \frac{kZe^2}{n\hbar} = \frac{\hbar Z}{nr_{\text{Bohr}} m}, \quad (87)$$

ahol bevezettük az

$$r_{\text{Bohr}} = \frac{\hbar^2}{ke^2 m} = \frac{\hbar}{\alpha mc} \approx 52918 \text{ fm} \approx 52,92 \text{ pm} \approx 0,53 \text{ \AA} \quad (88)$$

Bohr-sugarat. Mivel az adott elektron pályájához tartozó energia $-kZe^2/r$, a mozgási energia pedig $mv^2/2$, ezért az energiaszintek a kettő összegéből

$$E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{kZe^2}{r} = \frac{mk^2 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} - \frac{mk^2 Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{\hbar^2}{2mr_{\text{Bohr}}^2} = -\frac{Z^2}{n^2} E_0, \quad (89)$$

ahol $E_0 = 13,6 \text{ eV}$. Az **átmeneti energiaszintek** $n^{-2} - m^{-2}$ rendszere ezzel kiválóan magyarázható, és a konkrét értékek is stimmelnek, ha az elektron tömege helyett a $\mu_e = (m_e m_p)/(m_e + m_p)$ redukált tömeget írjuk be (ez persze csak ezrelékes korrekció). Az első ionizációs energia így hidrogén esetén $E_0 \text{ eV}$, $Z > 1$ esetén pedig $E_0 Z^2$.

Probléma, hogy **többelektronos rendszerekben**, ahol $Z \neq 1$, a modell nem igazán működik. Vannak apróbb javítások pl. **Moseley** felfedezi, hogy az atomok elektronokkal való bombázása esetén észlelt legerősebb röntgen vonal (a K-alfa vonal) empirikusan úgy írható le, hogy a rendszámot Z helyett $Z - 1$ -gyel helyettesítjük, és az 1. és 2. pálya közötti átmenetet vesszük. Ezt a külső elektronok belsőkre vonatkoztatott árnyékoló hatása magyarázza, ami túlmutat a Bohr-modellen.

További probléma, hogy a Bohr-modell **ellipszispályákat** nem enged meg, pedig ezek is elvileg megfelelőek lehetnének. A kinematikai probléma megoldásai a Binet-egyenletből könnyen adódnak. Itt

$$u = \frac{1}{r} = c_1 \cos \varphi + c_2 \sin \varphi - \kappa, \text{ ahol } \kappa = -\frac{am}{L^2} = -\frac{\alpha \hbar cm}{L^2}, \quad (90)$$

(itt $a = \alpha \hbar c = ke^2$, k a Coulomb-állandó, e az elemi töltés, és α a finomszerkezeti állandó). Legyen egy kezdetben a vonzócentrumtól R távolságban lévő, erre merőlegesen mozgó, a centrális erőtér miatt állandó L perdulatú tömegpontunk. Ekkor $u(0) = 1/R$ és $u'(0) = 0$ (mivel a pálya ezen pontján $v \perp r$, azaz $\dot{r} = 0$), így az ezt kielégítő megoldás alakja

$$u = \left(\frac{1}{R} + \kappa \right) \cos \varphi - \kappa, \text{ azaz} \quad (91)$$

$$r = \frac{-1/\kappa}{1 - (1 + 1/R\kappa) \cos \varphi} = \frac{R(1 - \epsilon)}{1 - \epsilon \cos \varphi} = \frac{A(1 - \epsilon^2)}{1 - \epsilon \cos \varphi}, \quad (92)$$

ahol bevezettük az $\epsilon = 1 + 1/R\kappa$ excentricitást, illetve az $A = R/(1 + \epsilon)$ nagytengelyt. Ez a polárkoordinátákban vett egyenlet $\epsilon < 1$ esetén ellipszist ír le ($\epsilon = 1$ esetén parabolát, $\epsilon > 1$ esetén hiperbolát, $\epsilon = 0$ esetén kört). A perdület közvetlenül az excentricitással függ majd össze:

$$\epsilon = 1 + \frac{1}{R\kappa} = 1 + \frac{L^2}{Ram} \Leftrightarrow L^2 = amR(1 - \epsilon) = amA(1 - \epsilon^2) = \frac{amB^2}{A}, \quad (93)$$

ahol bevezettük a $B = A\sqrt{1 - \epsilon^2}$ kistengelyt is. Innen az energia is kifejezhető:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{a}{R} = \frac{L^2}{2mR^2} - \frac{a}{R} = \frac{a(1 - \epsilon)}{2R} - \frac{a}{R} = -\frac{a(1 + \epsilon)}{2R} = -\frac{a}{2A} \quad (94)$$

$$(95)$$

Érdemes megfigyelni, hogy az energia $1/A$ módon függ a pálya geometriájától, míg a perdület $A(1 - \epsilon^2)$ módon. Jelentős különbség a Bohr-modellhez képest tehát, hogy itt egyetlen energiához sokféle különböző perdület tartozhat, az ϵ excentricitástól függően. Az ilyen pályákat is leíró modellel Sommerfeld tett javaslatot, ezt a következő szakaszokban tárgyaljuk. Előbb azonban lássuk, mit tudunk egyáltalán az atomok perdületéről, és ezek mit támasztanak alá: a Bohr-modell $L = n\hbar$ jóslatát, vagy az adott energiaszinthez különféle perdületeket rendelő elliptikus pályák lehetőségét. Ennél is közvetlenebbül megjelenő kérdés, hogy a Bohr-modellben a körpályákon keringő elektronok síkja vajon milyen irányban állhat?

Gyakorló feladat

A hidrogénatom első ionizációs energiája 13,6 eV. Milyen frekvenciák felelnek meg ez alapján az egy energiaszintet történő ugrásoknak ($n = 1 \rightarrow 2, n = 2 \rightarrow 3, n = 3 \rightarrow 4$)?

3.4. Az atomok mágneses momentuma és perdülete

Az impulzuszórához klasszikusan **mágneses momentum** tartozik! A mágneses momentum definíciója alapján kör alakú áramhurokra $\vec{\mu} = I\vec{A}$, amiből az e töltés és a $T = 2r\pi/v$ periódusidő miatt $I = e/T = ev/(2r\pi)$, és $A = r^2\pi$ alapján általánosítva (a perdület keringő részecskére vonatkozó $L = mrv$ definíciójával) a helyes

$$\vec{\mu} = \frac{e\vec{L}}{2m} \quad (96)$$

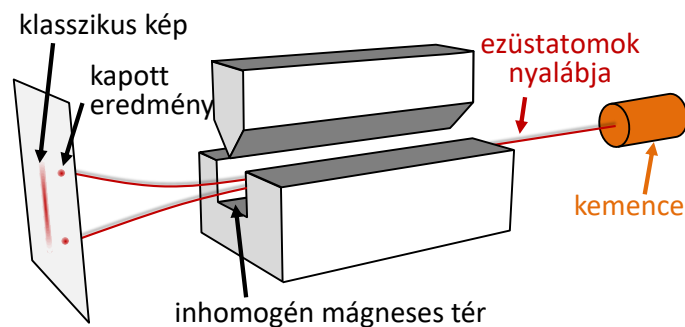
formulához jutunk. Eszerint tehát ha adott energiaszintű atom esetén a perdület iránya vagy nagysága más és más értékeket vesz fel, akkor a mágneses momentum is megfelelő értékű lesz – ez viszont mérhető. A momentumhoz tartozó energia B mágneses térben $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, tehát adott B tér mellett az energia a mágneses momentum abba az irányba eső vetületét méri. Az ebből adódó erő $\vec{F} = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$, ami adott z irányú $(0, 0, B_z)$ mágneses tér esetén $\vec{F} = \mu_z \nabla B_z$. Ha tehát a perdület nagysága vagy iránya kvantált, akkor egy atomnyaláb egyes atomjaira diszkrét, különböző mértékű erő hat, így a nyaláb diszkrét komponensekre eshet szét. Mivel az atomnyalábban alapértelmezés szerint alapállapotú atomok vannak, így atomról atomra várhatóan a perdület iránya az, ami változhat.

Ez alapján végezte el **Stern és Gerlach** 1922-ben a híres kísérletét (lásd a 11. ábrát, illetve az eredeti Zeitschrift für Physik **8** (1922) 110, Physik **9** (1922) 349 és 353 cikkeket). A kísérletben inhomogén nagyságú, de mindenhol z irányú B mágneses térbe vezettek monoenergiás atomnyalábot, amelynek mágneses momentumára így erő hatott. Ekkor a v sebességgel l távolságot megtevéő atomok θ eltérülési szöge így kapható meg (\perp a z -re merőleges síkot jelöli):

$$F = ma_{\perp} = \mu_z \nabla B, \quad (97)$$

$$v_{\perp} = a_{\perp} t = \frac{\mu_z \nabla B}{m} \frac{l}{v}, \quad (98)$$

$$\theta = \frac{v_{\perp}}{v} = \frac{\mu_z \nabla B l}{mv^2}. \quad (99)$$



11. ábra. A Stern–Gerlach-kísérlet.

adott μ_z -hez (azaz adott irányú perdülethez) adott eltérés tartozik tehát.

A kérdés az volt, hogy az abszolútértékben μ momentummal rendelkező ezüst atomnyaláb felhasad-e különböző, diszkrét μ_z értékű nyalábokra, vagy a $\pm\mu$ között tetszőleges értéket vesz-e fel (azaz megerősíti vagy cáfolja-e mérés a perdület és így a mágneses momentum kvantáltságát). Elsőre túl nagy (és ezért átfedő) volt a felhasadás eredményeképpen létrejövő két folt, de középen minimumot észleltek, ami már bizonyítéknak tűnt. Aztán a nyalábot leszűkítő kollimációs rést kör alakúról vékony téglalap alakúra cserélték, és így már megjelent a két különálló folt. Más nyalábokkal is hasonló volt a tapasztalt, komponensek távolsága állandó, elrendezésük szimmetrikus a középvonalra, a csoportok intenzitása egyenlő. A perdület – vagy legalábbis a mágneses momentum – kvantáltsága tehát bizonyított volt! A kísérletet más atomokra is elvégezve változatos kimeneteleket tapasztalhatunk, pl. a hélium nem térül el, H és Ag két komponensre bomlik, N négy komponensre, O ötre.

Otto Stern bevezetője a kísérlethez 1921-ben így hangzott:

„ha sikerül végrehajtani, a kísérlet eredményeként egyértelműen dönthetünk a klasszikus és a kvantumelméleti kép között”.

Pauli így írt 1922-ben Gerlachnak a kísérlet eredményét látva:

„Most már talán a hitetlen Stern is meggyőzhető az iránykvantálásról”.

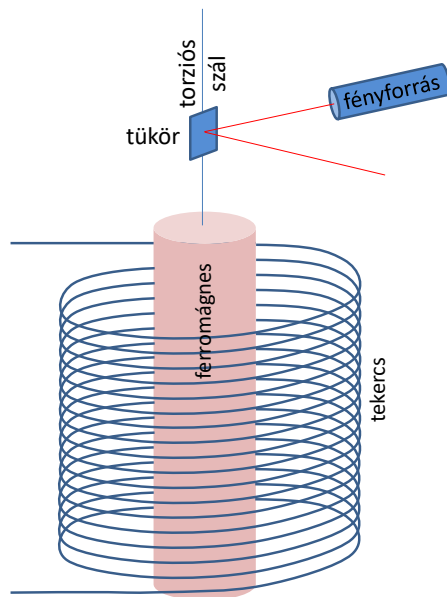
Kérdés ugyanakkor, hogy a fentiekben mért mágneses momentumok valóban az atomok perdületével vannak kapcsolatban! Az **Einstein–de Haas-kísérlet** (lásd a 12. ábrát és az eredeti DPG Verhandlungen **17** (1915) 152) ezt a relációt próbálta ellenőrizni (a felhasadásból adódó következtetés független vizsgálataként). Einstein az 1914-es Berlinbe való érkezésekor (a Birodalmi Fizikai és Technikai Intézetben kezdett dolgozni) kihasználta az itt fellelhető jelentős kísérleti infrastruktúrát, és kollégájával, a holland de Haasszal kidolgozta a következő kísérletet. Feltette, hogy a ferromágneses anyag mágnesességét az atomok mágneses momentuma okozza, amelyet viszont a perdületük, és így, ha átfordítjuk egy elektromágnes polarizációját, akkor a perdület is megváltozik, amelyet viszont megfigyelhetünk.

Ferromágneset függesztett fel vékony torziós szálra, amelyre tükröt erősítettek, hogy a forgását egy lézer segítségével könnyű legyen megfigyelni. A ferromágnesre tekercset csévéltek, és az ebben folyó árammal állította be (vagy fordította át) a mágnes atomjainak mágneses momentumát, és ezzel perdületét. A mágneses momentum és az impulzusmomentum változásának hányadosát vizsgálta. Ha átfordulásról van szó, akkor ez a

$$\frac{\Delta\mu_{\text{teljes}}}{\Delta L_{\text{teljes}}} = \frac{2N\mu}{2NL} = \frac{\mu}{L} \quad (100)$$

ha N darab L perdületű és μ mágneses momentumú atom található a rúdban. Tehát a rúd mágneses momentumának és a perdületének megváltozásán keresztül tulajdonképpen az atomok mágneses momentumának és perdületének arányát vizsgálhatjuk. A fenti naív modell eredményeként $\mu/L = e/2m$ adódik. Ugyanakkor nem pontosan ezt tapasztaljuk, hanem valójában

$$\frac{\mu}{L} = g \frac{e}{2m} \quad (101)$$



12. ábra. Az Einstein–de Haas-kísélet. Ferromágneszt függesztünk fel vékony torziós szálra, amelyre tükröt erősítettünk, hogy a forgását egy lézer segítségével könnyű megfigyelni. A ferromágnesre tekercest csévélünk, és az ebben folyó árammal módosíthatjuk a mágnes atomjainak mágneses momentumát, és ezzel perdületét. A perdületmegmaradás miatt viszont ekkor elfordul a tekerés, ha a mágneses momentum és a perdület tényleg ugyanabból a jelenségből fakad.

adódik a kísérletekben, ahol $g \neq 1$ a giromágneses faktor, a μ/L hányados eltérése a jószolt $e/2m$ értéktől. Az Einstein–de Haas-kíséletben tehát tulajdonképpen ezt a giromágneses faktort mérhetjük, és ennek értéke a tapasztalat szerint eltér egytől!¹

3.5. A Sommerfeld–Wilson-féle kvantálás, a „régí kvantumelmélet”

Bár a Bohr-modell igen sikeres a hidrogén spektrumának leírásában, van néhány hiányossága:

- A perdület ad hoc kvantálása túlságosan specifikus elvnek tűnik.
- Egy adott energiájú elektron csak adott nagyságú perdülettel rendelkezhet.
- A modellben perdületvektor térbeli iránya tetszőleges lehet.
- Nem magyarázza meg a spektrum $o(10^{-4})$ finomságú szerkezetét.

Sommerfeld elliptikus pályákról szóló javaslata (pontosabban az emögött rejló kvantálási elv) ezen problémák leküzdése céljából született. Noha ez a magyarázat ma már meghaladott, de történeti fontossága és matematikai érdekessége miatt jelen jegyzetben is tárgyaljuk. Sommerfeldet az motiválta, hogy a h Planck-állandó éppen a mechanikából is ismert hatásnak megfelelő dimenzióval rendelkezik, ezért legyen az integrált hatás az, ami kvantált. Az elmélet tehát abból indul ki, hogy a rendszer **Hamilton-féle leírásában** az x_i koordinátaéhoz $p_i = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{x}_i$ kanonikus impulzus adódik, ahol \mathcal{L} a rendszer Lagrange-függvénye. A Hamilton-függvény pedig ekkor $\mathcal{H} = \sum_i \dot{x}_i p_i - \mathcal{L}$ módon írható fel, azaz a Lagrange-függvény Legendre-transzformáltjaként adódik. Ebben a keretrendszerben dolgozva az egyes impulzuskomponensekre

$$\int_{H(p_i, q_i)=E} p_i dq_i = n_i h \quad (102)$$

¹Érdeemes megemlíteni az 1915-ben felfedezett Barnett-hatást is, melynek során egy test forgás hatására felmágnesesődik – ez tulajdonképpen az Einstein–de Haas-hatás „megfordítottja”.

kvantálás teendő fel (ahol az integrál egy periódusra írandó fel, állandó energia mellett).

Ennek illusztrálásaként vegyünk egy egydimenziós oszcillátort. Erre $H = p^2/2m + Dx^2/2$, ahonnan $\dot{x} = p/m$ és $\dot{p} = -Dx$, ahonnan a mozgásegyenlet $\ddot{x} + \omega x = 0$ és $\omega^2 = D/m$, azaz $x = x_0 \sin(\omega t)$. A kvantumfeltétel pedig

$$\int p dx = \int m \dot{x} dx, \quad (103)$$

$$\text{ami az } x = x_0 \sin(\alpha) \text{ helyettesítéssel} \quad (104)$$

$$m\omega x_0^2 \int \cos^2(\alpha) d\alpha = m\omega\pi x_0^2 = nh, \text{ azaz}$$

$$x_0^2 = \frac{nh}{\omega m\pi}, \text{ ahonnan} \quad (105)$$

$$E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}Dx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 = n\omega\hbar. \quad (106)$$

Két dimenzióban $D_x = D_y$ esetén $\omega_x = \omega_y = \omega$, és ekkor itt is $E_n = n\hbar\omega$, de $n = n_x + n_y$, azaz pl. az $n = 1$ energiaszint kétszeresen degenerált ($n_x = 0, n_y = 1$ vagy fordítva).

Következőként vegyünk egy kétdimenziós, (r, φ) polárkoordinátákkal felírt hidrogénatomot (illetve annak elektronját). Erre a

$$H = \frac{mv^2}{2} - \frac{a}{r} = \frac{m}{2} [\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi})^2] - \frac{\alpha\hbar c}{r} \quad (107)$$

Hamilton-függvény adódik. A kanonikus koordináták $p_r = m\dot{r}$, $p_\varphi = mr^2\dot{\varphi}$ módon adódnak (ahol p_φ éppen a perdület. Az előző szakaszban leírt ellipszispályákra kell venni az integrált, és így a

$$\int p_r dr = n_r \hbar, \quad (108)$$

$$\int p_\varphi d\varphi = n_\varphi \hbar \quad (109)$$

kvantumfeltételek írhatóak fel. A második egyenlet egyszerűen megoldható: mivel a perdület állandó, csak a φ polárszögre kell integrálnunk, így egyszerűen a p_φ perdület 2π -szeresét kapjuk, amely $n_\varphi \hbar$ -val egyezik meg:

$$p_\varphi = n_\varphi \hbar \quad (110)$$

Az első egyenlet integrálja is elvégezhető (r -et és p_r -et is φ -vel kifejezve), és

$$\int p_r dr = 2\pi\sqrt{aAm}(1 - \sqrt{1 - \epsilon^2}) = n_r \hbar, \text{ azaz mivel} \quad (111)$$

$$\sqrt{aAm}(1 - \epsilon^2) = L = p_\varphi = n_\varphi \hbar, \text{ így} \quad (112)$$

$$\sqrt{aAm} = (n_r + n_\varphi)\hbar, \text{ és} \quad (113)$$

$$\sqrt{A} = (n_r + n_\varphi) \frac{\hbar}{\sqrt{am}} \quad (114)$$

adódik. Ebből $A = (n_r + n_\varphi)^2 r_{\text{Bohr}}$ adódik, az energiára pedig a korábbiakkal megegyezően $E = -E_0/n^2$, ahol $n = n_r + n_\varphi$, Sommerfeld elnevezése szerint a „kvantumösszeg”. Ha (a későbbi összehasonlítást megkönnyítendő) bevezetjük az $l = n_\varphi$ jelölést, a pályák tengelyeire energiájára és perdületére tehát

$$A_{nl} = n^2 r_{\text{Bohr}} \quad (115)$$

$$B_{nl} = n l r_{\text{Bohr}} \quad (116)$$

$$L_{nl} = l \hbar \quad (117)$$

$$E_{nl} = -\frac{E_0}{n^2} \quad (118)$$

feltételek teljesülnek. Ez azt jelenti, hogy a nagytengely a Bohr-sugárnak megfelelő méretű lesz, míg a kisebbik tengely ennek l -szerese, míg az excentricitás $\epsilon = \sqrt{n^2 - l^2}/n$ módon adódik. A perdület pedig a \hbar egész számú többszöröse, de nem n -től, hanem l -től függ. Sommerfeld eredeti felírása szerint $l = 1, \dots, n$ értékeket vehet fel, ugyanakkor a rendszer matematikailag megengedi az $l = 0$ állapotokat is, ez az úgynevezett Coulomb-oszcillátor, amikor a pálya excentricitása 1, magyarul ellipszis helyett egy szakasról beszélünk. Ez fizikailag már persze kevésbé világos a dolog: az elektron pályája ekkor átmegy a magon.

3.6. A hidrogénatom Sommerfeld-modellje

Térjünk most át a háromdimenziós hidrogénatom esetére. Gömbi koordinátarendszerben (r, θ, ϕ koordinátákkal) a Hamilton-függvény a kétdimenziós problémához hasonló,

$$H = \frac{m}{2} \left[\dot{r}^2 + (r\dot{\phi})^2 + (r\dot{\theta} \sin \phi)^2 \right] - \frac{\alpha \hbar c}{r}. \quad (119)$$

A kanonikus impulzusok és a kvantálási feltételek az alábbiaknak megfelelően adódnak:

$$p_r = \frac{\partial H}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad \int p_r dr = n_r \hbar, \quad (120)$$

$$p_\phi = \frac{\partial H}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \dot{\phi}, \quad \int p_\phi d\phi = n_\phi \hbar, \quad (121)$$

$$p_\theta = \frac{\partial H}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta} \sin^2 \phi, \quad \int p_\theta d\theta = n_\theta \hbar. \quad (122)$$

Ezzel a hamiltoni így is felírható:

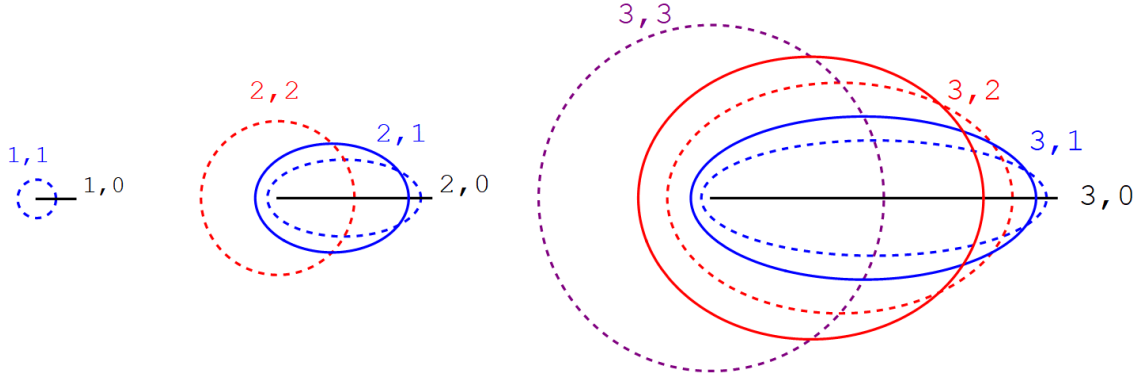
$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} + \frac{p_\theta^2}{r^2 \sin^2 \phi} \right) - \frac{\alpha \hbar c}{r} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\alpha \hbar c}{r}, \quad (123)$$

Innen ismét az $E = H$ feltételből ki lehet fejezni az egyes koordinátákat, majd a kvantálási feltételek egyenleteit kell alkalmazni, az integrálást az adott ellipszispályára elvégezve. Így a következők adódnak:

- Az energia továbbra is $E_n = -E_0/n^2$ módon számítható ki, ahol $n = n_r + n_\theta + n_\phi$.
- A lehetséges pályák továbbra is $A_{nl} = n^2 r_{\text{Bohr}}$, $B_{nl} = n l r_{\text{Bohr}}$ tengelyekkel rendelkeznek.
- A p_ϕ kanonikus impulzus éppen a perdület z -vetülete, amely így állandó, és az integrálfeltételből $p_\phi = n_\phi \hbar$ adódik. Ezt többnyire úgy írjuk fel, hogy $n_\phi = m$, azaz $p_\phi = m\hbar$, a pályák tehát ennyire lehetnek dőltek vagy éppen ($m = 0$ esetén) „vízszintesek”.
- Az L perdületre az $l = n_\phi + n_\theta$ kvantumösszeg vonatkozik, és ezzel továbbra is $L = \hbar l$ adódik. Mivel $l = n - n_r$, így ennek maximális értéke $n_r = 0$ mellett van, amikor körpályáról beszél Sommerfeld. Valóján $n_r > 0$, és így l maximális értéke $l = n - 1$ mellett valósul meg.

Az így adódó lehetséges pályákat lásd a 13. ábrán. Fontos különbség a Bohr-modellhez képest, hogy itt létezhetnek nulla perdületű pályák is, például a hidrogénatom alapállapotú elektronjának nulla a pályaperdülete. Ez egydimenziós Coulomb-oszcillátornak tekinthető ebben a modellben. A modell másik fontos gondolata az impulzusmomentum iránykvantáltsága, amely szerint tehát a perdületvektor pályára merőleges vetülete csak $m\hbar$ értékeket vehet föl.

A Sommerfeld-féle modellben tehát az n, l, m kvantumszámok jellemzik az elektronokat, és egy adott l perdület-kvantumszám esetén $m = -l \dots l$ iránykvantumszámok (mágneses kvantumszámok) képzelhetők el. Érdeemes észrevenni, hogy ez viszont ellentmondásban áll a Stern–Gerlach-kísérlet két részre felhasadó nyalábjával: A fentiek szerint ugyanis $2l + 1$ lehetőség van a z irányú vetületére, $l\hbar$ és $-l\hbar$ között, és μ_z is ennek megfelelő értékeket vesz fel. Ez viszont mindig páratlan számú lehetőséget eredményez, viszont egyes atomok nyalábjai páros számú foltra oszlanak, azaz kétféle perdület-vetület valósul meg. Kérdés továbbá, hogy az $l = 0$ állapotban lévő hidrogén hogyan hasadhat fel? Az elektron pályájából adódó perdülete itt nulla, de mégis van valami mágneses



13. ábra. A hidrogénatom méretarányos elektronpályái a Bohr-Sommerfeld modellben, n, l címkéssel. Szaggatottal a történelmi tárgyalás során leírt pályák szerepelnek (ezek esetében $l = n$ is lehetséges, $l = 0$ viszont nem), míg folytonos vonallal a ($l < n$ és $\sqrt{l(l+1)}$ szempontjából is) javított Sommerfeld pályák. Az átláthatóság kedvéért az egyes n értékekhez tartozó pályák külön szerepelnek. A különböző színek különböző l értékeket jelölnek (fekete, kék, piros, lila sorrendben).

momentuma! Olyan, mintha az elektronnak lenne egy saját perdülete, a pályától függetlenül! Erre később, a 7. fejezetben térünk vissza. Bevezetve az $\mu_B = e\hbar/2m$ Bohr-magnetont, a $\mu = \mu_B L/\hbar$ összefüggés lesz érvényes, azaz ha $L = l\hbar$, akkor $\mu = l\mu_B$, és $L_z = m\hbar$ esetén a $\mu_z = m\mu_B$ értékek lesznek lehetségesek. A giromágneses faktor az ettől való eltérést vizsgálja, ezzel $\mu = g\mu_B l$. Az elektron keringéséből fakadó momentumára valóban $g = 1$, de később kiderül, hogy az elektron sajátperdülete is mágneses momentumot eredményez, amelyre azonban $g_s \approx 2$, erre is később, a 7. fejezetben térünk vissza.

Fontos továbbá, hogy a hidrogénatom energiaszintjeinek finomszerkezetét is megadja a Sommerfeld modell relativisztikus általánosítása, amelyben $mv^2/2$ helyett $mc^2(1/\sqrt{1-v^2/c^2}-1)$ szerepel a Hamilton-függvényben. Itt a különböző l -ekre kapott energia-módosulás az $\alpha = ke^2/\hbar c$ finomszerkezeti állandó négyzetével lesz arányos:

$$E_{nl} = - \left[\frac{1}{n^2} + \frac{\alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right) \right] E_0. \quad (124)$$

Erről a fontos jóslatról is bővebben beszélünk majd a későbbiekben.

Érdekes ugyanakkor megemlíteni, hogy, mint később kiderül, a perdületre az $L = l\hbar, l = 1 \dots n$ és az $L = l\hbar, l = 0 \dots n-1$ verzió sem ad helyes eredményt, valójában $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}, l = 0 \dots n-1$ az, amit a kísérletek megfigyelnek, és ehhez hasonlóan az ellipszispálya kistengelye is módosul,

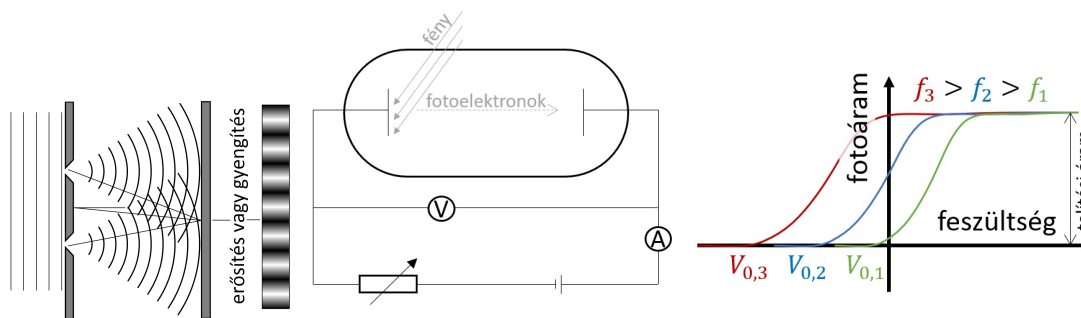
$$B_{nl} = n\sqrt{l(l+1)}r_{\text{Bohr}}. \quad (125)$$

A 13. ábra az így korrigált pályákat is mutatja. Valójában ez a hiba részben abból is adódik, hogy a fenti számolási eredmény elérésekor hibát vétettünk. Az asztrofizikában ismert, hogy ilyen pályaintegrálok számításakor az úgynevezett Delaunay-pályaelemeket kell figyelembe venni, amelyekre azonban nem ismert a kvantumfeltételekből adódó eredmény levezetése (lásd Manfred Bucher arXiv:0802.1366 cikkét a témában).

4. Az elektromágneses sugárzás részecsketermészete

4.1. A fény hullámtermészete

Fresnel és Young interferenciakísérletei óta ismert, hogy a fény hullámként viselkedik: egy fényhullám két részre osztása során keletkező fénysugarak az ernyőig eltérő utat tesznek meg, így eltérő fázisban érkeznak az ernyőre. A fáziskülönbségtől függően erősítik vagy gyengítik egymást, így a hullámhossztól függő mintázat jön létre (lásd a 14. ábra bal oldalát). A jelenség háttérben



14. ábra. Balra a fényvel elvégzett kétréskísélet és az ott tapasztalt interferenciamintázat, míg középen és a jobb oldali ábrán a fotoelektromos jelenség kísérlete látható. Balra az elrendezés, jobbra pedig az anódáram, a szaturációs mennyiségre normálva. Nagyobb frekvencia esetén nagyobb V_0 ellenfeszültséggel lehet megállítani a kilépő elektronokat. Van azonban egy küszöbfrekvencia, amely alatt egyáltalán nem lépnek ki elektronok, és egyáltalán nincs áram, feszültségtől függetlenül.

az áll, hogy az ernyő egy adott pontjába két úton keresztül juthat a fény, és így az ott megjelenő elektromos tér az alábbi két komponensből áll össze:

$$E_1(t) = E_0 e^{i(k s_1 - \omega t + \phi_1)} \quad E_2(t) = E_0 e^{i(k s_2 - \omega t + \phi_2)}, \quad (126)$$

ahol k a hullámszám, ω a körfrekvencia, $s_{1,2}$ az adott út hossza, és $\phi_{1,2}$ az adott forrás esetlegesen megjelenő fázisa. Így adott pontban a $T = 2\pi/\omega$ periódusidőnél lényegesen nagyobb intervallumra átlagolt intenzitásnak megfelelő „fényességet” észlelünk (vagy észlel az oda helyezett detektor: fényérzékeny lemez, CCD, fotoelektron-sokszorozó, antenna, stb.). Ez az amplitúdó négyzetéből így adódik:

$$\begin{aligned} I &\propto \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} |E_1(t) + E_2(t)|^2 dt = \frac{E_0^2}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \left| e^{i(k s_1 - \omega t + \phi_1)} + e^{i(k s_2 - \omega t + \phi_2)} \right|^2 dt \\ &= 2E_0^2 \{1 + \cos[k(s_1 - s_2) + (\phi_1 - \phi_2)]\}. \end{aligned} \quad (127)$$

Ebből azonnal látszik, hogy a megjelenő intenzitás az $s_1 - s_2$ útkülönbségtől koszinuszosan függ, és ez az ernyőn megjelenő mintázat forrása. Érdeemes megemlíteni, hogy általánosságban az ilyen diffrakciós képek esetében mindig a „forrás” Fourier-transzformáltja jelenik meg (ahogy az a differenciális hatáskeresztmetszetről is szóba került), és itt is a végeredmény két Dirac-delta összegének Fourier-transzformáltja lett. Ilyen diffrakciós képet természetes fényvel nehéz létrehozni, ugyanis ennek esetében sok különböző hullámhossz van jelen egyszerre, ami módosítja a fentieket. Young 1801-ben (természetes, a Napból származó, távcsővel fókuszált) fénysugarat osztott ketté papírlappal. A XX. században aztán reneszánszát élte ez a kísérlet, Laue 1912-es munkája nyomán (CuSO_4 kristályra bocsátott röntgensugarakat) ismertté vált a röntgendiffrakció módszere, amelyben a kristálysíkokon visszaverődött sugárnyalábok interferenciáját lehet megfigyelni, és ezáltal kristályok szerkezetét feltárni.

4.2. A fotoelektromos jelenség

Becquerel és a **fotovoltaikus hatás** 1839-es felfedezése irányította a figyelmet a fény és az elektromosság kapcsolatára (itt fény hatására a vezetési sávba mozognak az elektronok a kötött sávból). A **fotoelektromos jelenséget** Heinrich Hertz fedezte fel 1887-ben (róla nevezték el a frekvencia „hertz” egységét, a Nobel-díjas Gustav Hertz pedig az unokaöccse volt), ennek során fémből elektronok lépnek ki fény hatására. Elektromágneses hullámok hatására keletkező szikrákat vizsgált. Észrevette, hogy a hullámok és a szikrakeletkezés közé helyezett üveglap lecsökkenti a szikrakeletkezést, míg egy kvarcból készült ablak nem: előbbi ugyanis elnyeli az UV fényt. Lénárd Fülöp 1902-ben megfigyelte gázok ionizációját UV fény hatására, és frekvenciától való függést állapított meg (ezt a hatvanas években tudták csak részletesen vizsgálni, a kísérletek bonyolultak, néha távoli UV fény kell). A jelenséget végül Einstein magyarázta meg 1906-ban.

Az atomok energiaállapotait kis hullámhosszú elektromágneses sugárással vizsgálhatjuk, a színeképvonalakon túli tartományban. Ekkor a fotoelektrikus jelenséget figyelhetjük meg, amely során a **sugárzás elektront távolít el az atomokból**. Kísérletileg alkáli fémeket könnyű vizsgálni, mert itt a látható fény is létrehozza a jelenséget, míg más anyagoknál UV vagy még nagyobb frekvenciájú sugárzás kell. A kísérletek eredményeként azt kapjuk, hogy a kilépő fotoelektronok **száma az intenzitással arányos** és a frekvenciától általában nem függ. Van viszont egy **minimális frekvencia**, amely alatt intenzitásfüggetlenül nem lépnek ki elektronok. Ezen legkisebb frekvencia értéke az adott anyagtól függ: nátriumra $6 \cdot 10^{14}$ Hz, nikkelle 12,1 $\cdot 10^{14}$ Hz, aranyra 11,7 $\cdot 10^{14}$ Hz. A nátrium frekvenciájához kapcsolódó hullámhossz 500 nm, míg a nikkellehez tartozó 250 nm, ez utóbbi már az UV tartományban van.

A kísérlet konkrét megvalósítását lásd a 14. ábrán (illetve az eredeti Annalen der Physik **267** (1887) 983 publikációban): a **kilépő elektronok áramát** mérhetjük a fény intenzitása és frekvenciája függvényében is. Ha az anód és katód közötti feszültséget növeljük állandó intenzitás és frekvencia mellett, egyre több kilépő elektront észlelünk áram formájában. Ha az összes kilépő elektron eljut az anódra, akkor hiába növeljük a feszültséget, az áram nem növekszik tovább, ez a **szaturációs áram** amelynek értéke csak az intenzitástól függ. Ha a feszültséget negatív irányban csökkentjük, egyre kisebb áramot mérünk. A negatív irányban vett legnagyobb feszültség (V_0) annak felel meg, amelyet a kilépő elektronok még éppen le tudnak győzni. Ez az elektronok mozgási energiájánál felel meg, és értéke a frekvenciától függ, méghozzá lineárisan: $eV_0 = a + bf$.

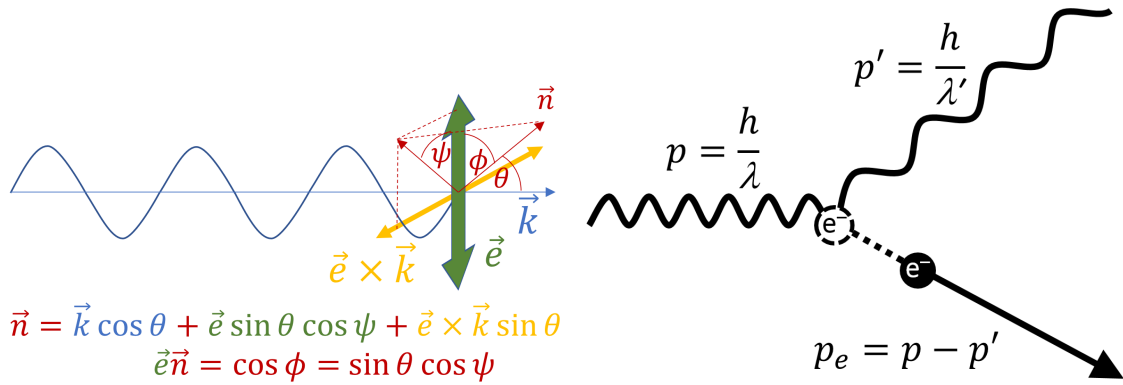
A kísérleteket úgy lehet értelmezni, hogy a bejövő fény energiája részben az elektron atomból való kilépésére fordítódik, részben az elektron kinetikus energiájára, és az elektron még a katódnak is adhat valamekkora energiát, azaz $E_f = W + E_e + \Delta k$, azaz $E_e \leq E_f - W$. Itt a W kilépési munka tulajdonképpen az atom ionizációs energiája. Ha ezeket az elektronokat V_0 feszültséggel éppen meg tudjuk állítani, akkor $eV_0 = E_e$, tehát $eV_0 = E_f - W$. Ez éppen a kívánt $a + bf$ lineáris összefüggés, és az együtthatók mérése alapján $E_f = hf$, ahol h a Planck-állandó, $6,626 \cdot 10^{-34}$ Js. A küszöbfrekvenciára pedig $W = hf_0$, mivel ekkor éppen kiszabadulnak az elektronok, de a legkisebb feszültségát sem tudják már legyőzni. Az intenzitástól mindegyik érték független, holott klasszikusan azt várnánk, hogy egy intenzív (sok energiát szállító), de alacsony frekvenciájú hullám is kilökheti az elektronokat. A megfigyelések tehát csak úgy értelmezhetőek, hogy a **fény kvantumok, azaz fotonok formájában terjed**, és ezen kvantumok hf energiát hordoznak, ők tudnak kilökní egy elektront. Hiába nagy a fény intenzitása, ha a frekvenciája kicsi, akkor az egyes kvantumok energiája is kicsi. Később látni fogjuk, impulzusuk is van, ennek értéke pedig h/λ .

Megjegyzendő, hogy nagy intenzitású monokromatikus fény esetében elképzelhető, hogy az elektron egyszerre több fotonnal is kölcsönhat, és így a küszöbfrekvencia alatt is észlelhetőek kilépő elektronok. A hullámképet úgy lehetne használni, hogy az átadott energia a bejövő hullám energiaáram-sűrűségétől függ, illetve egyfajta akkumulációs időtől, amíg összegyűlik elég energia a kilépéshez. Ekkor $W = j\tau/nd$, ha j az áramsűrűség [W/m^2], n az elektronok sűrűsége és d a behatolási mélység. Ha n nagyságrendje 10^{28} elektron köbméterenként, a behatolási mélység a hullámhossz, azaz kb. 10^{-7} m, míg a szükséges energia néhány eV, azaz 10^{-19} J, akkor 10^{-3} W/m² esetén kb. 2000 óra jön ki. Ezzel szemben sokkal kisebb energiaáram esetén is 10^{-10} másodpercnél kisebb az elektron kilépési ideje.

Összességében azt látjuk, hogy az elektronok azonos energiával lépnek ki monokromatikus fény esetén, ezt a hf energiájú fotonok elnyelése okozza. A fotoelektronok száma továbbá arányos az intenzitással és az atomok számával is, tehát elemi eseményekről van szó. Ebből a sugárzási tér kvantáltsága következik, és a kvantáltság az atomokkal való kölcsönhatás során figyelhető meg. Egy 40 W-os fehér égő nagyjából 10^{20} db fotont bocsát ki másodpercenként. A sugárzási tér tehát az anyag atomos jellegéhez hasonló és eltérő (hullám-) tulajdonságokkal is rendelkezik.

Gyakorló feladat

Adott $j = 10^{-3}$ W/m² intenzitású elektromágneses sugárzás d mélységben hatol be egy fémlapba. Az elektronok számsűrűsége 10^{28} db/m³, ekkor mekkora τ ideig kell várni, hogy a „felgyülemlett” energia egy elektronnra jutó átlagos értéke elérje a $W = 1$ eV kilépési munkát?



15. ábra. A bal oldali ábrán a Compton-szórás irány-viszonyai láthatóak, a polarizációt és a kimenő irányt összekötő ϕ szög és a kimenő és bejövő irányt összekötő θ szög kapcsolatát bemutató. A Compton-szórás kinematikája látható a jobb oldali ábrán látható.

4.3. Az elektromágneses sugárzások kettős természeté

Ahogy fent írtuk, Fresnel és Young óta ismert, hogy a **fény hullám**, az elhajlási, interferometrikus és polarizációs kísérletek mutatják ezt a természetét. A fotoeffektus, ahogy fent láttuk, **fotonhipotézissel értelmezhető**. A klasszikus fizika alapján ez ellentmond a fény hullámtermészetének, vajon melyik kép a helyes? A kérdés feloldására új fizikát kell bevezetni! Érdekes ugyanakkor, hogy van néhány jelenség, amelyet mindkét kép (különböző módon) helyesen magyaráz meg.

Az egyik a **fény nyomása**, amelyet Maxwell és Bartoli jósolt meg 1871-ben illetve 1876-ban, és Lebedev figyelt meg 1900-ban, majd Nichols és Hull 1901-ben. A jelenségnek asztrofizikai szempontból is nagy jelentősége van (a csillagok szerkezetét ez döntően befolyásolja), és a műholdak mozgására is nagy hatással van. Érdekes módon a hullámképben és a részecskeképben is egyformán kijön a jelenség, méghozzá azonos eredménnyel. A hullámképben a sugárzási nyomás $p = \langle S \rangle / c$ módon adódik, azaz a fény által kifejtett erő (elnyelés esetén) $F = \dot{E}/Ac$, hiszen $\langle S \rangle = \dot{E}/A$ a felületen időegységként áthaladó energiát adja meg. A részecskeképben a fotonok impulzusát kell vennünk, amely, mint a következő fejezetben kiderül, $p_{\text{imp}} = E/c$ módon adódik. Ennek időderiváltja éppen az adott mennyiségű foton adott idő alatt történő megállításához szükséges erő adja meg, tehát itt is ugyanaz adódik végül a fotonok által kifejtett nyomásra.

A relativisztikus **Doppler-jelenség** esetében is hasonló megállapítást tehetünk: a hullámképben (a hullámhegyek beérkezése közötti időt helyesen vizsgálva, figyelembe véve az idődilatációt) is kijön a $\sqrt{(1+\beta)/(1-\beta)}$ faktor, és a foton energiáját Lorentz-boostolva ($E' = \gamma E - \beta \gamma p = \gamma(1-\beta)E$, tehát a faktor $\gamma(1-\beta)$) is ugyanaz jön ki.

A fény polarizációja érdekes módon szintén megérthető hullámképben túl a részecskeképben is, ugyanis a foton spinjével függ össze, ahogy azt később részletesebben is tárgyaljuk majd. Fontos itt azonban már felhívni rá a figyelmet, hogy a fotonnak is van spinje, értéke \hbar , az adott irányú vetülete pedig $\pm \hbar$ (nulla értéket nem vehet fel).

4.4. A Compton-jelenség

Compton 1922-ben vizsgálta meg röntgensugarak szóródását paraffinon. Azt látta, hogy a szórt sugárzásban nagyobb hullámhosszú komponensek jelennek meg, és a szögeloszlás is eltér a várakozástól. A klasszikus elektrodinamika szerint a hullám hatására az atom (elektron) **dipólusugárzást** bocsát ki, melynek intenzitása $\sin^2 \phi$ szerint változik, ahol ϕ a gyorsulás és a sugárzás vizsgált iránya által bezárt szög. A szórás hatáskeresztmetszete a (69) egyenletből

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \sin^2 \phi, \text{ ahol } r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} = \frac{ke^2}{m_e c^2} = \frac{\alpha \hbar c}{m_e c^2} = \frac{\alpha \hbar}{m_e c}, \quad (128)$$

továbbá a térszögre integrálva

$$\sigma = \frac{8}{3} r_e^2. \quad (129)$$

Vizsgáljuk meg, mi adódik ebből akkor, ha a bejövő és a továbbhaladó hullám iránya közötti θ szögének függvényében vizsgáljuk meg a szórás.

Legyen a bejövő hullám iránya \mathbf{k} , az elektromos tér (azaz a polarizáció) erre merőleges iránya \mathbf{e} (lásd a 15. ábra felső paneljét). Az ezek és $\mathbf{k} \times \mathbf{e}$ által kifeszített koordináta-rendszerben kifejezve a kimenő sugárzás iránya

$$\mathbf{n} = \mathbf{k} \cos \theta + \mathbf{e} \sin \theta \cos \psi + \mathbf{e} \times \mathbf{k} \sin \theta \sin \psi, \quad (130)$$

ahol θ a bejövő (\mathbf{k}) és a kimenő (\mathbf{n}) sugárzás közötti szög, ψ pedig a kimenő sugárzás bejövő sugárzásra merőleges síkban vett vetületének szöge a polarizációs vektorhoz képest (azaz \mathbf{n} szöge az \mathbf{e} és $\mathbf{e} \times \mathbf{k}$ vektorok által kifeszített síkban). A hatáskeresztmetszet kifejezésében ϕ az elektromos tér (\mathbf{e}) és a kimenő sugárzás (\mathbf{n}) közötti szög, tehát ez az $\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}$ skalárszorzatából kapható meg, azaz

$$\cos \phi = \cos \psi \sin \theta, \text{ és így } \sin^2 \phi = 1 - \cos^2 \psi \sin^2 \theta. \quad (131)$$

Mivel számunkra a ψ polarizációs szög indifferens, ezért az összes ψ szögre átlagolnunk kell. Így a végeredményben

$$\langle \sin^2 \phi \rangle = \langle 1 - \cos^2 \psi \sin^2 \theta \rangle = 1 - \langle \cos^2 \psi \rangle \sin^2 \theta = 1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta) \quad (132)$$

jelenik majd meg, mivel értelemszerűen $\langle \cos^2 \psi \rangle = 1/2$. Végül a Thomson-szórás polarizációkra átlagolt differenciális hatáskeresztmetszete (az eltérülés szöge szerint):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \theta). \quad (133)$$

Az eredmény tehát 90 fokra **szimmetrikus**, de a kísérletekben azonban nem ezt a eloszlást mérték (lásd a 15. ábrát és az eredeti Physical Review **21** (1923) 483 publikációt), hanem nagyfrekvenciás sugárzás esetén a nagyszögű visszaszórás jelentősen elnyomott. Ez önmagában erős utalás arra, hogy a Compton-szórásban (azaz nagyfrekvenciás fény szabad elektronokkal való kölcsönhatásában) nem működik a klasszikus kép.

Mi történik azonban a szórt fény frekvenciájával? Klasszikusan a bejövő és a kimenő hullám **frekvenciája azonos**. Ha elég nagy az intenzitás, a töltés visszalökődhet, és a Doppler-effektus módosítja a frekvenciát, de elég kis intenzitásnál ez a hatás minimális. A megfigyelés szerint azonban alacsony intenzitásnál is megjelenik egyfajta frekvencia- vagy **hullámhossz-módosulás**, amelyet a klasszikus kép (a hatáskeresztmetszethez hasonlóan) nem tud megmagyarázni.

A hullámhosszmódosulás magyarázata a részecskeképben egyszerűen látható. Bejön egy $p = hf/c = h/\lambda$ impulzusú foton, és kimegy $p' = hf'/c = h/\lambda'$ impulzussal, miközben átadott a kettő különbségének megfelelő **impulzust** az elektronnak, és az energiájából is adott át az elektronnak. Az elektron teljes energiája az ütközés előtt $m_e^2 c^4$, míg utána $E_e^2 = m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2$, a fotonra pedig a $E = hf$ és $E' = hf'$ feltételt alkalmazzuk. Innen az energiamegmaradás:

$$E - E' = E_e^2 - m_e^2 c^2, \text{ azaz} \quad (134)$$

$$hf - hf' = \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e^2 c^2, \text{ innen pedig} \quad (135)$$

$$p_e^2 c^2 = (hf + m_e^2 c^2 - hf')^2 - m_e^2 c^4. \quad (136)$$

Használjuk ki az impulzusmegmaradást is. Eszerint

$$\mathbf{p}_e = \mathbf{p} - \mathbf{p}', \text{ tehát} \quad (137)$$

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta. \quad (138)$$

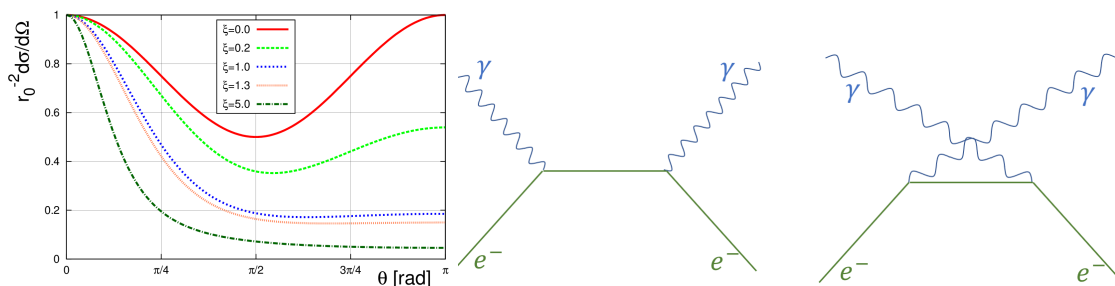
Ezt visszahelyettesíthetünk az előző egyenletbe, $p = hf/c$ és $p' = hf'/c$ kihasználásával:

$$h^2 f^2 + h^2 f'^2 - 2h^2 f f' \cos \theta = (hf + m_e^2 c^2 - hf')^2 - m_e^2 c^4, \text{ azaz} \quad (139)$$

$$hf' = \frac{hf}{1 + \frac{hf}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} = \frac{hf}{1 + \xi (1 - \cos \theta)}, \text{ másképp} \quad (140)$$

$$\frac{c}{f'} - \frac{c}{f} = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) = \lambda_C (1 - \cos \theta), \text{ vagy} \quad (141)$$

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) = 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (142)$$



16. ábra. A Compton hatáskeresztmetszet a bejövő foton energiájának függvényében (az elektron nyugalmi energiájával normálva, $\xi = hf/m_e c^2$ függvényében). Ha $\xi \rightarrow 0$, visszakapjuk a Thomson alakot. Jobbra a kvantumtérelméleti számoláshoz szükséges Feynman-diagramok.

ahol bevezettük a $\xi = hf/m_e c^2$ hányadost és a $\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,4$ pm a Compton-hullámhosszat, amellyel $\alpha\lambda_C/2\pi = r_e$ a klasszikus elektronsugár. Vegyük észre, hogy a levezetés során kihasználtuk, hogy a foton energiája és impulzusa $E = pc$ módon függ össze, amely nulla tömegű, fénysebességű részecskét jelent! Említsük még meg, hogy az elektron pont részecske abban az értelemben, hogy nagyenergiás szórás kísérletekben nulla méretűnek tekinthető. Ennek ellenére a Compton-hullámhossz az elektron egyfajta méretskálája: ha ennél kisebb tartományra próbálunk egy elektront kényszeríteni, akkor ez (a későbbi fejezetekben tárgyalt okokból) olyan nagy energiát igényel, hogy elektron-positron párok jelennek meg – ezért sem gondolhatunk az elektrorra fekete lyukként.²

Érdeemes észrevenni, hogy $\theta = 0$ esetén a hullámhossz és a frekvencia is változatlan, az így továbbhaladó foton nem adott át energiát vagy impulzust az elektronnak. Ha $hf \ll m_e c^2 \Rightarrow \lambda' \approx \lambda$, tehát alacsony energiájú fotonok esetén nincs hullámhossz-változás (persze az egész gondolat csak szabad elektronokra érvényes, tehát olyan energiákra, ahol az elektron már szabadnak tekinthető). Nagy energiás fotonra, ($hf \gg m_e c^2$) $hf' \approx m_e c^2/(1 - \cos\theta)$, 90 fok esetén 511 keV, visszaszóródásra (180 fok) 255 keV.

Kis kiegészítésként érdemes megjegyezni, hogy milyen kapcsolatban áll egymással a fotonok energiája és hullámhossza. Mivel $E = hf = \hbar\omega$ és $\lambda = 2\pi c/\omega = 2\pi\hbar c/E$, így 1 eV energia az $\hbar c = 197$ MeV·fm = 197 eV·nm illetve $hc = 1237$ eV·nm összefüggés miatt $\lambda = 1240$ nm hullámhosszat jelent.

A bejövő fényt hf energiájú fotonokra bontva a szórt részecskék száma arányos a foton számmal, azaz a Compton-szórás elemi folyamat: ez szintén a részecskeképet támasztja alá. A mért hatáskeresztmetszet, ahogy fent említettük, jelentősen különbözik a Thomson-formulától, ezt a **Klein-Nishina formula** adja meg:

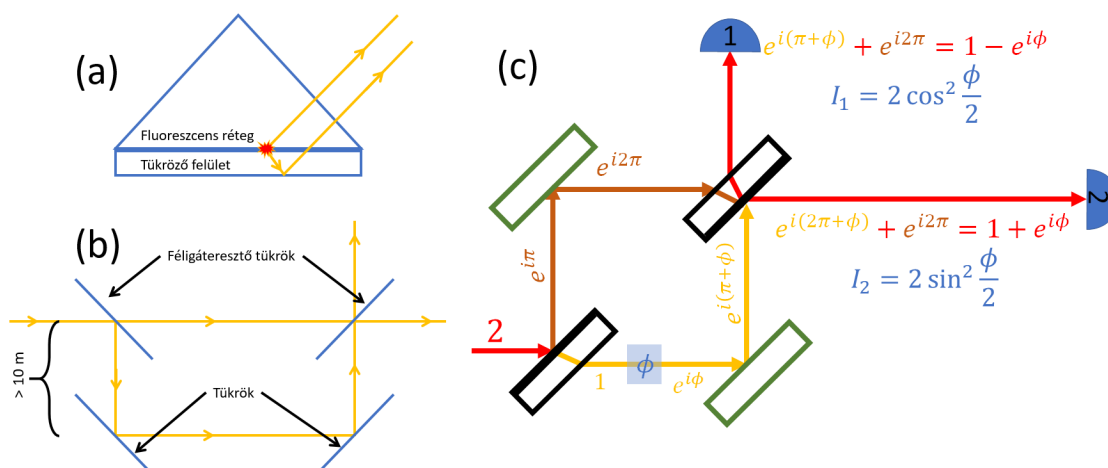
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (P + P^3 - P^2 \cos^2 \theta), \text{ ahol } P = \frac{hf'}{hf} = \frac{1}{1 + \xi(1 - \cos\theta)}, \quad (143)$$

ahol továbbra is $\xi = hf/m_e c^2$. A teljes hatáskeresztmetszetre igen bonyolult kifejezés adódik, amelynek két határesetét tudjuk egyszerűen megadni:

$$\sigma_{\text{Compton}} = \begin{cases} \sigma_{\text{Thomson}} \left(1 - 2\xi + \frac{26}{5}\xi^2\right), & \text{ha } \xi \ll 1, \\ \frac{3}{8}\sigma_{\text{Thomson}} \frac{1}{\xi} \left(\ln 2x + \frac{1}{2}\right), & \text{ha } \xi \gg 1, \end{cases} \quad (144)$$

ahol $\sigma_{\text{Thomson}} = 8\pi r_e^2/3$, ahogy fentebb részleteztük. Ezt a hatáskeresztmetszetet majd a kvantumelektrodinamikai Feynman-gráfok módszerének segítségével lehet egyszerűen kiszámítani. A 16. ábrán a kvantumtérelméleti számolásokban használatos néhány úgynevezett Feynman-diagramot is

²Az elektron Schwarzschild-sugara 10^{-57} méter nagyságrendű, ennél még a Planck-skála is 20 nagyságrenddel nagyobb; de érdekes kiszámítani a forgó és/vagy töltött fekete lyukakra vonatkozó Reissner-Nordström- illetve Kerr-Newman-metrikákban a sugarakat is, ezek lényegesen nagyobbak, de még mindig kisebbek a Compton-hullámhossznál, bár utóbbi már csak egy nagyságrenddel. Továbbiak tekintetében lásd az arXiv:hep-th/0507109 publikációt.



17. ábra. A Selényi-kísérlet (a), Jánossy tükrök kísérlete (b) és egy Mach–Zehnder-interferométer (c). Utóbbi esetében fontos figyelembe venni, hogy tükrök esetén visszaverődésnél 180 fok fázistolás következik be, és ezzel világosan látható a kioltások és erősítések rendszere. Érdekes még megemlíteni, hogy a Mach–Zehnder interferométer egyik útjába valamilyen további ϕ fázistolást létrehozó objektumot vagy hatást elhelyezve, a két ág között változtatható jel nagysága, $\sin^2 \phi/2$ és $\cos^2 \phi/2$ módon.

megadunk illusztrációként. Ezekon nem látszódik, de sokkal bonyolultabb folyamatok is vezethetnek Compton-szóráshoz: az elektron kibocsáthat egy foton, amely párkeltéssel elektron-positron-párt hozhat létre, és így tovább – minden ilyen folyamat járulékát össze kell adni a hatáskeresztmetszet kiszámolásához.

Gyakorló feladat

Adott egy 1 mm-es céltárgyunk, melyben az elektronok számsűrűsége 10^{28} db/m³. Ezen 1 keV-es fotonok szóródnak Compton-effektussal (többek között). Mekkora a 90 fokban szórt fotonok hullámhossza? És az eredeti nyaláb hányadrésze megy 90 fok körül egy 0,1 sr térszögű detektorba?

4.5. Kísérletek a fény természetének megállapítására

Kérdés, hogy a fény részecske vagy hullám-e? Einstein próbálkozott a túsugárzás-elmélettel, amelyben a foton kis térszögű hullámvonulat, és így a részecske- és a hullámkép is érthető lehet. Ezt cáfolta **Selényi Pál kísérlete** (17.a ábra), amely bizonyította, hogy nagy szögek esetén is van interferencia (90 foknál nagyobb nyílásszög esetén is). Azt bizonyította, hogy a fény elemi sugárzása ugyanolyan gömbhullám, mint ami egy dipólusból származik. Kísérletében fluoreszcens rétegből fény lépett ki. A réteg alá tükrös felületet tett, így az egyik irányba kilépő fény interferálhatott a másik irányba kilépő, majd visszatükröződő részével. A két sugár között nagy szög is lehet, tehát a hullámot teljes gömbhullámként kell elképzelnünk.

Jánossy Lajos (az ELTE Atomfizikai Tanszékének első vezetője) Náray Zsolttal együtt tükrök kísérletet végzett 1957-ben (17.b ábra), amelyben félig áteresztő tükrökkel egy fénysugarat önmagával interferáltatjuk. A kísérletben akkor is interferenciát találtak, ha a rendszerben csak egy foton van, úgy, hogy a detektor két része között több méter távolság is lehet! Ugyanilyen „egyfotonos” kísérletet végzett el Aspect, Mach–Zehnder-interferométerrel, de sokkal nagyobb precizitással; a következtetés hasonló volt.

Érdekes felvetni a kérdést, hogy ha a foton két útja kioltja egymást, akkor hova tűnik a foton eredeti energiája: természetesen ez mindig megmarad, ha valahol kioltás van, akkor valahol erősítésnek is meg kell jelennie! Félígáteresztő tükrök esetén ez a „másik” nyalábot jelenti, kétréses vagy Bragg-szórásos interferencia esetén pedig valamelyik másik irányt. Érdekes végiggondolni, hogy egy interferencia-kísérletben az egyes nyalábok fázisa hogyan változik (az útkülönbségtől eltekint-

ve): optikailag sűrűbb közegről visszaverődve 180 fokos fázistolás jelenik meg. Így a féligáteresztő tükör „külső” (tükröző) felületének irányából érkezés után visszaverődve fázistolás következik be, míg a „belső” felületről visszaverődve (azaz először az üvegen áthaladva majd csak ezután visszaverődve) nem változik a fázis, ahogy áthaladás során sem. Így egy Mach-Zehnder interferométerben (ld. a 17.c ábra) az egyesülő nyalábok az egyik irányban erősítik, a másik irányban gyengítik egymást. Konkrétabban is végigkövethetjük az egyes nyalábokat. Az első osztás után az egyik amplitúdója $e^{i\pi}/\sqrt{2}$ szorzófaktorot kap, a másiké marad $1/\sqrt{2}$ (a gyök kettes faktor amiatt van, mert az intenzitások, azaz az amplitúdó négyzetek összege változatlan). A visszaverődések után ez $e^{i2\pi}/\sqrt{2}$ és $e^{i\pi}/\sqrt{2}$ lesz, majd az újabb féligáteresztő tükör után az egyik egyesített nyaláb. Ugyanez látható a 17.c ábrán is (1 helyett 2 intenzitású nyalábbal indulva, és így a $\sqrt{2}$ faktortól megszabadulva. Ez utóbbira épül az Elitzur–Vaidmann-féle gondolkísérlet, amelyben egy tárgy jelenlétét azzal való interakció nélkül határozhatjuk meg (ez különösen bombák keresése esetén lehet lényeges). Menjen át a rendszeren egyetlen foton, ennek 50-50% eséllyel bármelyik ág lehet a tényleges útja. A ϕ fázistolás helyén legyen vagy bomba, vagy „vaktöltény”. Utóbbi nem okoz fázistolást, előbbi fotonnal való kölcsönhatás esetén robban, és így lokalizálja a fotont, így az interferencia lehetősége megszűnik. Ezek után, ha „vaktöltényünk” van, akkor nincs fázistolás, és mindenképpen a 17.c ábra 1. számú detektora jelez. Ha bomba volt a ϕ helyen, akkor 50% eséllyel felrobban – ha a foton az alsó ágon ment. Ha a foton a felső ágon megy, akkor viszont 25%-25% eséllyel az 1. vagy a 2. detektor szólal meg – a bomba útjának választása interferál a másik út választásával. Ha tehát a 2. detektor jelez, ez csak úgy történhetett, ha volt bomba. Ha az 1. detektor jelzett, akkor megismételhetjük a kísérletet, amíg vagy bombarobbanás nem történik, vagy a 2. detektor nem jelez. Így határesetben 50% eséllyel robbantás nélkül is tudtuk észlelni a bomba jelenlétét. A kísérletet Zeilinger és csoportja jóvoltából a gyakorlatban is végrehajtották, és még hatékonyabb észlelési lehetőségre is javaslatot tettek (az egyes ágakon sok kört megtevő fotonokkal).

Végezetül érdemes megemlíteni azt is, hogy noha a fenti kísérletekben mindig egyetlen foton interferált önmagával (vagyis inkább a lehetőségek interferáltak), két vagy több foton interferenciája is bekövetkezhet, Bose–Einstein-korrelációk esetében. Ez azonban túlmutat jelen kurzus anyagán.

4.6. Az elektromágneses tér termodinamikája

A XIX. század közepére világos volt, hogy egy, a környezeténél melegebb test több hősugárzást bocsát ki, mint amennyit elnyel, míg egy hidegebb test többet nyel el, mint amennyit kisugároz. Ez azt jelentette tehát, hogy a hősugárzás az a mechanizmus, amellyel a testek a környezetükkel hőmérsékleti egyensúlyba kerülhetnek. A hőmérsékleti sugárzásra az első fontos törvényt 1859-ben Kirchhoff írta le. Eszerint E_λ , a környezetével egyensúlyban lévő test hullámhosszegységre vetített energiasűrűsége λ hullámhosszon:

$$E_\lambda = A_\lambda K_\lambda(T), \quad (145)$$

ahol A_λ a testre jellemző állandó, míg $K_\lambda(T)$ csak a hőmérséklettől függő állandó, amely független a test alakjától vagy hőmérsékletétől. Bevezette a teljesen elnyelő „feketetest” fogalmát, amelyre $A_\lambda = 1$. Eszerint tehát $K_\lambda(T)$ a feketetest által kisugárzott energiasűrűség. Általában ehelyett a spektrális sűrűséget vesszük, amely az időegységre, felületegységre, térszövegegységre és hullámhosszegységre (vagy frekvenciaegységre) vetített energia, I_λ vagy I_ν . Stefan 1879-ben és diákja, Boltzmann 1884-ben (Tyndall mérései alapján) azt állította, hogy a teljes kisugárzott energia, azaz $\int K_\lambda(T)d\lambda \propto T^4$. Wien és Paschen 1885-ben ebből és kísérleti adatokból levezették, hogy a sugárzás spektruma $\lambda^{-5} \exp(-a/\lambda T)$ alakot kell, hogy öltson – ez azonban kis hullámhosszakra téves eredményt adott.

Noha ekkor még nem volt világos, hogy miből áll a hőmérsékleti sugárzás, a spektrumára (spektrális sűrűségére) ugyanakkor többféle jóslat is született, ahogy korábban (a 7. ábrán) is láttuk:

$$I_\lambda(\lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} e^{-\frac{hc}{\lambda kT}} \quad (\text{Wien, 1896}), \quad (146)$$

$$I_\lambda(\lambda) = \frac{2ckT}{\lambda^4} \quad (\text{Rayleigh-Jeans, 1900}), \quad (147)$$

$$I_\lambda(\lambda) = \frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \quad (\text{Planck, 1900}). \quad (148)$$

Termodinamikai megfontolások alapján könnyen láthatjuk, hogyan adódik az első két jóslat. Mint az ismert, a hőmérséklet az energia entrópia szerinti deriváltja, azaz

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}, \text{ azaz } \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = \frac{\partial}{\partial E} \frac{1}{T} \quad (149)$$

Mivel a XIX. század végére üregrezonátor sugárzásából a $\partial_E^2 S = -C_1/E$ mérési eredmény volt ismert (ahol C_1 a mérésből adódó paraméter), ebből $\partial_E(1/T) = -C_1/E$ és $E = E_0 \exp(-1/C_1 T)$ eredeztethető, a Wien-törvénynek megfelelően. Ugyanakkor újabb mérési eredmények (Lummer és Pringsheim, 1900) $\partial_E^2 S = -C_2/E^2$ összefüggést javasoltak, amely viszont $E = C_2 T$ következik, a Rayleigh–Jeans-törvénynek megfelelően. Planck ezt a két összefüggést házasította, feltéve, hogy $\partial_E^2 S = -C_3/(E(\beta + E))$ a helyes összefüggés (amely interpolál a két fenti eredmény között). Ebből pedig $E = \beta/(\exp(\beta/C_3 T) - 1)$ adódik. A XIX. század végén, amikor ezeket a törvényeket levezették, alapvetően termodinamikai összefüggésekre építettek, többek között a „frissen bevezetett” entrópiára vonatkozó összefüggésekkel operálva. Ehelyett a következőkben egyszerűbb formában vizsgáljuk meg, hogyan vezethetők le a fentiek.

Induljunk ki a Kirchhoff által bevezetett feketetest fogalmából. Legyen ez a feketetest egy konstans T hőmérsékletű üreg nyílása, és legyen az üreg fala egyensúlyban az üregeken belül lévő sugárzással. Tegyük fel, hogy a T hőmérsékletű fállal egyensúlyban lévő sugárzási tér állóhullámok szuperpozíciójaként írható le. Van ekkor tehát egy L oldalhosszúságú, $V = L^3$ térfogatú üregünk. Ebben az állóhullámok $A(t) \sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z$ alakúak, ahol $k_i L = n_i \pi$, azaz L hosszúságon éppen félegész hullámok jönnek létre. A hullámegyenlet elárulja ezen hullámok (kör)frekvenciáját is: ha $A(t) = A_0 \sin \omega t$, akkor

$$\omega^2 = \frac{c^2 \pi^2}{L^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (150)$$

Legyen a $[0, \omega]$ tartományban lévő módusok száma $N(\omega)$, és $g(\omega)$ a módusok sűrűsége. Ezeket az

$$N(\omega) = \int_0^\omega g \quad (151)$$

összefüggés köti össze. Adott ω körfrekvencia alatt azon módusok „férnek el”, amelyekre

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \leq \frac{\omega^2 L^2}{c^2 \pi^2}. \quad (152)$$

Ez tehát a módusok terében egy $R = \omega L/c\pi$ sugarú gömb, amelynek (az $n_1 > 0$ pozitív nyolcadgömbben) térfogata egyúttal a benne lévő egész számhármassok számát is megadja:

$$N(\omega) = \frac{1}{8} \frac{4R^3 \pi}{3} = \frac{\omega^3 V}{6c^3 \pi^2} = \frac{4\pi \nu^3 V}{3c^3} = \frac{4\pi V}{3\lambda^3}, \quad (153)$$

ahol az eredményt a ν frekvenciával és a λ hullámhosszal is kifejeztük. Ebből deriválással a g sűrűség is megkapható, ha figyelembe vesszük, hogy az elektromágneses sugárzás két különböző polaritással is rendelkezhet:

$$g(\nu) d\nu = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} V d\nu, \text{ avagy } g(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^4} V d\lambda. \quad (154)$$

Vegyük észre itt, hogy differenciális eloszlás esetén $\nu \rightarrow \lambda$ áttérés esetén a $\nu = c/\lambda$ átváltáson kívül a $d\nu/d\lambda = c/\lambda^2$ faktorial („Jacobi-determinánssal”) való szorzásra is szükség van. Tegyük fel most az ekvipartíció tételét kiterjesztve, hogy minden oszcillátormódusra kT jut, hiszen egy oszcillátornak két „szabadsági foka” van (a hely és a sebesség), ahogy az a XIX. század végén közismert volt – de gondolhatunk itt az elektromos és a mágneses térre, mint két módusra is (ugyanis ilyenkor a Lagrange-függvényben, avagy az energia kifejezésében szereplő négyzetes tagok számítanak). Ekkor a frekvenciára vetített energiasűrűség $E(\nu) = g(\nu)kT = (8\pi/c^3)\nu^2 kTV$, avagy a térfogat- és frekvenciaegységre vetített energiasűrűség

$$\rho(\nu) d\nu = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} kT d\nu, \text{ avagy } \rho(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4} d\lambda \quad (155)$$

Ez a Rayleigh-Jeans törvény tulajdonképpen, ha 4π térszögegységre vetítjük, és a sugárzás c sebességével szorzunk, hogy térfogategységre eső energiasűrűségből idő- és felületegységre eső teljesítménysűrűséget kapjunk. Ebből azonban, ahogy korábban említettük, végtelen mennyiségű összes energia adódik, ahogy ezt az $\lim_{\nu \rightarrow \infty} N(\nu) = \infty$ összefüggés is mutatja (amelyből ρ -t is kiszámoltuk).

4.7. A Planck-törvény levezetése és alkalmazásai

Nézzük meg, hogy az előzőeket hogyan kell módosítani, hogy a helyes Planck-törvényre jussunk. A hagyományosan Lorentznek tulajdonított levezetés nyomán vizsgáljuk meg, hogy mi adódik a kvantumelméletből az egyes módusok energiájára: az $\varepsilon = kT$ feltevésből ugyanis helytelen eredményre jutottunk. Az oszcillátorokra (a „régikvantumelméletben”) korábban is levezetett kvantumfeltételből induljunk ki, eszerint adott frekvenciájú módusban $E_n = n\hbar\omega = nh\nu$ energiájú állapotok lehetnek. A Boltzmann-féle statisztikát itt is alkalmazva arra jutunk, hogy egy energiaszint betöltöttsége $N_n = \exp(-\beta E_n)/Z$, ahol $Z = \sum_n \exp(-\beta E_n)$ az állapotösszeg. Figyelembe véve itt is, hogy $\beta = 1/kT$ és $E_n = nh\nu$ ebből $Z = 1/(1 - \exp(-h\nu/kT))$ adódik, és innen

$$N_n = e^{-nh\nu/kT} \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right), \text{ azaz} \quad (156)$$

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n N_n = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{hc/\lambda}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (157)$$

az átlagos energia. Ha most a Rayleigh-Jeans törvény levezetésénél $E(\nu) = g(\nu)kT$ helyett $E(\nu) = g(\nu)\langle E \rangle$ kifejezést alkalmazunk, akkor az energiasűrűségre

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu, \text{ avagy } \rho(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} d\lambda \quad (158)$$

amelyből c -vel és 4π térszöggel szorzással adódik a spektrális sűrűség

$$I_\nu(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu, \text{ avagy } I_\lambda(\lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} d\lambda \quad (159)$$

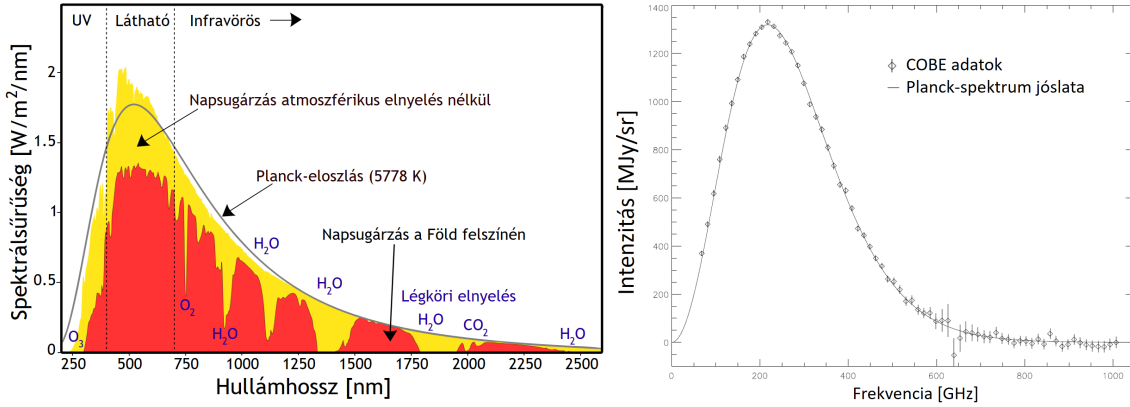
Ez a Planck-törvény, amelyhez fel kellett tennünk, hogy az oszcillátorok energiája csak diszkrét értékeket vehet fel. A Rayleigh-Jeans levezetés során azt használtuk ki, hogy az oszcillátorok frekvenciája $\nu = c^2\pi/2L^2(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$ lehetséges értékeket vesz fel, később pedig azt, hogy egy ilyen körfrekvenciájú állapot $nh\nu$ energiaadagokat vehet fel, és a legvalószínűbb eloszlás mellett az átlagos energiája $h\nu/(\exp(h\nu/kT) - 1)$.

Fontos megemlíteni, hogy ilyen spektrumú sugárzást nagyon nehéz előállítani, ugyanis a sugárzás tartalmazni fogja az „üreg” falának atomjainak spektrumát is. A Nap elektromágneses sugárzásának spektruma nagyon különbözik ettől, míg a kozmikus mikrohullámú háttérsugárzás elég pontosan egy 2.726 K hőmérsékletű Planck-görbét követ, ahogy az a 18. ábrán is látható. Ennek magyarázata az, hogy az ősrobbanás után kb. 230 ezer évvel az univerzum kb. 3000 K hőmérsékletűre hűlt, és ekkor megszűnt a termikus egyensúly a sugárzás és az anyag között, a protonok és az elektronok rekombinálódtak, hidrogénatomokat létrehozva. A 3000 K hőmérsékletű sugárzás így háborítatlanul tölthette ki a teret, és terjedhetett minden irányban. A tér tágulása miatt ma ezt jelentős vöröseltolódással észleljük, 2.726 K hőmérsékletű Planck-görbének megfelelően. A kozmikus mikrohullámú háttérsugárzás Planck-jóslattól való eltérését is részletesen vizsgálják, kozmológiai modellek jóslatait lehet ezzel tesztelni.

A sugárzás felület-, idő- és térszögegységre vetített intenzitását a frekvenciákra való integrálással kaphatjuk meg, $y = h\nu/kT$ (azaz $d\nu = kTdy/h$) helyettesítéssel:

$$\int I_\nu(\nu)d\nu = \int \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu = \frac{2k^4T^4}{h^3c^2} \int y^3 \frac{1}{e^y - 1} dy = \frac{2k^4\pi^4T^4}{15c^2h^3}, \quad (160)$$

ahol kihasználtuk, hogy az y -ra vett integrál értéke $\pi^4/15$. Ha a térszögre is integrálunk, akkor kiderül, hogy még egy π faktor is adódik, a térszögegység negyede (ugyanis egy feles faktor adódik abból, hogy a sugárzás csak az egyik térfélbe megy, illetve egy másik feles faktor abból, hogy a



18. ábra. A Nap spektruma az atmoszféra hatása előtt és után, egy Planck-spektrummal összevetve (balra), illetve a kozmikus mikrohullámú sugárzás COBE által mért spektruma, a WMAP és a COBE/FIRAS sebesség- és kalibrációs adatok segítségével kiszámolt Planck-spektrummal (jobbra; az ábra forrása: ApJ.707:916,2009). Míg előbbi csak nagy vonalakban követi a kb. 5800 K hőmérsékletnek megfelelő eloszlást, utóbbi igen pontosan 2.726 K hőmérsékletnek felel meg.

beeső sugárzás merőleges értékét kell vennünk). Ezt úgy is megérthetjük, ha észrevesszük, hogy egy adott felületről az adott irányba érkező sugárzás a kettő szögének koszinuszának arányában csökken (a Lambert-féle kibocsátási törvénynek megfelelően). Ekkor a $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ térszögelem egy további $\cos\theta$ faktoriall szorozódik, és így az integrálási mérték a következő lesz:

$$\cos\theta \sin\theta d\theta d\phi = \sin 2\theta d\theta d\phi = \frac{1}{4} \sin\vartheta d\vartheta d\phi, \quad (161)$$

ahol bevezettük a $\vartheta = 2\theta$ változót. Mivel az integrálás a $\theta = 0 \dots \pi/2$ tartományon volt (a féltér miatt), ez most $\vartheta = 0 \dots \pi$ lesz, és így formálisan a hagyományos térszögintegrált kaptuk vissza, egy egynegyed faktoriall szorozva. Így megkapjuk a Stefan-Boltzmann-törvényt:

$$j = \sigma T^4, \quad \text{ahol } \sigma = \frac{2k^4\pi^5}{15c^2h^3}. \quad (162)$$

Gyakorló feladat

Adott a Nap 1,5 millió kilométeres sugara, illetve 5800 K felszíni hőmérséklete. Ha feketetest-sugárzással bocsát ki energiát, akkor ez alapján ez másodpercenként hány joule? És ebből mennyi érkezik a Naptól 150 millió kilométerre lévő, 6400 km sugarú Földre? Hogy viszonyul ez az emberiség 18 TW energiaigényéhez? A feladathoz felhasználhatjuk, hogy $k_B \approx 1/11600$ eV/K, azaz 5800 K 0,5 eV-nak felel meg; vagy közvetlenül a Stefan-Boltzmann-állandó értékét: $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ J/(m²sK⁴).

4.8. A foton impulzusa, Doppleres hűtés és Mössbauer-jelenség

Érdeemes megemlíteni, hogy a foton impulzusa, ahogy a fény nyomásán keresztül látható, közvetlenül a Maxwell-egyenletekből is levezethető. Jól ismert, és fentebb is többször felhasználtuk, hogy adott elektromos (E) és mágneses (B) tér esetén a Poynting-vektor $S = E \times B/\mu_0$ értéket vesz fel, ahol μ a vákuum mágneses permeabilitásának állandója (amely egyébként atom- és kvantumfizikai egységekben $\mu_0 = 1/c^2\epsilon_0 = e^2/2\alpha hc$). A Poynting-vektor az energiaáramlás erősségét jelenti, azaz az adott felületegységen időegységként átment energiát. Valójában az elektromágneses tér q^k térmennyiségeiből (amelyek itt a négyespotenciál komponensei) kifejezett \mathcal{L} Lagrange-függvényéből (vagy inkább Lagrange-sűrűségéből) adódik a

$$T^{ij} = \sum_k \partial_i q^k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_j q^k} - \delta^{ij} \mathcal{L} \quad (163)$$

energia-impulzus-tenzor, és ennek kontinuitása ($\partial_i T^{ij} = 0$) adja az Euler-Lagrange-egyenleteket. Az energia-impulzus-tenzor T^{i0} komponensei (a fénysebességgel osztva) éppen az **impulzussűrűséget** jelentik, a fénysebességgel szorozva pedig (szimmetrikus energia-impulzus-tenzor esetén) az **energiaáram-sűrűséget**, azaz a Poynting-vektort:

$$p^i = \frac{T^{i0}}{c}, \quad \mathbf{p} = \epsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (\text{impulzussűrűség}), \quad (164)$$

$$S^i = cT^{i0} = c^2 p^i, \quad \mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (\text{energiaáram-sűrűség}), \quad (165)$$

$$u = T^{00} = |\mathbf{S}|/c = c|\mathbf{p}| = \frac{\epsilon_0}{2} (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) \quad (\text{energiasűrűség}). \quad (166)$$

Ebből közvetlenül is adódik, hogy az **impulzusáram nagysága** tehát megegyezik az **energiasűrűséggel**, ezért az időátlagolt Poynting-vektorból a **sugárzás által kifejtett nyomás** is kiszámolható: $p_{\text{nyomás}} = \langle |\mathbf{S}| \rangle / c$ (az energiasűrűség osztva a sugárzás sebességével), azaz az időegység alatt felületegységenként elnyelt energia (energiafluxus) osztva a sebességgel. Ez a nyomás értelmezhető a **fotonok által átadott impulzusként** is, és ekkor jön ki a korábban is említett $p = E/c$ érték. Ez a relativitáselmélet értelmében a $p = \sqrt{E^2 - m^2 c^4} / c$ kifejezésből is adódik, a foton $m = 0$ tömege miatt.

A foton impulzusát használjuk ki a lézerrel történő **Doppleres hűtés** során. Ennek lényege, hogy egy adott sebességeloszlású (azaz hőmérsékletű) atomcsomagot két irányból lézerrel megvilágítanak úgy, hogy a lézer frekvenciája valamivel az atom hiperfonom (ld. később) **gerjesztési energiája alá** van hangolva. A sugárzás hatása az atom hatáskeresztmetszetével lesz arányos, ami a rezonanciafrekvencián sok-sok nagyságrenddel nagyobb, mint egy kicsit is eltérő frekvencia esetén. Mivel itt a rezonanciafrekvencia alatt vagyunk, így a lézer nem ad át energiát az atomoknak, csak rugalmasan szóródhat, tehát nem növeli az átlagos hőmérsékletet. Ugyanakkor előfordulhat, hogy egy atom éppen a lézerrel szemben mozogva lép egy fotonnal kölcsönhatásba – ekkor a Doppler-effektus miatti **kékeltolődés** („blueshift”) éppen megnövelheti a foton látszólagos frekvenciáját annyira, hogy az atom gerjesztődhesen. Mivel az elnyelt foton impulzussal is rendelkezett, az atom **lelassulva** megy tovább. Később persze kibocsátja újra a fotont, és ettől egy kis, oldalirányú impulzusra tesz szert, de rengeteg egymás utáni elnyelés és kibocsátás után ez kiátlagolódik, tehát az atom impulzusa lecsökken. Az eddig tárgyalt lézerrel egy irányban mozgó atomok az ellentétes irányú lézerrel kerülnek szembe, így mindkét irányban lassulnak az atomok. Ha a tér mindhárom irányában alkalmazunk egy-egy lézernyalábot, akkor végeredményben lecsökken a gáz hőmérséklete. Ekkor végeredményben a tér bármely irányában mozgó atomok egyfajta „súrlódást” éreznek, ezért ezt a módszert „optikai melaszna” is nevezik. Mivel a gerjesztési energiát legerjesztődéskor ki is sugározzák az atomok, ezért van egy minimális hőmérséklet, amely az itt leírt Doppleres hűtéssel elérhető: $T = \hbar\Gamma / 2k_{\text{Boltzmann}}$, ahol Γ a színképvonalak természetes szélessége. Ez az érték tipikusan nagyságrendileg 10^{-3} K, de ez alá is lehet menni bizonyos továbbfejlesztett technikákkal, mint például a Sziszifusz-hűtés, ezeket azonban itt nem tárgyaljuk. Annnyit megemlítünk, hogy ezekhez a lézerre merőleges irányban valahogy csapdázni is kell az atomokat, hogy az atomcsomag egyben maradjon. Az ilyen csapdákat hívják magneto-optikai fogónak, amelyben két, egymással ellentétes irányú, cirkulárisan polarizált fénynyaláb és egy kifelé növekvő mágneses tér tartja egyben az atomcsomagot.

Ezen kívül érdemes megemlíteni a **Mössbauer-effektust** is, amely szintén a foton impulzusán alapul. Alapesetben egy atom által kibocsátott foton energiája valamivel kisebb, mint az átmenetben felszabadult energia: ez lecsökken az atom visszalökődésére fordított energiával, amelynek nagysága tipikusan jó közelítéssel $E/2mc^2$, ahol E a gerjesztési energia és m az atom tömege. Ha ugyanakkor az álló atom elnyelne egy fotont, akkor a fotonenergiának magasabbnak kell lennie, mint az átmenet energiaszintje: ismét az atom meglökődése okozza az eltérést. Így álló (de nem rögzített) atom által kibocsátott fotont egy másik, szintén álló (és szintén nem rögzített) atom nem tudná elnyelni, nem jön létre rezonáns abszorpció. Kiskaput jelent ugyanakkor a később tárgyalt határozatlanság: a gerjesztett állapot τ karakterisztikus élettartamának megfelelően $\Gamma = \hbar/\tau$ mértékben **természetesen kiszélesednek** az emissziós és abszorpciós vonalak szélességei. Ha még így sem fednek át, akkor a **Doppler-kiszélesedés** érkezik segítségül: az atomok hőmozgása miatt mindig lesz olyan, a fotonnal szemben mozgó atom, amely mégis el tudja nyelni azt. Míg optikai (elektronhébéli) átmenetek esetén a határozatlanságból adódó kiszélesedés is már elegendő tipikusan, addig

magfizikai átmeneteknél olyan nagy a visszalökődés energiája (akár 10 – 100 eV nagyságú), hogy ilyenkor csak a Doppler-kiszélesedés engedné meg, hogy az atomok újra elnyelhessék saját sugárzásukat. Ezt kísérletileg Malmfors demonstrálta 1951-ben: a **hőmérséklet növelésével megnőtt** a rezonáns abszorpció, azaz az atomok saját sugárzásának az elnyelése. Ezzel szemben Mössbauer 1958-ban kristállyal végzett kísérleteiben furcsa jelenséget észlelt: a **hőmérséklet csökkenésével ismét nőni kezd** a rezonáns abszorpció valószínűsége. Ennek magyarázata a Mössbauer-effektus, melynek során a fotont elnyelő atom a kristályban való rögzítettsége okán nem egyedül, hanem az **egész kristállyal együtt** lökődik vissza, így a nagy tömeg miatt az elvitt mozgási energia igen kicsi lesz. A kvantumfizikát is figyelembe véve kiderül, hogy a kristály persze nem csak egészében meglökődni tud, de kvantált globális rezgési gerjesztései is vannak, az úgynevezett „**fononok**”. A legkisebb ilyen fononenergia alatti fotonenergia esetén (figyeljünk az egyetlen betű különbségre a két szó között) a kristály nem tud gerjesztődni, így minimális lesz a visszalökődés, így lesz esély a rezonáns abszorpcióra. Valójában nincsen ilyen „legkisebb” fononenergia, a fononok spektruma folytonosan eltart nulláig, ugyanakkor alacsony hőmérsékleten mégis egyre növekvő esélye lesz a fonongerjesztés-mentes abszorpciónak.

5. Anyaghullámok

5.1. Elektronok elhajlása

A fentiekben részletesen láttuk tehát, hogy az elektromágneses hullámok hol hullám, hol részecske-természetüket mutatják, nem lehet a kettő között döntené, hanem új elméletet kell létrehozni. Az elektron ezzel szemben eddig csak részecskeként viselkedett, lehet-e, hogy ennek is van hullámtulajdonsága? A fénynél $\lambda = h/p$, igaz lehet valami hasonló részecskékre is? Louis de Broglie javasolta ezt 1924-ben, ezért ezt **de Broglie-hipotézisnek** hívjuk. A redukált Planck-állandóval $p = \hbar k$.

1927-ben végezték el a **Davisson-Germer kísérletet** (lásd a 19. ábrát illetve az eredeti Phys.Rev.**30** (1927) 705 publikációt), amelynek során vákuumsöveket elektródjainak szekunder elektron-emisszióját mérték. Elektronnyalábot irányítottak egy nikkell céltárgyra, hogy az atomok elektromos terét, illetve a felület szerkezetét vizsgálják, csak a rugalmasan szórt elektronokat vizsgálva. Arra számítottak, hogy az elektronok számára még a legsimább kristályfelület is felbontható az atomos szerkezet miatt, és így erről lehet információt szerezni a szögeloszlásból.

A kísérlet során oxigén került a vákuumsövebe, amely oxidréteget képzett a nikkell felületen. Ezt magas hőmérsékletre való fűtéssel távolították el, nem tudván, hogy a nikkell korábban polikristályos szerkezete egykristállyá változik így, illetve az elektronnyaláb számára azonos kristályfelület fog látszódni. Az újra elvégzett kísérletben már a kristálysíkok befolyásolták az elektronszórás. Ahogy a 4.1. fejezetben is említettük, 1913 óta (Laue és Bragg munkája alapján) ismert volt, hogy ilyenkor röntgensugaraknál az interferenciamintázatban $n\lambda = 2d \sin \theta$ hullámhosszaknál maximumok jelentkeznek, ahol θ a bejövő sugárzás kristálysíkkal bezárt szöge, és $\phi = \pi - 2\theta$ a szórás szöge. A feltétel oka, hogy a 19. ábrának megfelelően az útkülönbség (a sugárzásra merőleges felületekhez képest mérve) egy oldalon éppen $2d \sin \theta$, és ez akkor okoz erősítést, ha ez a λ hullámhossz egész számú többszöröse. Ha ennek megfelelő mintázatot találnak az elektron-szórásban, akkor **elektron-interferencia** jött létre, tehát az anyag hullámként viselkedett!

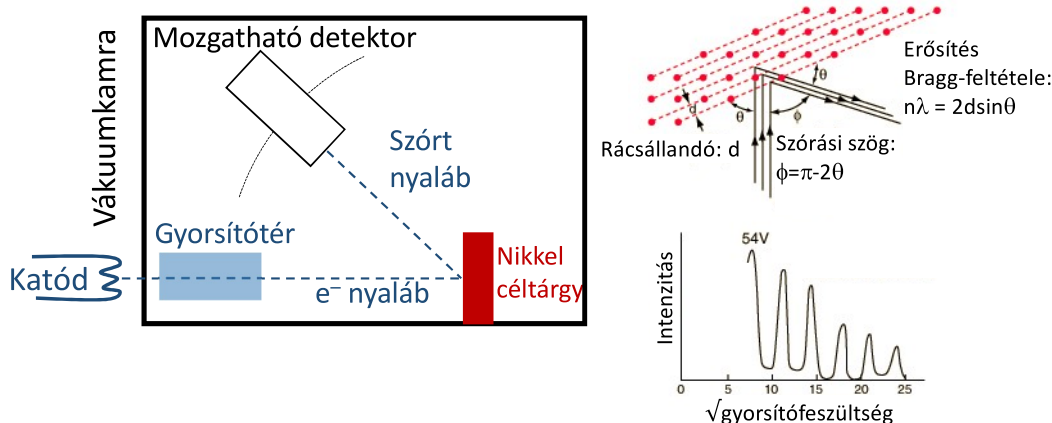
54 V gyorsítófeszültség mellett a detektor $\phi = 50$ fokos állásánál tapasztalták az első intenzitás-maximumot, ami $\theta = 65$ foknak felel meg, és így a nikkell 0,091 nm-es ráctávolságának ismeretében $\lambda = 2d \sin \theta = 0,165$ nm Ez elég jó egyezést adott a de Broglie hipotézissel:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{1,225 \text{ nm} \cdot V^{1/2}}{\sqrt{U}} \quad (167)$$

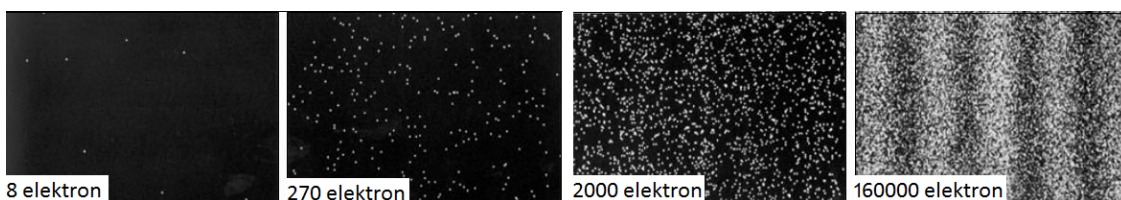
ami 54 V feszültségre 0,167 nm-t ad.

Miután az erősítés feltétele $2d \sin \theta = n\lambda$, a hullámhossz pedig $\lambda = h/\sqrt{2meU}$, innen az erősítésnek megfelelő feszültség

$$\sqrt{U} = \frac{hn}{2d \sin \theta \sqrt{2me}} = K \cdot n, \text{ ahol } K = \text{konstans.} \quad (168)$$



19. ábra. A Davisson-Germer kísérlet felépítése, eredménye és magyarázata



20. ábra. Egyelektronos interferencia. A jobb oldalt ábrázolt mintázat kialakulására 20 percet kellett várni. Az ábra a Hitachi Ltd weboldaláról származik, az eredeti kísérletet a Tonomura *et al.*, American Journal of Physics **57** (1989) 117 publikáció mutatta be.

Ha a kilépő nyaláb intenzitását vizsgáljuk ennél a fix θ szögnél, akkor a gyorsítófeszültség gyökének függvényében maximumokat tapasztalunk, méghozzá éppen a fenti K konstans egész számú többszöröseinél, ahogy az a 19. ábrán látható.

Fontos korrekció, hogy kis n esetén jelentős eltérést tapasztalhatunk, ennek oka, hogy a kilépési munkát is figyelembe kell venni. Itt $\lambda = h/\sqrt{2me(U - W)}$, tehát $U = K^2 n^2 + W$.

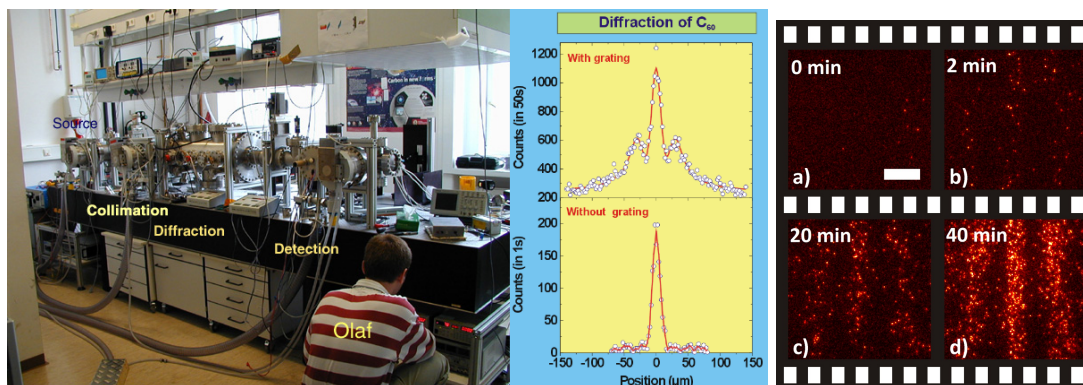
A későbbi kísérletekben kristály szélén való elhalást (Boersch, Naturwissenschaften **28** (1940) 709), áthaladó nyalábot (Ruska, TEM, 1931, ezért 1986-ban Nobel-díjat kapott), mesterséges vonalrácson vagy szálakkal történő szórását (Düker, Naturwissenschaften, **42** (1955) 41), kétréskísérletet (Jönsson, American Journal of Physics **42** (1974) 4) és alacsony intenzitású, **akár egy elektronos** nyalábokat (Tonomura, American Journal of Physics **57** (1989) 117) is vizsgáltak. Összességében az elektronok hullámtulajdonsága bizonyítást nyert, amelyet egyetlen elektron is mutat (ld. 20. ábra), és a hullámhossz nagy pontossággal $\lambda = h/p$. A helyzet tehát hasonló az elektromágneses jelenségekhez. Felmerül a kérdés, hogy ha kétutas interferenciánál a két úton egy-egy detektort helyezünk el, és a rendszerben mindig csak egy elektron van, akkor mindkét detektor megszólal-e. Ilyenkor azonban mindig csak az egyik detektor szólal meg: lehetetlen interferenciát megfigyelni és az elektron útját is követni!

Gyakorló feladat

Szabályozható feszültséggel gyorsított elektronok érkeznek 45 fokos beesési szöggel egy 0,1 nm-es rácsállandójú kristályra, majd a szórt elektronokat 90 fokos szórási szög mellett észleljük. Milyen gyorsítófeszültségek mellett lesz maximális az észlelt elektronintenzitás?

5.2. Atom- és molekulanyalábok elhajlása

Fontos kérdés, hogy az **anyagnak általában van-e hullámtulajdonsága**, vagy az elektron speciális mikrorészecske ilyen szempontból? Ez ma is aktívan kutatott terület (bár egyértelműen azt



21. ábra. Bal oldalt a C_{60} molekulák interferenciáját kimutató kísérlet és a megfigyelt mintázat, ráccsal (van interferencia) és rács nélkül (nincs interferencia). Jobbra Juffmann egymolekulás interferencia-kísérletének eredménye.

gondoljuk, hogy minden anyagdarab mutatja ezt a viselkedést), és a Nature címlapjára lehet kerülni ilyen tárgyú kísérletekkel ma is.

Az Otto Stern által kifejlesztett molekulanyalábos módszerrel 1929-ben sikerült kimutatni ezt a jelenséget. Adott hőmérsékletű gázban az atomok átlagos hullámhossza $\lambda = h/\sqrt{3mkT}$, azaz 300 K hőmérsékletű He gáz esetén (tudva, hogy 1 K kb. $86 \mu\text{eV}$ -nak felel meg, a He tömege pedig $3,73 \text{ GeV}/c^2$, míg $h = 197 \text{ MeVfm}/c$) $\lambda = 0,01 \text{ nm}$, H_2 gázban $0,016 \text{ nm}$, tehát elég alacsony sebesség esetén is nagy hullámhosszat kapunk.

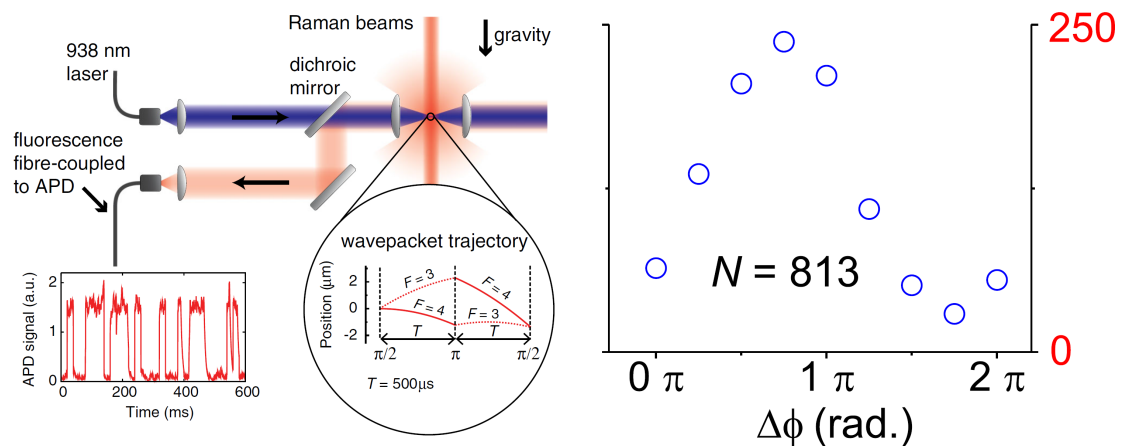
A fontos kísérleti különbség az, hogy ezek a nyalábok nem hatolnak be az anyagba, csak a felületi réteggel lépnek kapcsolatba, így kétdimenziós rácson való diffrakciót kell figyelembe venni. Itt az útkülönbségből ϕ_0 szögű bejövő és ϕ szögű kimenő nyaláb esetén $a(\cos \phi - \cos \phi_0) = n\lambda$ esetén van interferencia. Ha a nyaláb a rácsnak megfelelő síkban esik be, egyébként külön a két rács-irányban lehet vizsgálni a szögeltérést, tehát ekkor $a(\cos \phi - \cos \phi_0) = n_x\lambda$ és $a(\cos \psi - \cos \psi_0) = n_y\lambda$ esetén van erősítés, utóbbi feltétel $\psi = \psi_0 = \pi/2$ esetén eltűnik. Az első erősítés szimmetria esetén van, ahol $\phi = \phi_0$ (azaz $n = 0$), további maximumok $n = 1, 2, \dots$ esetén.

Konkrétan H_2 és He szórást vizsgáltak alkáli-halogén sókristályon, és tényleg megfigyelték az $n = 1$ -hez tartozó csúcsokat. A kísérletek nehezek, mert monoenergiás nyaláb és pontos detektor kell, de megállapítható, hogy a hullámviselkedés az anyag általános tulajdonsága.

Ma is kutatott terület ez, például 1999-ben fullerénekkal figyelték meg (C_{60} nyalábbal, 900 K-nek megfelelő energiánál, ahol a sebesség átlagosan 210 m/s, a hullámhossz kb 2.5 pm, azaz lényegesen kisebb az 1 nm-es méretnél). Ez elméletileg nagyon érdekes, mert a C_{60} molekulának 174 vibrációs módusa van, és szinte szilárd testként tud feketetest-sugárzást kibocsátani, nem kezelhető egyszerű rendszerként. A kísérletek során 100 nm-es SiN rácsot alkalmaztak, majd 1 méternyi szabad út után Argon-ion lézerral ionizálva a molekulákat, detektálhatták őket (21. ábra). Egyértelműen interferenciavonalakat láttak, az elmélet és a kísérlet jó egyezést mutatott, noha a molekulák bonyolultak, erősen gerjesztettek, széles sebesség-eloszlással rendelkeznek, és többféle izotóp volt a mintában. A hiba javarészt a kollimáció hiányából, a sebességeloszlás szélességéből és a résvastagság bizonytalanságából adódik.

Egymolekulás interferenciát is sikerült létrehozni (Juffmann, 2012). A kísérletben > 1000 tömegesegységni molekulákat (ftálocianin származékokat) 10 nm vastagságú anyagba vágott rácsra irányítottak egyesével, és ténylegesen megfigyelték az interferenciakép kialakulását, lásd a 21. ábra jobb oldalán.

Az elmúlt években sikerült egy atom különböző atomi állapotainak interferenciáját is kimutatni (Parazzoli, 2012) Itt egy Mach-Zehnder-jellegű interferométerben vizsgáltak egy lézercsipesz (optical tweezer) segítségével szabadesésbe helyezett cézium atomot. Tükrök helyett fényimpulzusokat használtak, amelyek Raman-átmenetre kényszerítik a cézium atomot. Ezen átmenet során ahol a szórt foton energiájának egy része az atomot gerjeszti, és csökkent energiájú foton halad tovább, jelen esetben hiperfinom gerjesztésről van szó, az $F = 3$ ill. $F = 4$ állapotokról, ennek jelentését lásd a hidrogénatomról szóló fejezetben (de itt is megemlítnünk annyit, hogy az állapot a mag-



22. ábra. A Parazzoli-féle egyatomos interferenciakísérlet elrendezése (balra) és eredménye (jobbra). Az ábra forrása a Phys.Rev.Lett**109**,230401(2012) publikáció.

és az elektronperdület egymáshoz viszonyított irányától függ). Ezután az atom a két hiperfinom állapot koherens szuperpozíciójába kerül, amelyek között $\hbar k_{\text{eff}}$ impulzuskülönbség van, ahol k_{eff} a Raman-gerjesztő fény hullámszámvektora. Az impulzuskülönbség miatt a két állapot távolsága $x(t) = \hbar k_{\text{eff}} t / m$ módon növekszik, egészen $3.5 \mu\text{m}$ értékig. Ezután további impulzusokkal újra egymás felé irányítják az atom két állapotát, amelyek rekombinálódnak, majd a lézercsipesz segítségével „befogódik” az atom, és így a két állapot közötti fázistolás lemérhető. A folyamat során összegyűjtött fáziseltéréstől függően az interferométerben vagy jelentkezik az atom hatása, vagy nem. 813 egyedi atom vizsgálata után szépen kirajzolódik az interferenciamintázat (a fázistolás függvényében észlelt kumulált atomszám az $F = 3$ állapotban). A kísérletet a 22. ábra illusztrálja.

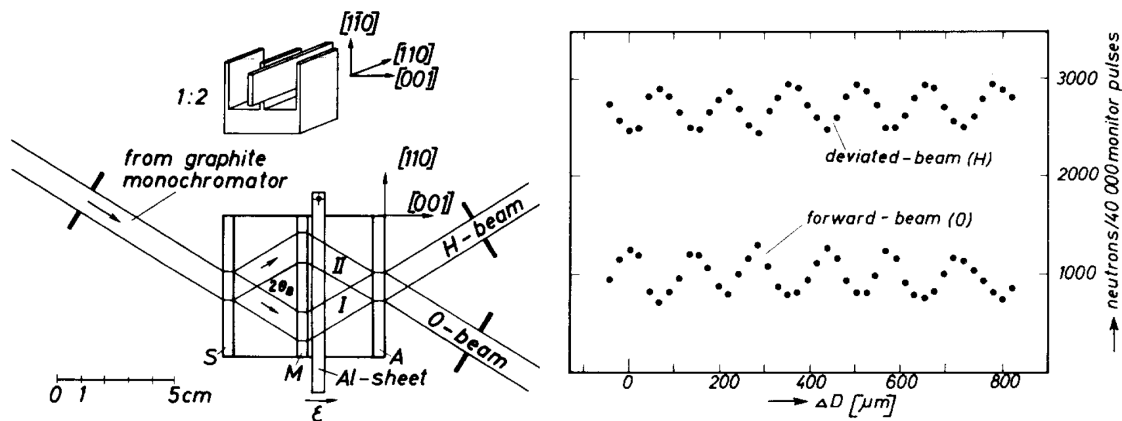
Neutronokkal is végeztek hasonló kísérletet (Rauch, 1974), reaktorból származó alacsonyenergiás, monokromatikus neutronokkal. Itt is lényegében Mach-Zehnder-interferométert használtak, de tükrök helyett természetesen más módszert kellett alkalmazni. A 0.6%-os pontosságon belül monokromatikus, $\lambda = 2 \text{ \AA}$ hullámhosszú nyalábot monolitikus, tökéletes szilíciumkristályon történő kettős töréssel osztották két részre (érdekességképpen megemlíthetjük, hogy a Wacker-Chemitronic által növesztett egykristály 8 cm átmérőjű és 7 cm hosszú volt, és ebből alakították ki a kísérleti berendezést), majd egyesítették újra egy-egy közbenső „fallal”, ahogy az a 23. ábrán is látható. A létrehozott struktúráknak a rácsállandónak megfelelő skálán belül párhuzamosnak kellett lennie. Ekkor az egyenesen továbbhaladó és az eltérülő nyaláb intenzitását kiszámítva valóban az útkülönbségből adódó fázistolás adja meg, hogy konstruktív vagy destruktív interferencia jön-e létre. Ha a nyaláb útjába valamilyen anyagot helyezünk, annak törésmutatója a b_c koherens szórási hosszától, a neutronok λ hullámhosszától és az anyagban lévő atomok ν sűrűségétől függően

$$n = 1 - \lambda^2 (N b_c / 2\pi) \quad (169)$$

lesz. Ezzel kifejezhető a fázistolás:

$$\Delta\phi = (1 - n)2\pi D / \lambda = \lambda N b_c D \quad (170)$$

és végül a ΔD optikai hossz az útban elhelyezett alumíniumlap ϵ forgatásával variálható, annak szögével kifejezhető, ha θ_B a Bragg-szög. Ennek függvényében mérték az intenzitást, és a 23. ábra jobb oldalán látható, $\cos \Delta\phi$ jellegű oszcillációt tapasztaltak. Érdekesség, hogy a gravitáció szerepe is kimutatható, ha az elrendezést a bejövő nyalábút mentén elforgatjuk. Ekkor az egyik ágon a nyaláb az út egy részét magasabb gravitációs potenciálon tölti, és így kisebb lesz itt a hullámszáma, $k'^2 = k^2 - 2m^2 g h / \hbar^2$ mértékben (ahol h a magasság, g a gravitációs gyorsulás értéke. Emiatt azonos s úton is $(k - k')s$ fáziseltérés lesz amely kimutatható a megjelenő interferenciamintázatban! A részletek megtalálhatóak Colella, Overhauser és Werner eredeti Phys. Rev. Letters **34** (23), 1472 (1975) cikkében is. A kísérletet később (1980-ban) függőleges bejövő nyalábbal, és a függőleges tengely körül forgatott interferométerrel is megismételték. Ekkor a Coriolis-hatás jelenik meg, és így a függőleges tengely körüli forgásszögének függvényében változni fog az egyes detektorokban



23. ábra. A Rauch-féle neutronnyalábos interferenciakísérlet elrendezése (balra) és eredménye (jobbra). Az elrendezésben S -sel jelölt nyalábosztó (splitter) után az M tükör (mirror) következik, majd az A analizáló. Az alumíniumlap elfordulását az ϵ szög jelzi. Az egyes struktúrák távolsága $27,2936 \pm 0.0009$ mm volt, míg a méretük 4.3954 ± 0.0008 mm. A jobb oldali grafikonon a nyaláb útjába helyezett alumíniumlemez okozta fáziseltérés függvényében ábrázolták a két detektált nyaláb intenzitását. Az ábra forrása a Phys.Lett.**47A**,369(1974) publikáció.

észlelt intenzitás – ezt a kísérletet Straudenmann, Werner, Colella és Overhauser Phys. Rev. **A21** (1980) 1419 cikke írja le. Mindezek elolvashatóak Patkós András „Bevezetés a kvantumfizikába” c. könyvében is.

5.3. Terjedési amplitúdó és hullámfüggvény

Az anyaghullámok tehát **kísérleti tényként kezelendők**, a kísérletek megkövetelik, hogy a részecskékhez interferenciaképes amplitúdót kell hozzárendelni. Próbáljuk meg az anyaghullámokat az elektromágneses hullámoknak megfelelően kidolgozni. A kétrés-kísérletben a két nyaláb időbeli fejlődése (például az elektromos térerősségé) egy adott térbeli pontban

$$A_1 = a_1 e^{i(\omega t + \phi_1)} \text{ és} \quad (171)$$

$$A_2 = a_2 e^{i(\omega t + \phi_2)}, \quad (172)$$

azaz a fáziskülönbség $\delta = \phi_2 - \phi_1$. Ekkor az ernyőn mért intenzitás az amplitúdó négyzete:

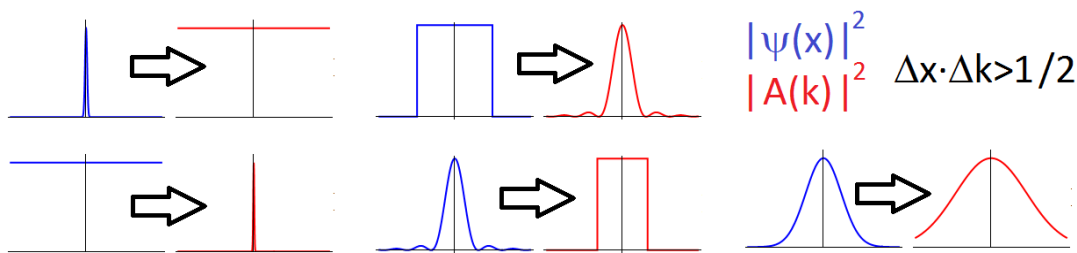
$$I_{12} = |A_1 + A_2|^2 = |e^{i\omega t}|^2 |a_1 e^{i\phi_1} + a_2 e^{i(\phi_1 + \delta)}|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta \quad (173)$$

azaz $I_1 = I_2 = I$ esetén $0 \leq I_{12} \leq 4I$. Anyaghullámokkal hasonló a tapasztalat, de kérdés, hogy mi az A mennyiség?

Ha bevezetünk egy $P(x)$ megtalálási **valószínűsége** (x és $x + dx$ között $P(x)dx$), akkor ez lehetne az amplitúdó négyzete (ahogy az elektromágneses sugárzás esetén az intenzitás az elektromos és/vagy a mágneses tér négyzetével arányos). Tehát legyen $P(x) = |\Psi(x)|^2$, ahol Ψ komplex függvény.

Ha kísérletben észlelni próbáljuk (pl. fotocellával megmérjük), hogy melyik résen megy át az elektron vagy a foton, és ezt coincenciába kötjük a mintázattal, akkor szimplán az $I = |A_1|^2 + |A_2|^2 = I_1 + I_2$ értéket kapjuk vissza. Tehát csak akkor tapasztalunk interferenciát, ha nem tudjuk, hogy az elektron/foton melyik utat választotta. Ha vizsgáljuk a részecske útját, akkor oszthatatlannak tűnik, és „választ” a lehetőségek között. Ha tehát több út lehetséges egy részecske számára, akkor az egyes utak valószínűség-amplitúdói összeadódnak, és $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$, és $P = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$. Ez több lehetőségre is kiterjeszthető, és akkor érvényes, ha nem lehet eldönteni, hogy melyik valósult meg. Ha eldönthető, akkor $P = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$.

Kérdés, hogy mit válasszunk Ψ alakjaul (mielőtt matematikailag megalkothatnánk egy „valódi” elméletet). A síkhullámnak megfelelően lehetne $\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$. Kérdés, hogy k és ω



24. ábra. Adott $\Psi(x)$ -hez tartozó $A(k)$ eloszlások. Nem lehet mindkettőt lokalizálni, azaz létezik egy határozatlansági reláció, $\Delta x \Delta k \geq 1/2$ vagy $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

hogyan legyen megválasztva. Miután $px - Et$ Lorentz-invariáns, azaz értelmes mennyiségnek tűnik, válasszuk ezt, azaz legyen $E = \hbar\omega$ és $p = \hbar k$, ahogy de Broglie illetve a fotoeffektus és egyéb kísérletek nyomán láttuk, és ekkor

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (px - Et) \right]. \quad (174)$$

Ha p és E határozott értéket vesz fel, akkor ez így nem lokalizálható térben és időben! Ha Ψ -t úgy akarjuk megkonstruálni, hogy lokalizált részecskét adjon, akkor nem lehet határozott energiát/impulzust megadni, márpedig csak lokalizált részecske észlelhető és közvetíthet jelet!

5.4. Határozatlanság és hullámcsomagok

Ha két hullámot veszünk ω_1 és ω_2 frekvenciákkal (és k_1 ill. k_2 hullámszámvektorral), akkor az összeadódás után $2 \exp(i(k_1 + k_2)x - i(\omega_1 + \omega_2)t)/2) \cos((\Delta kx - \Delta\omega t)/2)$ hullámfüggvény jön létre, a koszinuszos tag a görbe burkolója lesz, azaz egyfajta **hullámcsomagot** hoz létre. A burkoló fázissebessége $\Delta\omega/\Delta k$ lesz (ez az a sebesség, amellyel a fázis, azaz a maximumok helye halad), ez lesz valójában a csoportsebesség, a teljes hullám fázissebessége az összegek hányadosa lesz. Ekkor mindenesetre a részecske helye rögzített t esetén egy $2\pi/\Delta k$ intervallumon adott csak, tehát $\Delta x \Delta k = 2\pi$ (mivel $\Delta kx/2$ a cos argumentuma).

A valóságban, igazi hullámcsomagokban a **hullámszámok egy tartományban folytonosan vannak jelen**, azaz megjelenik egy $A(k)$ amplitúdó, azaz

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk \quad (175)$$

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx \quad (176)$$

tehát ezek egymás Fourier-transzformáltjai. Ekkor egy **lokalizálatlan hullámfüggvényhez** (síkhullámhoz) egy Dirac-delta módon **lokalizált $A(k)$ tartozik** és fordítva. Egy Gauss-görbe szerűen térben lokalizált hullámfüggvényt egy inverz szélességű $A(k)$ Gauss-görbe ad, míg egy adott Δk intervallumon konstans $A(k)$ -hoz $4\pi/\Delta k$ szélességű sinc hullámcsomag tartozik (amely még ezen túl is oszcillál, mint egyfajta csillapított oszcillátor), illetve a térben Δx intervallumon konstans valószínűsűrűséggel lokalizált **hullámcsomag** impulzuseloszlása például szintén sinc jellegű, $\sin(k\Delta x\pi)/k$ alakú függvényből állítható elő (pontosabban ez az $A(k)$ eloszlás alakja, az impulzus valószínűsűrűsége ennek négyzete). Mindezeket a 24. ábra is mutatja, illetve az alábbiakban is összefoglaljuk:

$$A(k) \propto \delta(k - k_0) \rightarrow \Psi(x) \propto e^{ik_0 x} \quad (177)$$

$$A(k) \propto e^{ik(x-x_0)} \rightarrow \Psi(x) \propto \delta(x - x_0) \quad (178)$$

$$A(k) \propto \chi_{[-\Delta k/2, \Delta k/2]} \rightarrow \Psi(x) \propto \frac{\sin(\Delta kx\pi)}{x} \quad (179)$$

$$A(k) \propto \frac{\sin(k\Delta x\pi)}{k} \rightarrow \Psi(x) \propto \chi_{[-\Delta x/2, \Delta x/2]} \quad (180)$$

$$A(k) \propto e^{-k^2/\Delta k^2} \rightarrow \Psi(x) \propto e^{-x^2 \Delta k^2/2}, \quad (181)$$

ahol χ_A az A halmaz karakterisztikus függvényét jelöli, azaz egy intervallum esetén a „doboz” függvényét. Ha $\langle x \rangle = \int x |\Psi(x)|^2$ és $\langle k \rangle = \int k |A(k)|^2$ jellegű várható értékek segítségével bevezetjük általánosságban a hely- és hullámszám-bizonytalanság

$$\Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle, \text{ és} \quad (182)$$

$$\Delta k^2 = \langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle \quad (183)$$

fogalmát, akkor kiderül, hogy bármely függvényre $\Delta x \Delta k$ alulról korlátos, és Gauss alaknál a legkisebb, itt $\Delta x \Delta k = 1/2$, azaz

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (184)$$

ez a **Heisenberg-féle határozatlansági reláció**, amely kiterjeszthető az $\exp i\omega t$ tagra is:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (185)$$

A kvantumelmélet ezt még jobban megmutatja majd, hogy tehát az energiabizonytalanság és a rendszer karakterisztikus ideje (pl. a részecske élettartama) nem lehet egyszerre nagyon kicsi, a kettő szorzata alulról korlátozott a fentiek szerint. A kvantumelméletben tehát nincsenek pontos koordináták, a pályafogalom értelmetlen, és egyes fizikai mennyiségek nem határozhatóak meg egyszerre. Később látjuk: a mérhető mennyiségek operátorok, mérésük esetén a hullámfüggvény az operátor sajátfüggvénye lesz, értéke pedig a sajátérték, és csak kommutáló operátoroknak megfelelő mennyiségek mérhetőek egyszerre, mivel ezek sajátállapotai megegyeznek. A határozatlanság a mikrovilág objektív törvényszerűsége és nem a kísérletező ügyetlensége, a mérőrendszer és az objektum kölcsönhatása nem tarthat a nullához.

Az egyelektronos interferencia-kísérlet ténylegesen elvégezhető (Feynman még azt írta, hogy ezt még ugyan senki sem látta, de így kell, hogy legyen), és tényleg a pontosan azonos elektronok egyike itt csapódik be, a másik ott, és sok elektron alakítja ki az interferenciamintázatot, amely lényegében tényleg $|\Psi|^2$ -nek megfelelően adódik. Tehát az események **valószínűségi jellege** valahogy elsődleges tulajdonsága a fizikának, vagy nem értjük valamely rejtett, de mérhető változók időbeli fejlődését? A fizika a reprodukálható kísérleteken nyugszik, ugyanakkor csak átlagos viselkedés reprodukálódik (nem úgy, mint a kinetikus hőtanban, ahol csak nem tudjuk mindegyik részecskét követni, hanem fundamentálisan, az elméletből következő módon).

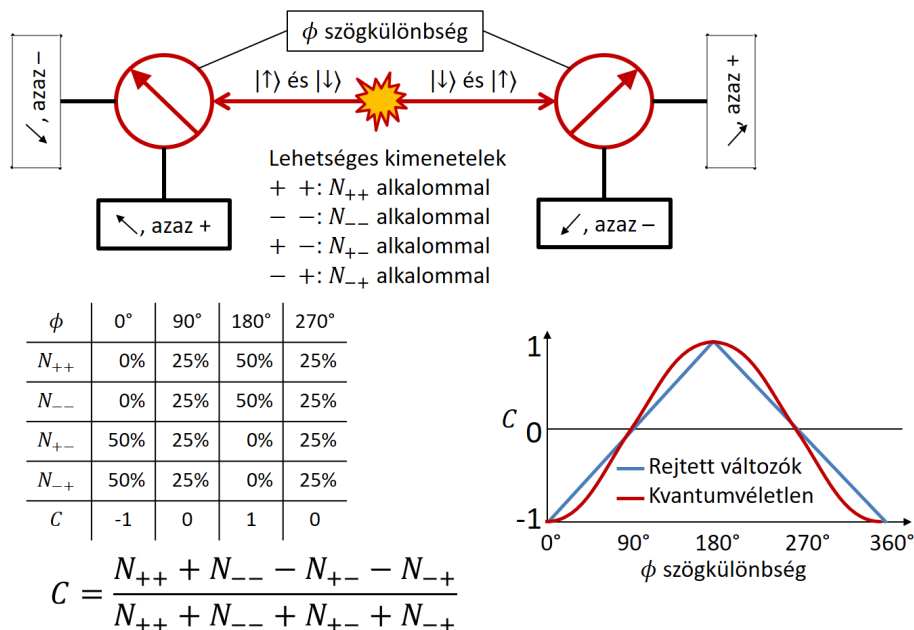
Gyakorló feladat

Ha a neutron valójában egy protonméretű (kb. 1 fm-es méretskálájú) térrészbe koncentrált proton-elektron „kötött állapot” lenne, akkor mekkora lenne az elektron energiájának bizonytalansága? Hogy viszonyul ez a proton $938,3 \text{ MeV}/c^2$ -es tömegéhez, a neutron $939,6 \text{ MeV}/c^2$ tömegéhez, illetve a kettő különbségéhez?

5.5. A kvantummechanika értelmezései, rejtett változók vizsgálata

Interpretációk lehetnek szükségesek a fentiek „feldolgozásához”. Ezekből sokféle van, az alábbiakban néhány alapvető verziót megemlítünk, hozzáátéve, hogy ezek tárgyalása többnyire inkább a tudományfilozófia, mintsem a tudomány tárgykörébe tartozik.

- A hullámfüggvény ténylegesen a térbeli töltéseloszlást jelenti. (Schrödinger)
- A hullámfüggvény nem jelent fizikailag semmit szinte, csak valószínűségi amplitúdó, és méréskor a hullámfüggvény „omlik össze” egy adott kimenetelnek megfelelően. (Koppenhága, Bohr és Heisenberg)
- A tudattal való kölcsönhatás okozza az „összeomlást”. (Neumann, Wigner)
- Méréskor minden lehetséges „összeomlott” hullámfüggvény egyszerre megvalósul, emiatt a valóság mindig felhasad sok „párhuzamos” világra, valahányszor mérés történik. (Everett, Wheeler, DeWitt)



25. ábra. Az EPR-paradoxonra épített Bell-féle kísérlet. A felső ábrán a kísérlet elrendezése látható, egymástól független szögekben mérő detektorokkal. Bal alul adott szögeknél a négy „fix” kimenetel valószínűsége, míg jobb alul a kvantumvéletlen és a rejtett változós klasszikus véletlen (maximális) előrejelzése.

- Nincs szükség interpretációra, „shut up and calculate” (instrumentalizmus, Mermin, Feynman)
- A hullámfüggvény önmagában nem értelmezendő, csak egy sokaság részeként (statisztikus interpretáció, Born)
- A hullámfüggvény-összeomlások objektíven létrejönnek, a fekete lyukak ellentétéként egyfajta „fehér lyukat” jelentenek, és fizikai határa van annak, hogy milyen méret felett beszélünk mérésről és összeomlásról, és mi alatt folytonos időfejlődésről. (Penrose)
- A kvantumelmélet nem teljes, és vannak valamilyen rejtett változók, amelyek időbeli fejlődése adná meg a determinisztikus viselkedést („Isten nem kockajátékos”, Einstein, de Broglie); Bohm konkrét elméletében van egy irányító egyenlet, amely kialakítja a részecske trajektóriáját a hullámfüggvény által leírt valószínűségeken belül.

Az utolsó pontot érinti **EPR-paradoxon**. Ezt a paradoxont Einstein, Podolsky és Rosen állította fel, és az az alap gondolata, hogy ha (például egy pozitron-bomlás és annihiláció során) keletkezik egy fotonpár, akkor a perdületmegmaradás miatt a teljes spinjük (azaz perdületük) ismert, noha az egyik kiválasztott részecske spinje bármi lehet. Emiatt a két részecske állapota **összefonódott**, tehát ha megmérjük az egyik spinjét, akkor abból azonnal következtethetünk a másik spinjére is. A kétféle spinre „elkent” állapot egyetlen spinűre összeomlik. Így azonban nem csak a mért részecske, hanem a másik hullámfüggvénye is összeomlik, hiszen *tudjuk* a spinjét! Lehet azonban, hogy ez a másik részecske már közben nagy távolságba került az eredetitől, mégis *azonnal* saját állapotba kell kerülnie! Ez távolhatásnak tűnik, ugyanakkor itt nem történik információtovábbítás, a másik részecskét megfigyelve semmilyen változást nem látunk, hiszen ezt csak akkor tehetnénk, ha megmérnénk a spinjét, azonban ekkor amúgy is „összeomlana” a saját állapota.

Talán még fontosabb, hogy megvizsgálhatjuk a két foton mért spinje közötti korrelációt. Erre vonatkozik az alábbiakban vázolt kísérlet, amelyet a 25. ábra is illusztrál. A kísérlet lényege, hogy a fent leírt, valamilyen konkrét irány szerinti felbontásban egyszerre „fel” (\uparrow) és „le” (\downarrow) állapotban lévő részecskepár összes perdülete biztosan nulla, tehát ha az egyiket adott irányban „fel” perdületűnek mérjük, akkor a másik biztosan „le” perdületűt adna, ha megmérnénk a perdületét ugyanabban az irányban. Jelöljük a teljes kísérlet kiementelét egy ab párral, ahol $a, b = +, -$, azaz $++$ azt jelenti, hogy mindkét részecskét $+$ („fel”) perdületűnek mértük, $+-$ azt, hogy az egyik

+, a másik – eredményt adott. Mivel egyébként a perdületek iránya véletlenszerű, ezért az esetek 50-50%-ában ++ és -- események történnek. Ha bevezetjük az adott kimenetek számát vagy arányát, akkor $N_{+-} = N_{-+} = 50\%$, és $N_{++} = N_{--} = 0\%$, hiszen nem adhat azonos eredményt a két részecske – amennyiben a két detektor azonos állásban van. Ha azonban a két detektor ellentétes irányban áll (azaz 180° szög van közöttük), akkor $N_{+-} = N_{-+} = 0\%$, és $N_{++} = N_{--} = 50\%$, hiszen a „lefelé” álló detektorban „le” eredményt adó részecske perdülete valójában ekkor felfelé mutat, tehát a másik, felfelé mutató detektorban „le” eredményt kell kapnunk. Általánosságban viszont ilyen egyszerűen nem kapható meg az eredmény. A klasszikus lokális valószínűségszámítás szerint, rejtett változók által okozott spinbeállásból kiindulva, legfeljebb a 25. ábra grafikonját látható szögletes eredményt kapjuk (azaz pl. 135 foknál $1/2$ -et) – míg kvantumfizikai véletlenből kiindulva a szinuszos görbét (azaz pl. 135 foknál $1/\sqrt{2}$ -t, ami több, mint $1/2$). Az adatok pedig a második eshetőséget támasztják alá, azaz a kísérlet kizárja, hogy az a kísérlet eredményét a kiinduláskor már meghatározott, lokális kölcsönhatásokban résztvevő rejtett változók okozzák!

Ez tehát azt jelenti, hogy el kell fogadnunk, hogy a fizika a fenti értelemben véve nem determinisztikus, azaz a kiindulóállapotból nem tudjuk meghatározni a kísérlet végeredményét, a véletlen szerepe megkerülhetetlen! Érdekes hozzáfűzni, hogy valójában van egy „kiút”: a szuperdeterminizmus, azaz hogy a kísérlet eredménye valahogy „eleve elrendeltetett”. Ekkor azonban a fizika törvényei csak annyiban írják le a világot, amennyiben egy épület alakját a tervrajz vagy egy színdarab történéseit a szöveggönyv: nem tudunk logikai alapon előrejelzést tenni, legfeljebb felismerni a tervező/író gondolkodását. Ez azonban tulajdonképpen nem tudományos értelemben vett elmélet, hiszen nem ad tesztelhető jóslatot, és így tulajdonképpen inkább a filozófia tárgykörébe tartozik. Meg kell mindenesetre állapítanunk, hogy van három tulajdonsága a fizikai világnak, amelyek közül (legalább) az egyik biztosan igaz:

- indeterminisztikus,
- nemlokális,
- szuperdeterminisztikus.

A fizikusok többsége (valószínűleg, jelen állás szerint statisztikailag megalapozott felmérés nem ismert e tárgyban) az indeterminizmust „választja”, de ennek részletesebb tárgyalása kívül esik jelen kurzus és jegyzet keretein.

6. A kvantummechanika alapjai

6.1. A kvantummechanika matematikai képe

A kvantummechanika matematikai képe az, hogy egy részecske állapota egy $\Psi(x)$ **állapotfüggvény**. Ezen állapotfüggvények a \mathbb{M} téren a Lebesgue-mérték szerint négyzetesen integrálható függvények Hilbert-teréből³ kerülnek ki, azaz

$$\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C}) = \mathcal{H}. \quad (186)$$

Valójában ezt a teret, ahogy látni fogjuk, a disztribúciókkal ki kell egészítenünk, különben bizonyos állapotok nem lennének benne a fenti térben. Ezt azonban itt nem tárgyaljuk, elég annyit megemlíteni, hogy a disztribúciók olyan lineáris operátorok, amelyek függvényekhez rendelnek számokat (bizonyos értelemben integrálás révén), és példa rájuk a Dirac-delta, amely minden függvényhez a nullában vett értékét rendeli (azaz úgy is lehet rá tekinteni, mint egy 0-t kivéve mindenhol 0 értékű, 1 integrálú „függvényre”, csakhogy ilyen nem létezik). A \mathcal{H} Hilbert-téren a szorzat integrálja adja a skalárszorzatot:

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{M}} \Psi_1^* \Psi_2 \quad (187)$$

³A Hilbert-tér olyan vektortér, amelyben van belső szorzás (kb. skalárszorzás), metrika, és még teljes is, azaz a Cauchy-sorozatoknak van határértéke a térben. Például a racionális számok tere nem teljes, mert egyes konvergens sorozatok irracionális számokhoz tartanak – és vice versa.

A fizikai mennyiségek pedig ezen a téren ható **lineáris operátorok**, azaz

$$\hat{A} \in \text{Lin}(\mathcal{H}). \quad (188)$$

A lineáris operátoroknak vannak **sajátállapotaik**, amelyekre $\hat{A}\Psi = A\Psi$, ahol az A szám az operátor **sajátértéke**. Egy fizikai mennyiségnek az értéke egy adott részecskére (az energiája, impulzusa, helye stb.) akkor ad előre tudható választ, ha a részecske a megfelelő operátor sajátállapotában van, és ekkor a mérés eredménye az ennek a mennyiségnek megfelelő operátor sajátértéke az állapoton. Egyéb esetben a mérés során a kvantummechanika szerint a megfigyelt rendszer hullámfüggvénye „összeomlik”, és a sok sajátállapot szuperpozíciója helyett egy adott sajátállapotba kerül. Ilyenkor a mérés várható eredménye, azaz az adott fizikai mennyiség várható értéke az operátor várható értékével egyezik meg:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi} := \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{A}\Psi. \quad (189)$$

Vegyük észre, hogy mivel a fizikai mennyiségek valós várható értékkel kell, hogy rendelkezzenek, így

$$\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^* = \langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle, \quad (190)$$

ez utóbbi viszont éppen az \hat{A} operátor adjungáltjának definíciója, így önadjungált operátorokat kell választanunk. Az önadjungált operátorok sok hasznos tulajdonsággal rendelkeznek (főleg persze végesdimenziós Hilbert-terekben), különös tekintettel arra, hogy a Φ_i sajátállapotaik ortogonális (megfelelő választás esetén ortonormált) rendszert alkotnak. Így egyrészt az operátor ebben a bázisban a λ_i sajátértékeiből alkotott diagonális mátrixként írható fel:

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i \Phi_i \langle \Phi_i | \quad (191)$$

ahol használtuk a $\langle \Phi | : \Psi \rightarrow \langle \Phi, \Psi \rangle$ jelölést. Bizonyos („folytonos spektrumú”) operátorok esetén itt folytonosan végtelen sok sajátállapot jelenik meg, és így összegzés helyett integrálásra lesz szükség. A megszámlálhatóan végtelen sajátértékkel rendelkező („diszkrét spektrumú”) operátoroknál maradván az is igaz, hogy minden állapot kifejezhető tetszőleges fizikai mennyiség sajátállapotai szerinti felbontásban:

$$\Psi = \sum_i a_i \Phi_i \text{ ahol } a_i = \langle \Psi, \Phi_i \rangle. \quad (192)$$

Ezen a ponton érdemes azt is észrevennünk, hogy általában $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, és ez nem csak az értelmezési tartományok különbözősége miatt lehet, hanem egyszerűen más értéket is adhat a kétféle szorzat. Az ilyen **nem kommutáló** operátorok különböző sajátállapotokkal rendelkeznek. Ekkor mindkettő egyszerre nem lehet teljesen meghatározott, hiszen Ψ csak egyiknek lehet sajátállapota (kivéve speciális eseteket, amikor a két operátor sajátállapotai között van átfedés). Ennek megértéséhez a $\Delta_{\Psi}\hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi}$ operátor segítségével vezessük be egy fizikai mennyiség a szórását:

$$(\sigma(A))_{\Psi}^2 := \langle (\Delta_{\Psi}\hat{A})^2 \rangle_{\Psi} = \langle \hat{A}^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi}^2, \quad (193)$$

$$(\Delta A)_{\Psi} := \sqrt{\langle (\Delta_{\Psi}\hat{A})^2 \rangle_{\Psi}}, \quad (194)$$

és ez lényegében az adott fizikai mennyiség „standard bizonytalansága” a Ψ állapotban. Vegyük észre, hogy ha $\hat{A}\Psi = A\Psi$, azaz a Ψ állapot az \hat{A} operátor sajátállapota, akkor $\langle \hat{A}^2 \rangle_{\Psi} = \langle \hat{A} \rangle_{\Psi}^2 = A^2$, azaz $(\Delta A)_{\Psi} = 0$. Eszerint tiszta, avagy szórásmentes állapotnak azt nevezzük, amely valamely mennyiség sajátállapota, azaz arra vonatkozóan a szórása nulla.

Két mennyiség szórásának szorzatára általánosságban levezethető, hogy tetszőleges állapotban igaz a

$$(\Delta A)_{\Psi}(\Delta B)_{\Psi} \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_{\Psi} \right| \quad (195)$$

egyenlőtlenség, amely tulajdonképpen a Heisenberg-féle határozatlansági reláció általánosítása (és néha Robertson-féle határozatlansági relációnak is hívják). Ez belátható például úgy, ha bevezetünk egy

$$\Phi = \left(\Delta_{\Psi} \hat{A} - i\lambda \Delta_{\Psi} \hat{B} \right) \Psi \quad (196)$$

állapotot, tetszőleges λ érték mellett. Mivel erre $\Phi^2 \geq 0$, így a definícióból (és a következő lépésben az adjungálás definícióját is kihasználva, illetve azt, hogy a konvenció szerint a skalárszorzat első tagjában végezzük a komplex konjugálást):

$$\left\langle \left(\Delta_{\Psi} \hat{A} - i\lambda \Delta_{\Psi} \hat{B} \right) \Psi, \left(\Delta_{\Psi} \hat{A} - i\lambda \Delta_{\Psi} \hat{B} \right) \Psi \right\rangle \geq 0, \text{ azaz} \quad (197)$$

$$(\Delta A)_{\Psi}^2 + \lambda^2 (\Delta B)_{\Psi}^2 - i\lambda \langle [\Delta A, \Delta B] \rangle_{\Psi} \geq 0. \quad (198)$$

Mivel azonban $[\Delta_{\Psi} \hat{A}, \Delta_{\Psi} \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$, amely anti-önadjungált operátor (azaz adjungáltja a mínusz egyszerűsége), így várható értéke imaginárius, és így a fenti egyenlőtlenség bal oldalán lévő kifejezés minden tagja valós, a kifejezés pedig kvadratikus λ -ban. Ez akkor nem lesz sosem negatív, ha nincs két valós gyöke (amelyek között különben negatív lenne), amely pedig akkor teljesül, ha a diszkrimináns nem pozitív:

$$|\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle_{\Psi}|^2 - 4(\Delta A)_{\Psi}^2 (\Delta B)_{\Psi}^2 \leq 0. \quad (199)$$

Ebből viszont éppen a fenti határozatlansági reláció adódik! Érdemes megemlíteni, hogy a fentiek kicsit bonyolódhatnak, ha az A vagy B operátorok nem a teljes \mathcal{H} téren értelmezettek, ekkor furcsa ellenpéldák is adódhatnak, illetve lényeges az is, hogy noha $[A, B] \neq 0$, ez nem jelenti azt, hogy adott, speciálisan preparált állapotban a várható értéke nem lehet nulla.

A Bohr-modell pályafogalma a fentiek miatt értelmetlen. Ugyanakkor határozatlanságot figyelembe véve, ha $\Delta p = p/2$ és $\Delta x = r$, a minimális bizonytalanságot alapul véve $pr = \hbar$. A hidrogénatombeli elektron energiája ekkor $p^2/2m - ke^2/r$, azaz $\hbar^2/(2mr^2) - ke^2/r$. Tehát önmagában az r -nél kisebb térrészbe záráshoz szükséges energia és a Coulomb-energia összege (az utóbbi negatív, hiszen annál kedvezőbb a helyzet, minél távolabb vagyunk a magtól) nem nulla, de rendelkezik egy minimummal, 53 pm körül, ez éppen -13,6 eV energiának felel meg! Tehát a Bohr-modell alapállapotbeli energiaszintje a pályafogalom nélkül is kijön, csak a határozatlanságból (és némi becslésből...).

Gyakorló feladat

Ellenőrizzük, hogy önadjungált \hat{A} és \hat{B} operátorok esetén $[\hat{A}, \hat{B}]$ valóban anti-önadjungált-e, illetve hogy anti-önadjungált operátorok várható értéke valóban imaginárius-e mindig (legalábbis megfelelően jól viselkedő operátorok esetén).

6.2. A fizikai mennyiségeknek megfelelő operátorok

Kérdés ezek után, hogy hogyan definiáljuk az egyes fizikai mennyiségeket jelentő operátorokat. Először is vizsgáljuk meg az impulzus esetét. Tudjuk, hogy erre $p = \hbar k$, és legyen egy $A(k)$ hullámszámspektrummal rendelkező állapotunk, amelyre

$$\langle p \rangle = \int dk A^*(k) \hbar k A(k), \quad (200)$$

ugyanis a k hullámszámvektorok valószínűségi eloszlását éppen $|A|$ adja meg. Ekkor $A(k)$ helyére a $\Psi(x)$ Fourier-transzformáltat helyettesítve a következő adódik:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx \Psi^*(x) e^{ikx} \hbar k \int dx' \Psi(x') e^{-ikx'}, \quad (201)$$

majd itt a k -t az $e^{-ikx'}$ deriváltjának szorzójaként értelmezve:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk dx dx' e^{ikx} \Psi^*(x) \Psi(x') i\hbar \frac{d}{dx'} e^{-ikx'}. \quad (202)$$

Végezzünk itt el egy parciális integrálást, amellyel a deriválás (mínusz eggyel szorozva) átkerül az exponenciálisról Ψ -re (és további tagok nem jelennek meg, mivel Ψ négyzetesen integrálható, és így eltűnik a végtelenben). Használjuk ki ezen kívül azt is, hogy $\int dk e^{ikx} e^{-ikx'} = 2\pi\delta(x-x')$, ezzel

$$\langle p \rangle = \int dx' dx \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx'} \right) \Psi(x') \delta(x-x') \quad (203)$$

$$= \int dx \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi(x). \quad (204)$$

Hasonlítsuk össze ezt azzal, ahogy a \hat{p} operátor várható értékét megkaphatnánk:

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x) (\hat{p}\Psi)(x). \quad (205)$$

Ebből közvetlenül adódik, hogy az impulzusoperátor

$$\hat{p} : \Psi \rightarrow -i\hbar \nabla \Psi \quad (206)$$

módon adható meg (ahol ∇ a deriválást jelenti). Síkhullámok esetén ezt egyből láthatjuk, hogy működik, ugyanis

$$\hat{p}e^{ikx} = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx} = p e^{ikx}. \quad (207)$$

Mindez több dimenzióban is érvényes, ekkor az impulzusoperátor a deriválásoperátornak felel meg továbbra is, de mindkettő vektor-operátor, azaz értéke az impulzustér és a \mathcal{H} Hilbert-tér tenzorszorzatában van. Koordináták bevezetésével így az impulzusoperátor komponensei az adott koordináta szerinti deriválások lesznek. Figyeljük meg, hogy tulajdonképpen az $A(k)$ hullámszámspektrum éppen az impulzusoperátor sajátállapotai (a síkhullámok) szerinti felbontás együtthatói lesznek. Természetesen a fentieket az energiával való szorzásra is kiterjeszthetjük, és így $\hat{E} = i\hbar \partial_t$ lesz – az impulzusoperátorhoz képest adódó előjelkülönbség a relativisztikus négyesvektorok indexváltásából adódik, ahogy az a $px - Et$ vagy $kx - \omega t$ Lorentz-invariáns kifejezésekben is látszik.

Vegyük észre, hogy a síkhullámok nem elemei a fent definiált \mathcal{H} Hilbert-térnek (hiszen nem integrálhatóak négyzetesen), mik akkor az impulzusoperátor sajátállapotai a Hilbert-térben? Ezen kérdés vizsgálatához a fentiekénél kicsit korrektebb matematikai kezelésre lenne szükség, de érdemes azért annyit megemlíteni, hogy ilyenkor a fenti módon definiált, $-i\hbar \nabla$ operátor adjungált kiterjesztését kell venni, és ezt azért tehetjük meg, mert ∇ értelmezési tartománya sűrű a Hilbert-téren. Az impulzusoperátor tehát valójában nem önadjungált, hanem szimmetrikus, azaz a Hilbert-térből az értelmezési tartományába tartozó Ψ és Φ elemekre $\langle \Psi, \hat{p}\Phi \rangle = \langle \hat{p}\Psi, \Phi \rangle$. Egyúttal, mivel az adjungált kiterjesztése önadjungált, így lényegében önadjungált is. Ugyanakkor nincsenek sajátvektorai és sajátértékei, de van spektruma, amelyet a korlátos operátorokra értelmezett spektrum definíciójából (azon λ értékek, amelyekre az $\hat{A} - \lambda \text{id}$ operátornak nincs korlátos inverze – ez a halmaz tartalmazza a sajátértékek halmazát) általánosíthatunk. Látjuk tehát, hogy a kvantummechanika matematikailag tényleg korrekt megfogalmazása korántsem olyan egyszerű, mint ahogy fizikus nyelven erről beszélni szoktunk, de efelett a probléma felett, mint oly sok másik helyen és alkalommal, most is átsiklunk.

Vegyük észre inkább, hogy az impulzusoperátor az eltolásokkal igen egyszerű kapcsolatban van. Definiáljuk az $\mathbb{M} = \mathbb{R}^3$ tér a vektora esetére $D(a)$ eltolás-operátort, amely a Ψ -re hatva a $(D(a)\Psi)(x) = \Psi(x+a)$ állapotot (hullámfüggvényt) hozza létre. Ha most egy infinitezimális ϵ eltolásvektort veszünk, arra

$$\epsilon \nabla \Psi(x) = \Psi(x+\epsilon) - \Psi(x) \text{ miatt} \quad (208)$$

$$D(\epsilon)\Psi = \Psi + (\epsilon \cdot \nabla)\Psi = e^{\epsilon \cdot \nabla} \Psi \quad (209)$$

lesz igaz, ahol kihasználtuk, hogy ϵ infinitezimális. Itt természetesen ügyelnünk kellene a matematikai részletekre, de szerencsére ezt helyettünk más már megtette, így csak észrevesszük, hogy ebből sok infinitezimális eltolás összege esetén, véges eltolásokra is

$$D(a)\Psi = e^{a \cdot \nabla} \Psi = e^{-\frac{i}{\hbar} a \cdot \hat{p}} \Psi \quad (210)$$

lesz igaz. Ilyen értelemben az impulzusoperátor az eltolások által (a kompozícióval, mint csoportművelettel) alkotott csoport generátora!

Ezek után tegyük fel a kérdést, hogy hogyan adjuk meg a helyoperátort? Világos, hogy mivel $|\Psi|^2$ a térbeli valószínűsége-sűrűség, így

$$\langle x \rangle = \int dx x |\Psi(x)|^2 = \int dx \Psi^*(x) x \Psi(x) = \int dx \Psi^*(x) (\hat{x} \Psi)(x), \quad (211)$$

ahol folytatjuk a kicsit pongyola fizikus-jelölést, hogy x a hely, mint fizikai mennyiség értéke, és \hat{x} pedig a helyoperátor. Ebből világosan látszik, hogy a helyoperátor nem más, mint az „ x -szel szorzás”, azaz

$$\hat{x} : \Psi \rightarrow \text{id}_{\mathbb{M}} \cdot \Psi. \quad (212)$$

és természetesen ez is vektor-jellegű operátor, hiszen \mathbb{M} egy vektortér. Mik a helyoperátor sajátállapotai, azaz milyen állapotra igaz, hogy létezik olyan x_0 , amelyre $x\Psi(x) = x_0\Psi(x)$ minden x -re? Ez a $\delta(x - x_0)$ állapot lesz, amely ugyan nem függvény, de a disztribúciók terében már értelmezhető. Az időre is kiterjeszthetjük a fentieket, ekkor az időoperátor a t -vel való szorzás lesz.

Vegyük észre, hogy általában a hely- és az impulzusoperátor komponensei egymás között felcserélhetőek, azaz $\hat{x}\hat{y} = \hat{y}\hat{x}$ és $\hat{p}_x\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{p}_x$, ugyanakkor egymással nem: $\hat{x}\hat{p}_x \neq \hat{p}_x\hat{x}$. Konkrétan

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \text{id}_{\mathcal{H}}, \quad (213)$$

kanonikus kommutációs reláció adódik, amely tulajdonképpen megfelel a Heisenberg-féle határozatlansági relációnak. Természetesen az időre és az energiára is ugyanilyen határozatlansági reláció vonatkozik majd, amely szemléletesen azt jelenti, hogy E energiát t ideig „kölcsonözhetünk”, ha $Et = \hbar/2$.

Érdeemes megemlíteni, hogy valójában a kvantummechanika eggyel korrektebb (matematikailag konzisztensebb) leírása érhető el, ha Borel-halmazokból, σ -véges mértékterekből, és az ezekkel alkotott projektormértékekből indulunk ki, ez azonban túlmutat jelen jegyzeten, sőt, talán az egész fizikus-oktatáson – érdeklődőknek Matolcsi Tamás speciális előadása illetve jegyzete ajánlható figyelmébe.

Gyakorló feladat

Vegyük az $\hat{x} : \Psi \rightarrow \text{id}_{\mathbb{M}} \cdot \Psi$ és $\hat{p} : \Psi \rightarrow -i\hbar\nabla\Psi$ operátorokat. Tetszőleges Ψ állapotra vett hatásuk alapján közvetlenül határozzuk meg kommutátorukat, azaz igazoljuk a $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \text{id}_{\mathcal{H}}$ relációt.

6.3. A Schrödinger-egyenlet

Ha egy részecske egy adott, helyfüggő $V(x)$ potenciális energia által kialakított térben (pl. gravitációs vagy elektromos helyzeti energia) vesz fel egy statikus állapotot, akkor $E = E_{\text{kin}} + V(x)$. Tekintsünk az energiára és az impulzusra, mint operátorokra, ekkor

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = \hat{E}\Psi(x). \quad (214)$$

Ha a részecske energia-sajátállapotban van, akkor $\hat{H}\Psi = E\Psi$, és az így felírt $\hat{H} = \hat{E}$ operátort Hamilton-operátornak nevezzük, amely a rendszer teljes energiájának felel meg. Ezt figyelembe véve megkapjuk a **Schrödinger egyenletet**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (215)$$

Itt tehát $V(x)$ a részecske mozgását befolyásoló potenciál avagy energia. Potenciál nélkül a a hullámeqyenletet kapjuk, és ebből $\Psi(x)$ -re síkhullám alak adódik. Időfüggő potenciál vagy nem statikus viselkedés esetén $\hat{E} = i\hbar\partial_t$, tehát

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, t)\right)\Psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) \quad (216)$$

de hogy az időfüggést mely ponton engedjük meg, az már a kvantummechanikai képünk függvénye – Heisenberg-képben avagy Heisenberg-reprezentációban csak az operátoroknak van időfüggése, az állapotoknak nincs, míg Schrödinger-képben az operátorok időfüggetlenek és az állapotoknak van időfüggése. Van egy harmadik, kölcsönhatási- avagy Dirac-kép is, ezekről azonban később, a kvantummechanika kurzuson tanulunk majd. Amennyiben a hullámfüggvény időfejlődésére vagyunk kíváncsiak, akkor az $i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi$ egyenletből

$$\Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(0) \quad (217)$$

adódik, és ez írja le az időfejlődést. Érdeemes észrevenni, hogy itt \hat{U} unitér operátor, másrészt hogy nem korlátos energia esetén matematikailag kicsit jobban oda kellhet figyelni, azonban számunkra többnyire megfelelő a fenti, egyszerűsített kezelésmód.

Érdeemes ugyanakkor feltenni a kérdést, hogy a Schrödinger-egyenlet által leírt folytonos időfejlődés mellett miként értelmezhető a nem folytonos hullámfüggvény-összeomlás, és pontosan mi számít mérésnek. Ez a téma jelenleg is aktívan kutatott, ugyanakkor (sajnos?) nem feltétlenül a „mainstream” részecskefizika része, még ha olyan elmék is foglalkoznak vele, mint 't Hooft vagy éppen Penrose.

További kiegészítésként megemlíthető, hogy Feynman a Huygens-elv (azaz hogy az új hullámfüggvény az előzőből megkapható, „a hullámfront minden pontja elemi hullámok kiindulópontja”) alapján ezt írta fel:

$$\Psi(x, t_2) = \int G(x, y)\Psi(y, t_1)dy, \quad \text{ha } t_2 > t_1, \quad (218)$$

majd az ebben szereplő $G(x, y)$ függvénybe (kernelbe) Dirac ötlete alapján az $S = \int \mathcal{L}$ hatásból kapott $\exp(iS/\hbar)$ kifejezést helyettesítve vezette le a Schrödinger-egyenletet. Ennek részleteit lásd pl. D. Derbes Am. J. Phys. **64** (7), 881 (1996) cikkében.

6.4. A harmonikus oszcillátor

Vegyünk most egy

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (219)$$

időfüggetlen Hamilton-operátorral (avagy energia-operátorral) rendelkező harmonikus oszcillátort. Itt nem vezetjük le, de a Schrödinger-egyenlet megoldásai a

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad (220)$$

ahol n egész szám, a $H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \partial^n e^{-y^2}$ függvények pedig a Hermite-polinomok. Az ezen állapotokhoz tartozó energiaszintek értékei

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (221)$$

lesznek. Definiáljuk ezek után a

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p} \quad (222)$$

kanonikus változókat. Ezekkel

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2\right) \quad (223)$$

módon írható fel a Hamilton-operátor. Vezessük be ezután az

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{X} + i\hat{P}\right) \quad (224)$$

operátort, amelynek adjungáltja

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}) \quad (225)$$

lesz, amely az skalárszorzat definíciója alapján parciális integrálással belátható. Ezen operátorok fontos tulajdonsága, hogy

$$\hat{a}\Psi_n = \sqrt{n}\Psi_{n-1}, \quad (226)$$

$$\hat{a}^\dagger\Psi_n = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}, \quad (227)$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi_n = n\Psi_n, \quad (228)$$

azaz $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ egyfajta szám-operátor, amely megadja az energiaszint sorszámát. Ezekkel az a és \hat{a}^\dagger léptető operátorokkal a Hamilton-operátorra (az id identitásoperátor bevezetve)

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\text{id}_{\mathcal{H}}}{2} \right), \quad (229)$$

adódik, ugyanis $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\text{id}_{\mathcal{H}}$ miatt $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \text{id}_{\mathcal{H}}$ is igaz. Innen az is látszik, hogy $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ valójában az energiaszint nagyságát is megadja, $\hbar\omega$ egységekben, a $\hbar\omega/2$ zérusponti energiától eltekintve. A fenti operátorok azért is lényegesek, mert sok fizikai probléma kezeléséhez elég ezeket és kommutációs relációikat felhasználni, a Schrödinger-egyenlet vizsgálata nélkül.

6.5. A valószínűségi áram

Figyeljük meg, hogy mi adódik, ha a 216. Schrödinger-egyenletet megszorozzuk a Ψ^* állapottal, illetve az egyenlet komplex-konjugáltját Ψ -vel, majd a két egyenlet különbségét vesszük. Ekkor az időderiváltakból ez lesz:

$$i\hbar \left(\Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} + \Psi(x,t) \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial t} \right) = i\hbar \frac{\partial |\Psi(x,t)|^2}{\partial t} = i\hbar \partial_t P(x,t), \quad (230)$$

ami tulajdonképpen a valószínűségrővidék időderiváltja. A Schrödinger-egyenlet másik oldala esetében a potenciállal arányos tagok kiesnek, és az alábbi marad:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = i\hbar \nabla j_P, \quad (231)$$

ahol bevezettük a $j_P = i\hbar(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)/(2m)$ valószínűségi áramot, amelyre a fentiek alapján

$$\partial_t P + \nabla j_P = 0 \quad (232)$$

kontinuitási egyenlet adódik, ami azt jelenti, hogy a valószínűség lokálisan megmarad, ami az időfejlődés unitér voltával függ össze. Síkhullám esetében j_P időfüggetlen, stacionárius, és mivel $\nabla \Psi = ik\Psi$, így

$$j_P = \frac{i\hbar}{2m} (-ik - ik)|\Psi|^2 = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v, \quad (233)$$

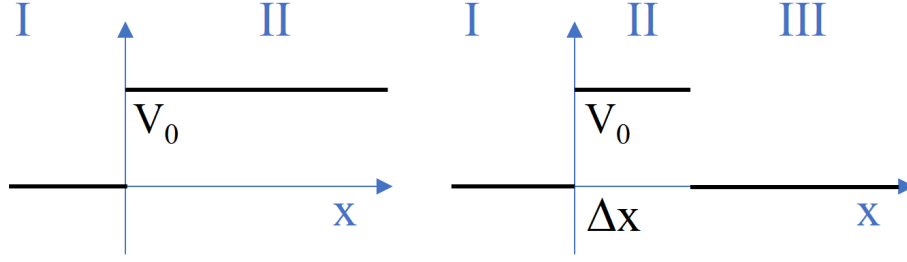
azaz ilyenkor ez a részecske sebességével egyezik meg.

6.6. A Schrödinger-egyenlet alkalmazásai

A valószínűségi áramot, illetve a hullámfüggvény alakulását érdemes megvizsgálnunk különféle, szakadással rendelkező potenciálok esetén (illusztrációnak lásd a 26. ábrát). Ilyenkor Ψ és $\nabla \Psi$ sem szakad a határon, csak $\Delta \Psi$. Ezt úgy láthatjuk be, ha felírjuk a Schrödinger-egyenletet, a „határt” tartalmazó $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ intervallumra integrálva:

$$i\hbar \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} V(x) \Psi(x), \quad (234)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right]_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} + V_I \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0} \Psi(x) + V_{II} \int_{x_0}^{x_0 + \epsilon} \Psi(x). \quad (235)$$



26. ábra. Részecske áthaladása különféle helyfüggő potenciálokon.

Vegyük észre, hogy ha Ψ korlátos függvény, akkor az $\epsilon \rightarrow 0$ határesetben az így adódó infinitezimális intervallumra vett integrálja nulla, amiből ez adódik:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \Big|_{x_0 - \epsilon} - \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \Big|_{x_0 + \epsilon} \right] = 0, \quad (236)$$

azaz Ψ deriváltja folytonos a határon. Egyúttal itt említjük meg azt is, hogy ez a levezetés megmutatja, hogy valóban jogos a Schrödinger-egyenletben egy $V(x)$ potenciállal való szorzást szerepeltetnünk – ha $V(x)$ -et lépcsős függvényként képzeljük el, akkor minden lépcsőnél a Ψ második deriváltjának lesz szakadása, Ψ és az első deriváltja folytonos marad.

Legyen most tehát egy V_0 potenciállépcső, és egy E energiájú részecske. A teljes energia, illetve a hozzá kapcsolódó ω nem változik meg, viszont k igen:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (237)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_0 \quad \Rightarrow \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}, \quad (238)$$

ha a részecske energiájára igaz az $E > V_0$ feltétel. Ekkor a 26. ábra bal oldalának I. régiójában az alap, $Ae^{ikx - i\omega t}$ bejövő hullámon kívül lesz egy visszaverődő, $Be^{ikx - i\omega t}$ hullám is, a II. régióban pedig egy $Ce^{ik'x - i\omega t}$ hullám (mivel itt a balra haladó a végtelenből jönne, ez nem fizikai):

$$\Psi_{\text{I}} \propto Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (239)$$

$$\Psi_{\text{II}} \propto Ce^{-ik'x} \quad (240)$$

Az $x = 0$ pontban vett folytonosság megköveteli, hogy $A + B = C$. A derivált folytonossága ezen kívül azt is megköveteli, hogy $ikA - ikB = ik'C$ legyen. Így összességében $C = 2kA/(k + k')$ és $B = A(k - k')/(k + k')$ adódik. Az áthaladás valószínűségi árama $j_{\text{át}} = |C|^2 \hbar k'/m$, míg a visszaverődésé $j_{\text{vissza}} = -|B|^2 \hbar k/m$. Ezeket az alábbiaknak megfelelően kapjuk meg:

$$j_{\text{át}} = \frac{\hbar k'}{m} |C|^2 = \frac{\hbar k'}{m} \frac{4k^2}{(k + k')^2} |A|^2, \quad (241)$$

$$j_{\text{vissza}} = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2 = -\frac{\hbar k}{m} \frac{(k - k')^2}{(k + k')^2} |A|^2, \quad (242)$$

illetve az r reflexióra és a t transzmisszióra a $j_{\text{be}} = |A|^2 \hbar k/m$ áram alapján

$$r = \frac{|j_{\text{vissza}}|}{j_{\text{be}}} = \frac{(k - k')^2}{(k + k')^2}, \quad (243)$$

$$t = \frac{j_{\text{át}}}{j_{\text{be}}} = \frac{4kk'}{(k + k')^2}, \quad (244)$$

és természetesen $r + t = 1$. A klasszikus képben természetesen $r = 0$ és $t = 1$, az ettől való eltérés a kvantummechanika következménye.

Legyen most $E < V_0$. Ekkor $k' = i\kappa$ bevezetésével $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, és ekkor $\exp \kappa x$ és $\exp -\kappa x$ megoldások lehetségesek, amelyből az első „nem fizikai”, hiszen ez korlát nélkül erősödő amplitúdót adna:

$$\Psi_{\text{I}} \propto Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}, \quad (245)$$

$$\Psi_{\text{II}} \propto Ce^{-\kappa x} \quad (246)$$

$$(247)$$

Mivel az átjutó (II.) hullám tisztán valós, így $j_{\text{át}} = 0$ és $t = 0$, és hasonlóan $r = 1$. Ugyanakkor a részecske nem nulla valószínűséggel megtalálható a klasszikusan tiltott régióban is, méghozzá x mélységben $\exp -2\kappa x$ valószínűséggel (ahol a kettes a valószínűséghez szükséges négyzetből jön). A behatolás Δx mélysége legyen úgy definiálva, hogy itt $1/e$ a megtalálási valószínűsége sűrűség, ekkor $\Delta x = 1/2\kappa = \hbar/\sqrt{8m(V_0 - E)}$. Ez tulajdonképpen a határozatlansági relációnak felel meg, ugyanis a részecske „kölcsonveszt” $\hbar\kappa$ impulzust, amelyet viszont csak $1/2\kappa$ távolságon tud megtartani, a kettő szorzata a Heisenberg-féle relációnak megfelelően $\hbar/2$.

Nézzük meg, mi történik egy szintén V_0 magasságú, de ezúttal csak Δx széles potenciálgáton való áthaladáskor, ahogy az a 26. ábra jobb oldalán látható. Legyen $E < V_0$. Ekkor három hullámfüggvényünk lesz a három régióban:

$$\Psi_{\text{I}} \propto Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}, \quad (248)$$

$$\Psi_{\text{II}} \propto Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad (249)$$

$$\Psi_{\text{III}} \propto Ee^{i\kappa x} + Fe^{-i\kappa x}, \quad (250)$$

$$(251)$$

ahol lehangytuk az időfüggést, illetve az energiamegmaradás miatt az elején és a végén azonos a hullámszám, és $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ és $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ismét. Mivel jobbról a végtelenből nem jön részecske, ezért $F = 0$, a többi együtthatót a két határon adódó két-két határfeltételből kaphatjuk meg (ami négy egyenlet, tehát minden együtthatót meg tudunk határozni). A végeredmény érdekes most csak számunkra, méghozzá $\kappa\Delta x \gg 1$ határesetben:

$$t = \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa\Delta x} \quad (252)$$

tehát véges valószínűséggel a potenciálgáton is áthalad a részecske, és az áthaladás a potenciálgát Δx szélességével exponenciálisan csökken. Vegyük észre itt is a határozatlansági reláció megjelenését: a részecske egy kis időre „kölcsonveszt” valamennyi energiát, és az idő és az energia szorzata itt is \hbar nagyságrendű.

A pásztázó alagútmikroszkóp (STM, Binnig és Rohrer, Nobel-díj 1986) elvét is megérthetjük ezen keresztül. Fémekben ugyanis egy potenciálgödörben vannak az elektronok, avagy az egyik oldalon egy potenciál-lépcsővel néznek szembe, és csak az ennek megfelelő kilépési munka befektetése árán léptethetjük ki őket onnan. Ha azonban a fém egyik oldalán egy $V \propto x$ potenciált építünk ki (azaz konstans elektromos teret), akkor az tulajdonképpen potenciálgátat hoz létre, és emiatt az elektronok mégis nem nulla valószínűséggel ki fognak lépni a fémből (ezt nevezzük téremisszióknak). Mivel azonban a kilépő elektronok áramát $e^{-2\kappa\Delta x}$ határozza meg, így ez a rögzített síkban mozgó tú alatti anyag szerkezetét árulja el nekünk.

Legyen most egy Δx szélességű, V_0 mélységű potenciálgödör, amelyben egy $-V_0 < E < 0$ kötött részecske van jelen. Mivel negatív az energiája, így a gödrön kívül mindenhol tisztán valós, $\exp -\kappa x$ jellegű amplitúdóval rendelkezik, és ennek árama nulla – azaz mindkét falon teljes visszaverődés alakul ki. Emiatt bent a gödörben időben állandó valószínűséggel van a részecske. A gödör két szélén vett határfeltételek megadják a hullámfüggvények relatív erősségét, ugyanakkor itt azt kell megkövetelnünk, hogy a falakról visszaverődő hullámok konstruktív interferenciát alakítsanak ki. Ebből végeredményben kvantált energiájú, diszkrét spektrum alakul ki. Ha végtelen magas falú potenciálgödör van, és benne egy E energiájú részecske, akkor is hasonló eredményre jutunk.

Gyakorló feladat

Legyen egy $m = 500 \text{ keV}/c^2$ tömegű részecskénk, amelynek energiája 400 eV . Érkezzen ez egy 800 eV nagyságú, 10 pm széles potenciálgáthoz. Mekkora a részecske átjutásának (az alagúteffektus megvalósulásának) valószínűsége?

6.7. Az időfüggetlen perturbációs számítás

Az ezekből adódó korrekciót az időfüggetlen perturbációs számítás segítségével határozzuk meg. Adjunk hozzá a Hamilton-operátorhoz egy λ -val szorzott operátort:

$$H = H^{(0)} + \lambda V. \quad (253)$$

Legyenek az eredeti Hamilton-operátor sajátállapotai $\Psi_n^{(0)}$ állapotok, $E_n^{(0)}$ sajátértékekkel (avagy legyen $\{E_n^{(0)}, n \in \mathbb{N}\}$ a spektruma). Ekkor az új Hamilton-operátor spektrumát és sajátállapotait fejtsük sorba λ szerint:

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots, \quad (254)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots. \quad (255)$$

Ezzel a sajátérték egyenlet így alakul:

$$(H^{(0)} + \lambda V)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \dots) \quad (256)$$

amely $\lambda \ll 1$ esetén így egyszerűsíthető (csak a maximum elsőrendű tagokat megtartva, és észrevéve, hogy a nulladrendűek kiesnek):

$$H^{(0)}\Psi_n^{(1)} + V\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)}. \quad (257)$$

Skalárzorozzuk most ezt az egyenletet balról a $\Psi_n^{(0)}$ állapottal:

$$\langle \Psi_n^{(0)}, H^{(0)}\Psi_n^{(1)} \rangle + \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)}\langle \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)}\langle \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (258)$$

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)} \rangle = \langle V \rangle_{\Psi_n^{(0)}} = \langle V \rangle_n \quad (259)$$

. A későbbiekben a λ paramétert egyszerűen beledefiniálhatjuk a perturbáló operátorba és az energiaszintek eltolódásába is, így egyszerűen $\Delta E_n = \langle V \rangle_n$ lesz az energiaperturbáció.

7. Perdület és sajátperdület a kvantummechanikában

Idézzük fel az Einstein–de Haas-kísérlet és a Stern–Gerlach-kísérlet eredményeit. Ezekben több érdekes dolgot tapasztaltunk:

- A mágneses momentum adott irányú vetülete kvantált.
- A μ mágneses momentum az L perdülettel van kapcsolatban, tehát a perdület is kvantált.
- A klasszikusan adódó $\mu - L$ kapcsolat $\mu = geL/2m$ összefüggésre módosul, ahol g a leíró giro-mágneses faktor, amelynek értéke klasszikusan 1, a valóságban ettől eltérő értékeket mérünk, 1 és 2 közötti értékeket.
- Egyes atomok esetén a perdület páros számú lehetséges vetülete jelenik meg, ami a $-l, \dots, l$ sémába nem illik bele.

A perdület és a sajátperdület kvantummechanikai értelmezése segítségével az alábbiakban megérthetjük ezeket.

7.1. A pályaperdület kvantálása

A Stern–Gerlach-kísérlet alapján az atomok mágneses momentuma tehát kvantált, az Einstein–de Haas-kísérlet eredményei alapján pedig ez a perdület kvantáltságát is jelenti. Érdekes továbbá, hogy az atomok perdületének valamely másik irányba vett vetületét is vizsgálhatjuk egy következő Stern–Gerlach-kísérlettel. Ennél a megismételt felbontásnál az a fontos, hogy a két mágnes közötti átmenet az atom belső elektromágneses válaszához képest legyen gyors, ami megvalósítható. Ha egy y , majd egy x irányú felbontás után megint egy y irányú felbontást vizsgálunk (mindig csak az egyik komponenszt továbbengedve), akkor megint felbomlik a nyaláb, ez mutatva, hogy nem szelekció történik, hanem megváltozik az atomok állapota a „mérés” során. Hogyan érthetjük ezt meg a kvantummechanika alapján? Természetesen úgy, hogy a perdület is egy fizikai mennyiség, és így az operátorát kell vizsgálni, és ennek (illetve komponenseinek) diszkrét lehetséges sajátértékei vannak! A **pályaperdület** definíciója klasszikusan $L = r \times p$, így operátorosan is

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar \hat{r} \times \nabla \quad (260)$$

lesz, és ez szintén vektor-operátor, amely a perdületértékek vektorterének és az állapottérnek a tenzorszorzat-terébe képez (valójában a modern elméleti fizikában a klasszikus perdület is a tér és az impulzustér külső szorzatában veszi fel értékeit, de ez túlmutat jelen jegyzeten és kurzuson).

Ha bevezetünk egy (x, y, z) bázist, akkor a perdületoperátor komponenseit

$$\hat{L}_x = \hat{r}_y \hat{p}_z - \hat{r}_z \hat{p}_y = i\hbar(z\partial_y - y\partial_z), \quad (261)$$

$$\hat{L}_y = \hat{r}_z \hat{p}_x - \hat{r}_x \hat{p}_z = i\hbar(x\partial_z - z\partial_x), \quad (262)$$

$$\hat{L}_z = \hat{r}_x \hat{p}_y - \hat{r}_y \hat{p}_x = i\hbar(y\partial_x - x\partial_y) \quad (263)$$

módon írhatjuk fel. Ezekre az $[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}id_{\mathcal{H}}$ kanonikus kommutációs relációk segítségével egyszerűen belátható, hogy

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad (264)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad (265)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y, \quad (266)$$

vagy általánosan (a triviális önkommütálást is leírva):

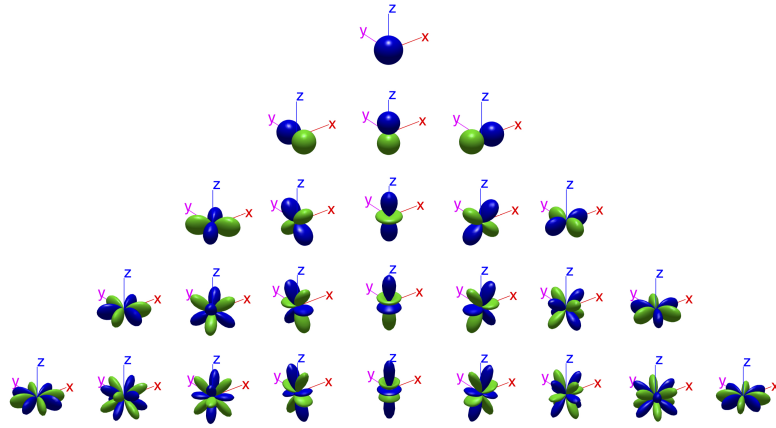
$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \quad (267)$$

ahol ϵ_{jkl} Levi-Civita-szimbólum⁴. Ezek a vetületek mind olyan sajátállapotokkal rendelkeznek, amelyeket egész kvantumszámokkal (pl. l_z) lehet jellemezni, és a kapcsolódó sajátérték mindig $\hbar l_z$ – a perdület vetülete tehát mindig \hbar egész számú többszöröse. Érdekességképpen megemlíthető, hogy mivel ez éppen a vektoriális szorzatban is használatos, így a fenti egyenlet ekvivalens az $\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$ kifejezéssel. Ez tehát azt jelenti, hogy a kísérleteknek megfelelően akárcsak két vetületet sem lehet *egyszerre* pontosan meghatározni, a nem-kommutálásból adódó határozatlansági reláció miatt – itt azonban korántsem olyan triviális a helyzet, mint \hat{r} és \hat{p} esetén, lásd például Dammeier és mtsai New J. Phys. **17** (2015) 093046 cikkét. Később az is kiderül, hogy valójában az adott irányú perdület az adott irány körüli forgatások generátora, és ilyen értelemben az \hat{L}_{xyz} operátorok SO(3) illetve SU(2) generátorai, de ez is túlmutat jelen jegyzeten. Azt viszont érdemes megemlíteni, hogy a generátorok négyzetösszege az algebra Casimir-eleme (Casimir-operátor), amely mindenkivel kommutál, ez itt a $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ operátor lesz. Ez bármely perdület-vetülettel együtt mérhető tehát, és így egyszerre meghatározható a perdület nagysága és adott irányú vetülete.

A kinetikus energia operátora gömbi koordinátákban felírva

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (268)$$

⁴Itt kivételesen két kiskötőjel van, ugyanis egyetlen ember, Tulio Levi-Civita után kapta a nevét.



27. ábra. Az ábrán gömbfüggvények egy kontúrfelülete látható (l föntről lefelé haladva 0,1,2,3,4 értékeket vesz fel, míg m balról jobbra, és középen $m = 0$).

módon adódik, és ez szétválasztható perdületre és radiális impulzusra

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}, \text{ ahol } L^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (269)$$

Ez gömbi koordinátákban felírható potenciálok esetén nagy hasznunkra válik, ugyanis a perdület-operátor sajátállapotai a gömbfüggvények, amelyek $l \geq 0$ és $|m| \leq l$ egész számokkal indexelhetőek:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (270)$$

ahol P_{lm} a Legendre-polinomok. Ha a potenciál csak a távolságtól függ (azaz a szögektől nem), akkor a fenti kifejezés az energiasajátállapotok szögfüggő részét is megadja. Ezen állapotokhoz tartozó perdület-sajátértékek az

$$L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}, \quad L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad (271)$$

egyenleteknek megfelelően adódnak.

Az \hat{L}^2 operátor sajátállapotait tehát $l \geq 0$ egész számokkal indexelhetjük, a sajátértékek ekkor $\hbar^2 l(l+1)$ értékeket vesznek fel. Az állapotokat az ezen két operátor szerinti sajátértékekkel szoktuk jellemezni, tetszőleges irányt kijelölve (és a konvenció szerint ezt z -vel jelölve) l_z (avagy m) és l értékeivel, és fontos, hogy $|l_z| \leq l$. Minderre később, a hidrogénatom tárgyalásakor visszatérünk, ahol azt is látni fogjuk, hogy bár a Stern–Gerlach-jellegű kísérletekben csak a perdület vetületeit mérhetjük, a hidrogénatom spektruma a perdület nagyságáról is árulkodik majd.

7.2. A perdület és a forgatások kapcsolata

Emlékezzünk vissza a 6.2 fejezetre, ahol a (210) egyenletben megmutattuk, hogy az impulzusoperátor az eltolások generátora. Vizsgáljuk meg most hasonló módon a $\mathbb{M} = \mathbb{R}^3$ térbeli forgatásokat. Jelölje $R(\vec{\theta})$ a $\vec{\theta}$ tengely körüli $\theta = |\vec{\theta}|$ szögű forgatást (egyezményesen a jobbkéz-szabálynak megfelelően). Ekkor könnyű belátni, hogy $R^T(\vec{\theta})R(\vec{\theta}) = 1$ és $\det R(\vec{\theta}) = 1$. Ez definiálja (háromdimenziós térben) az $SO(3)$ forgáscsoportot. Vegyük itt észre, hogy egy infinitezimális $\vec{\epsilon} = (0, 0, \epsilon)$ forgatásra a forgásmátrix alakját figyelembe véve (és $\cos \epsilon$ és $\sin \epsilon$ határértékét véve)

$$R(\vec{\epsilon}) = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \text{id}_{\mathbb{M}} + \epsilon \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \text{id}_{\mathbb{M}} - \epsilon \frac{i}{\hbar} J_z = e^{-\epsilon \frac{i}{\hbar} J_z} \quad (272)$$

adódik. Az x és y tengelyek körüli forgatások esetére is hasonló adódik, a $J_{x,y,z}$ mátrixok pedig

$$J_x = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (273)$$

módon írhatóak fel. Ezek után észrevehetjük, hogy véges forgatásokra

$$R(\vec{\theta}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta} \cdot \vec{J}\right), \quad (274)$$

ahol J_k antiszimmetrikus mátrixok az $SO(3)$ csoport generátorai. Az antiszimmetrikusság közvetlenül az $R^T(\theta) = R^{-1}(\theta) = R(-\theta)$ tulajdonságból adódik, hiszen emiatt $\exp(\theta_k J_k^T) = \exp(-\theta_k J_k)$, és így az J_k mátrixok az antiszimmetrikus mátrixok terének egy bázisát is megadják. Hogy így valóban az $SO(3)$ csoport elemeit kapjuk meg, (azaz a fenti exponenciálisok szorzata továbbra is hasonló exponenciálisként írható fel) az azért is lehetséges, mert valójában az $\exp A \exp B$ jellegű szorzatban az $[A, B]$, $[A, [A, B]]$ stb kommutátorok jelennek meg, azonban a fenti J_k mátrixokra éppen a (267) jellegű egyenlet lesz érvényes, azaz $[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} \hat{J}_l$.

Jelölje ezek után $\mathcal{R}(\vec{\theta})$ azt a hullámfüggvényekre ható operátort, amelyre

$$(\mathcal{R}(\vec{\theta})\Psi)(\vec{r}) = \Psi(R(\vec{\theta})\vec{r}), \text{ azaz} \quad (275)$$

$$\mathcal{R}(\vec{\theta})\Psi = \Psi \circ R(\vec{\theta}). \quad (276)$$

Mivel infinitezimális $\vec{\epsilon} = (0, 0, \epsilon)$ körüli forgatásra

$$R(\vec{\epsilon})\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + \epsilon y \\ y - \epsilon x \\ z \end{pmatrix}, \quad (277)$$

így

$$(\mathcal{R}(\vec{\epsilon})\Psi)(\vec{r}) = \Psi \begin{pmatrix} x + \epsilon y \\ y - \epsilon x \\ z \end{pmatrix} = \Psi(\vec{r}) + \epsilon y \partial_x \Psi(\vec{r}) - \epsilon x \partial_y \Psi(\vec{r}) = \left(\Psi - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{L}_z \Psi\right)(\vec{r}), \quad (278)$$

ahol éppen a korábban definiált $\hat{L}_z = i\hbar(y\partial_x - x\partial_y)$ perdületoperátor jelenik meg! Ebből véges szöggel történő forgatásokra is igaz lesz, hogy

$$\mathcal{R}(\vec{\theta})\Psi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta} \cdot \hat{L}\right), \quad (279)$$

tehát az $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ perdületoperátor a forgatások generátora!

7.3. A spin és a giromágneses faktor

Ahogy a fejezet bevezetőjében láttuk, a mágneses momentum értéke nem teljesen felel meg a $\mu = eL/2m$ klasszikus relációnak, helyette adott irányú vetületre $\mu = geL/2m$ vezetendő be. Érdemes definiálni a Bohr-magnetont is: $\mu_B = e\hbar/2m$, és ezzel, $L_z = \hbar l_z$ perdület-vetület esetén $\mu_z = g\mu_B l_z$ mágnesesmomentum-vetület adódik. Kiderül, hogy g értéke azért különbözik egytől, mert az atomi elektron mágneses momentuma csak részben származik az L -l leírt pályaperdületből. Ezen túl az elektronnak van egyfajta belső perdülete, amelyet **sajátperdületnek**, **spinnek** neveztek el, amely szintén hozzájárul a teljes perdülethez és így a mágneses momentumhoz is.

A spin a pályaperdülethez hasonló tulajdonság, kvantummechanikailag is részben hasonlóan kezelendő. Erre a következőkben még visszatérünk, de addig is, néhány egyszerű tulajdonságát figyelembe vehetjük. Ugyanúgy igaz rá, hogy a négyzete és egy vetülete egyszerre mérhető, és előbbi $S^2 = \hbar^2 s(s+1)$ értéket vesz fel, ahol elektronnak mindig $s = 1/2$. A spin vetülete $S_z = \pm \hbar/2$ lehet, azaz a kapcsolódó sajátérték $s_z = \pm 1/2$. A spinhez tartozó mágneses momentumról azonban kiderül, hogy $\mu = e\hbar/m$ a nagysága (vegyük észre a kettős faktor hiányát!), illetve a

Bohr-magnetonnal és a spinre vonatkozó g_s giromágneses faktorról kifejezve $\mu = g_s \mu_B s$, azaz $g_s = 2$. Ezt klasszikusan lehetetlen megmagyarázni (lehetséges különböző töltés- és tömegeloszlású gömböt felíró félklasszikus számolással próbálkozni, de lényegében sikertelenül).

A Stern-Gerlach kísérletben mért teljes mágneses momentum és a $J = L + S$ teljes perdület közötti kapcsolat (a z -vetületben)

$$\mu_z = (g_l l_z + g_s s_z) \mu_B = g_j j_z \mu_B \quad (280)$$

módon írható fel, és noha $g_s = 2$ és $g_l = 1$, az elektron teljes g giromágneses faktora a kettőből az adott állapottól függő módon adódik, és sokféle értékeket felvehet. Kiderül, hogy egyrészt a három spinoperátor (J, L, S) kommutál egymással, illetve hogy a teljes perdület négyzete is hasonlóan $\hbar^2 j(j+1)$ sajátértékekkel rendelkezik, illetve atomi ($e/m = 1$) egységekben

$$\mu J = g_j J^2, \text{ és } \mu J = (g_s S + g_l L) J \quad (281)$$

adódik, és mivel J^2 -hez $j(j+1)$ sajátérték tartozik, így az $L = J - S$ illetve $S = J - L$ összefüggésekből $JS = (J^2 + S^2 - L^2)/2$ és $JL = (J^2 + L^2 - S^2)/2$ jön ki. Ezek sajátértékeiből így a teljes perdületre erre vonatkozó g_j faktor (amelyet Landé-féle g -faktornak is szokás hívni) megadható:

$$\begin{aligned} g_j &= g_l \frac{j(j+1) - s(s+1) + l(l+1)}{2j(j+1)} + g_s \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \\ &= \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \end{aligned} \quad (282)$$

ahol az utolsó egyenlőséghez felhasználtuk, hogy $g_l = 1$ és $g_s = 2$. Érdekes észrevenni, hogy noha a teljes mágneses momentum, mint vektoroperátor, nem J irányába mutat, de a várható értéke már igen (ahogy az később a Wigner–Eckart-tétel segítségével bebizonyítható), és így valóban használható a $\mu = g_j J$ összefüggés – amennyiben a várható értékekre értjük.

A különféle perdületekre tehát az

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \text{ ahol } s = 1/2, \quad (283)$$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \text{ ahol } l \geq 0 (\text{egész}) \quad (284)$$

$$J = \hbar \sqrt{j(j+1)}, \text{ ahol } j \geq 0 (\text{egész}) \text{ és } |l - s| \leq j \leq l + s \quad (285)$$

összefüggések lesznek érvényesek, míg (tetszőleges, itt z -irányú) vetületekre

$$S_z = \hbar s_z, \text{ ahol } s_z = \pm 1/2, \quad (286)$$

$$L_z = \hbar l_z, \text{ ahol } |l_z| \leq l \quad (287)$$

$$J_z = \hbar j_z, \text{ ahol } |j_z| \leq j, \quad (288)$$

ahol fennáll a $j_z = l_z + s_z$ összefüggés, illetve néha az $m = l_z$ és $m_j = j_z$ elnevezéseket használjuk. Minden fenti kvantumszám egész lépésekben változhat, és pl $l = 2$ esetén $m = -2, -1, 0, 1, 2$ lehet, j pedig $3/2$ vagy $5/2$ értéket vehet fel. Innen már a Stern–Gerlach-kísérletben észlelt két (vagy páros) részre szakadást is értjük: ilyenkor $j = 1/2$ esetén $j_z = \pm 1/2$, azaz kétféle értéket vehet fel.

Fontos megemlíteni, hogy nem csak az elektronnak, de minden részecskének van spinje, $\hbar/2$ egész számú többszöröse lehet. Ezen belül megkülönböztetünk feles és egész spinű részecskéket, előbbieket fermionnak, utóbbiakat bozonnak hívjuk, és érdekes módon fundamentálisan más tulajdonságaik vannak. Az elektron, proton, neutron, illetve az őket felépítő kvarkok is $1/2$ spinűek, csak a kölcsönhatást közvetítő részecskéknél (foton, gluon) egész a spinje. Az összetett részecskék, atomok, molekulák spinje is fontos, de ez gerjesztéssel változhat. Az alfa részecske spinje 0 , gerjesztett magoké $80\hbar$ is lehet.

Míg korábban láttuk, hogy a perdület $L = r \times p$ módon értelmezhető, addig a spin tárgyalása további matematika bevezetését követeli meg. A következőkben tárgyalt Pauli-egyenlet adja meg majd a spin első leírását, amely a Schrödinger egyenlet Pauli-féle módosítása, feles ($1/2$) spinű részecskék leírására. Később a Dirac-egyenlet, amely a relativisztikus kvantummechanika alap-egyenlete, természetesen tartalmazza a feles spint és a $g = 2$ összefüggést. Ma kísérletileg úgy

tudjuk, hogy $g \approx 2.0023$, és kb. 12 értékes jegyig mérhető. Mérése ma is abszolút aktuális, ugyanis ez az úgynevezett finomszerkezeti állandóhoz kapcsolódik. Kvantumelektrodinamikából extrém pontossággal megkapható a fenti érték, még hozzá a foton-elektron kölcsönhatás perturbációjának vizsgálatából. Általában az **anomális mágneses momentumot** fejezik ki az $a = (g - 2)/2$ kifejezéssel, amely körülbelül $\alpha/2\pi$ nagyságú – ezt a becslést az elektron-foton kölcsönhatás ú.n. egyhurok-korrekciójából lehet megkapni (ebben az elektron és a foton úgy hat kölcsön, hogy először az elektron kibocsát egy fotont, utána kölcsönhat a másik fotonnal majd elnyeli a korábban kibocsátottat). Az a paraméter 2008-as mért értéke $(1159\,652\,180.73 \pm 0.28) \times 10^{-12}$. Számolásból ettől $(2 \pm 7) \times 10^{-12}$ mértékű eltérést lehet találni. A számolás alapja a kvantum-elektrodinamika, az elektromágnesség relativisztikus kvantumtérelmélete, ez tehát a világon a legpontosabban ellenőrzött elmélet.

Végezetül említsük meg, hogy ilyen (anomális) mágneses momentuma van a protonnak is, $g_p = 5.585694713(46)$ g-faktorral. Ez $\mu_p = g_p \mu_N S_p / \hbar$ módon adja meg a proton mágneses momentumát, és itt $\mu_N = e\hbar/2M_p$ a mag-magneton egység, amelyben pedig M_p a proton tömege. Még érdekesebb, hogy a semleges neutronnak is van mágneses momentuma (holott nincs is töltése – de a benne lévő kvarkoknak igen), és g-faktora $g_n = -3.82608545(90)$, tehát egy negatív érték. Ezen mágneses momentumok értéke intenzív kutatások tárgyát képezi ma is, ugyanis a nukleonok összetételével van bonyolult kapcsolatban. Hozzáfűzzük még azt is, hogy magának a proton spinnek sem teljesen világos az eredete, ugyanis a kvarkok és a gluonok együttesen okozzák ezt (lásd pl. Alexandrou és mtsai Phys. Rev. Lett. **119**, 142002 cikkét).

7.4. A spin mint kvantumtulajdonság, a Pauli-egyenlet

Vizsgáljuk meg most, hogyan tudjuk a spint, mint kvantummechanikai fizikai mennyiséget bevezetni és leírni. Legyen a spinnel is rendelkező részecskék állapota a spin Hilbert-terének és a szokásos kvantummechanikai állapottérnek a szorzata, és a spinoperátor hasson a spintéren. Mivel elektronra a spin adott irányú vetületeinek operátora két sajátértékkel kell, hogy rendelkezzen (a $\pm \hbar/2$ értékek egyikével), így kétdimenziós Hilbert-teret elég választani, és a spinoperátorok 2×2 -es önadjungált mátrixok lesznek. Mivel a sajátértékek összege ráadásul nulla, így nulla nyomú mátrixokat kell választanunk, célszerűek lesznek a Pauli-mátrixok ($\hbar/2$ -vel szorozva), azaz

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (289)$$

amelyekre a (267) jellegű kommutációs reláció vonatkozik, a pályaperdülethez hasonlóan:

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} \hat{S}_l \quad (290)$$

Vegyük észre, hogy \hat{S}_x megcseréli a komponenseket, így a $\pm \hbar/2$ sajátértékekhez tartozó sajátvektorai az $(1, 1)$ és $(1, -1)$ vektorok lesznek ($1/\sqrt{2}$ normálástól eltekintve), míg \hat{S}_y sajátvektorai az $(\pm i, 1)$ vektorok, \hat{S}_z sajátvektorai pedig az $(1, 0)$, $(0, 1)$ egységvektorok. Ha valamely \hat{S}_k szerinti sajátállapotban vagyunk, akkor a másik két spinvetület várható értéke nulla. Viszont mindegyik négyzete az egységmátrixszal arányos:

$$\hat{S}_k^2 = \frac{\hbar^2}{4} \text{id}_{\mathbb{M}}, \quad (291)$$

és így (mivel a várható értéke nulla) a szórása $\hbar/2$ – ezért nem lehet két spinvetület egyszerre megmérni, illetve ezért bomlik fel adott irányú Stern-Gerlach-mérés esetén a következő, merőleges irányú mérés eredménye két nyalábra. Vegyük észre végül, hogy

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \text{id}_{\mathbb{M}}, \quad (292)$$

tehát az \hat{S}^2 operátor mindegyik spinoperátorral kommutál, minden állapot a sajátállapota, és degenerált sajátértéke $3\hbar^2/4$, ami az $s(s+1)\hbar^2$ általános kifejezés speciális esete.

A spint is figyelembe vevő hullámfüggvény tehát a (Ψ_+, Ψ_-) . A z -irányú spin esetén jól látható, hogy

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +\Psi_+ \\ -\Psi_- \end{pmatrix}. \quad (293)$$

Ekkor a $(0, \Psi_-)$ állapot a $-\hbar/2$, míg a $(\Psi_+, 0)$ a $+\hbar/2$ sajátértékű sajátállapot. Követeljük meg továbbá a normálási feltételt is, azaz legyen

$$\left| \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} \right|^2 = |\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2 = 1, \quad (294)$$

ahol $|\Psi_{+,-}|^2$ a teljes hullámfüggvény-integrált (normát) jelenti. Vonatkozzon erre a két komponensre egy-egy Schrödinger-egyenlet:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \begin{pmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (295)$$

Mivel ez ugyanaz az egyenlet, ezért a két komponens csak a normálásában tér el, legyen tehát

$$\begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \Psi \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (296)$$

ahol α és β komplex számok, amelyekre a normálási feltétel miatt

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (297)$$

lesz igaz. A spinoperátorok ekkor tehát tényleg csak az α, β komponensekkel leírt vektoron (később: spinoron) hatnak, méghozzá

$$\hat{S}_x \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad \text{azaz } \langle S_x \rangle = \hbar \operatorname{Re}(\alpha^* \beta), \quad (298)$$

$$\hat{S}_y \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = i \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\beta \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad \text{azaz } \langle S_y \rangle = \hbar \operatorname{Im}(\alpha^* \beta), \quad (299)$$

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix}, \quad \text{azaz } \langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) \quad (300)$$

az adott irányú spin várható értéke. Kiegészítésként érdemes észrevenni, hogy az $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ relációt az unitér mátrixok tartják meg, és a fenti Pauli-mátrixok éppen az $SU(2)$ csoportot generálják. Ezzel kapcsolatban csoportelméleti tanulmányok során tudhatunk meg többet, ahogy fentiek korrekt kezeléséhez szükséges Clifford-algebrákról is. (Annyit itt is érdemes megemlíteni, hogy Pauli-mátrixok a nulla nyomú, hermitikus mátrixok bázisát jelentik, amelyek egy háromdimenziós Clifford-algebrát alkotnak, és ez a spin általános leírását adja majd. Érdekes továbbá, hogy ezek az $SU(2)$ komplex mátrixok éppen három valós paraméterrel írhatóak le, hiszen a három Pauli-mátrix egy-egy egyparaméteres valós részcsoportjának szorzatából már az egész csoport adódik. A három paraméter az $SO(3)$ -mal való ekvivalencia tekintetében a három tértengely körüli forgatás három szögét jelenti.)

Amennyiben \vec{B} mágneses tér is jelen van, módosul a fenti egyenlet, ugyanis a mágneses momentum és a mágneses tér szorzata az energiához hozzájárul. A spinből származó mágneses momentum operátorára is

$$\vec{\mu} = g_s \frac{e}{2m} \hat{S} = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S} \quad (301)$$

lesz igaz (ahol \hat{S} is vektort jelöl). Ebből a Schrödinger-egyenlet a $\Psi = (\Psi_+, \Psi_-)^T$ állapotra, csak a potenciál módosításával

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} - g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B} \right) \Psi = E \Psi. \quad (302)$$

alakot ölti, amely csatolja a Ψ_+ és Ψ_- hullámfüggvényeket. Valójában ha a \vec{B} teret egy \vec{A} vektorpotenciál generálja, akkor ez az impulzusoperátort is módosítja, $\hat{p} \rightarrow \hat{p} - e\vec{A}$ módon. Elektromos tér esetén még a Φ skalárpotenciál is megjelenik, ezt $V = e\Phi$ módon a potenciális energia tartalmazza. Ezzel a Pauli-egyenlet:

$$\left(\frac{1}{2m} (\hat{p} - e\vec{A})^2 + e\Phi - g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B} \right) \Psi = E\Psi. \quad (303)$$

Az adott $n = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$ egységvektor irányának megfelelő spin operátora az $n \cdot S$ skalárszorzatnak megfelelően adódik. Konkrétan a Pauli-mátrixokat behelyettesítve

$$S_n = n \cdot S = n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \quad (304)$$

adódik, és ennek azon (α, β) spinorok (és bármely komplex számszorosaik) lesznek a sajátállapotai, amelyekre

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{\sin\theta e^{i\phi}}{\cos\theta \pm 1}. \quad (305)$$

és ebből a $+1/2$ sajátértékű állapot (egyre normálva)

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} & \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \quad (306)$$

Érdeemes észrevenni azt is, hogy ekkor a z irányú spin várható értékére

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos\theta \quad (307)$$

adódik, tehát éppen n és a z irányú egységvektor szorzata adja ezt meg. Fontos még, hogy a sajátállapotban $\theta/2$ szerepel, tehát 2π forgatás után az ellentettjére vált! Ezt Rauch 1976-os kísérletében neutronokkal ellenőrizte, amelyben két ágra bontott egy adott E_0 energiájú bejövő nyalábot. Az alsó ágban nulla mágneses tér mellett adott E/\hbar körfrekvenciával oszcillált a hullámfüggvény két komponense:

$$\Psi(t) \propto \exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right] \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (308)$$

míg a felső ágban a spin miatt egy μ_B/\hbar további körfrekvenciátag megjelent, a spin két komponensében ellenkező előjellel:

$$\Psi(t) \propto \exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right] \begin{pmatrix} \alpha \exp\left[i\frac{\mu_B}{\hbar}t\right] \\ \beta \exp\left[-i\frac{\mu_B}{\hbar}t\right] \end{pmatrix} \quad (309)$$

így a spin tulajdonképpen μ_B/\hbar körfrekvenciával elforgott. Mivel a fentiekben láttuk, hogy a sajátállapotban $\theta/2$ szerepel, így τ mérési idő (a mágneses téren történő áthaladási idő) alatt

$$\frac{1}{2}\phi(\tau) = \frac{1}{2}\phi(0) - \frac{\mu_B}{\hbar}\tau \quad (310)$$

spinfázis-változás jelenik meg. Ha a jobb oldal második tagja éppen π , akkor a fázis az ellentettjére változik, ami azt jelenti, hogy a térbeli ϕ fázisban viszont 2π forgás után következik be az előjelváltás. A mágneses teret változtatva kimérhető, hogy milyen B mágneses tér mellett történik újra erősítés, így az eredeti ϕ fázishoz való visszatérés szöge mérhető. Ez Rauch és mtsai Phys.Lett. **54A** (1975) 425 cikkében 704 ± 38 foknak adódott (ahol a mérési bizonytalanság a mágneses tér méréseiből adódott főleg), ami a 4π értékkel szépen egyezik.

8. A hidrogénatom részletes spektruma

8.1. A hidrogénatom a Schrödinger-egyenlet alapján

A hidrogénatom spektrumának központi szerepe volt a kvantummechanika kidolgozásánál, ugyanis **egyszerű, zárt kétrészecske rendszer**, amelyben csak az elektromágneses kölcsönhatás játszik szerepet, és a kísérleti eredmények is nagy pontosságúak. Bonyolultabb rendszerekben már a magfizika is szerepet játszhat, ahol a kölcsönhatás sokkal kevésbé számolható, főleg nehezen vizsgálható kísérletileg. Ha a mag nem is befolyásolja az állapotokat, a nagyobb atomok esetében a többrészecske-rendszerekkel kell számolni, ami lényegesen nehezebb. Ezek állapotait a hidrogénatom alapján lehet általánosítani.

A legegyszerűbb kvantumelméleti leírást úgy kaphatjuk, ha megpróbáljuk a hidrogénatom elektronjának hullámfüggvényét megadni. Abból indulunk ki, hogy az elektron egy

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r} = -\frac{\alpha \hbar c}{r} \quad (311)$$

potenciálban mozog. Ezzel a **Schrödinger-egyenlet** hidrogén-atomra felírva:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x) - \frac{\alpha \hbar c}{r} \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (312)$$

Ezt kell tehát megoldanunk. Mivel a potenciál csak a radiális koordinátától függ, átírhatjuk a Laplace-operátort gömbi koordinátákba, a (270) perdületoperátornak megfelelően:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Psi(r, \phi, \theta) - \frac{\alpha \hbar c}{r} \Psi(r, \phi, \theta) = E \Psi(r, \phi, \theta) \quad (313)$$

Ezt próbáljuk a $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ szétválaszthatósági feltétellel megoldani. Mivel a szögfüggő része csak a perdületoperátor (a fenti egyenletben a szögek szerinti deriválás) hat, így ennek megoldásai a (269) egyenletben már felírt Y_{lm} gömbfüggvények lesznek, l és $m = -l \dots l$ indexekkel, a potenciáltól függetlenül. A radiális rész ezzel szemben a potenciálon múlik, és kiderül, hogy az általánosított Laguerre-polinomokkal fejezhető ki a megoldás (az R -re vonatkozó differenciálegyenlet átalakítható egy általánosított Laguerre-egyenletté). Végeredményben az $n = 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, 1, \dots, n-1$ és $m = -l, \dots, l$ kvantumszámok indexelik majd a megoldást:

$$\Psi_{nlm}(r, \phi, \theta) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \cdot Y_l^m(\theta, \phi), \quad (314)$$

ahol $\rho = \frac{2r}{na}$ és $a = r_{\text{Bohr}} = \frac{\hbar}{m c \alpha}$.

Ezek a hullámfüggvények adják a hidrogénatom elektronjának lehetséges állapotait, ahogy azt a 28. ábra is illusztrálja. A hullámfüggvény alapján kiszámolhatóak az energiaszintek (energia-sajátértékek) is, és a Bohr-moddal azonosan

$$E_{n,l,m} = E_n = -\frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{mc^2 \alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \quad (315)$$

adódik. Ez azt is jelenti, hogy az energia l és m szerint degenerált: adott n -hez $\sum_l (2l+1) = n^2$ különböző állapot tartozik. Az l szerinti degeneráció konkrétan a Coulomb-kölcsönhatás alakjából adódik, mivel a szögfüggő részre vonatkozó eredmény még elvileg függhetne l -től. Vegyük észre azt is, hogy a fenti állapotok nem csak a Hamilton-operátor sajátállapotai (azaz energia-sajátállapotok E_n sajátértékekkel), de az L^2 perdületoperátornak is, $l(l+1)\hbar^2$ sajátértékkal, illetve az L_z operátornak is, $m\hbar$ sajátértékkal. A későbbiekben fontos lesz, ezért nézzük meg, mennyi $|\Psi_{nlm}|^2$ értéke a nullában! Először is, vegyük észre, hogy ρ^l miatt $l \neq 0$ esetén ez a valószínűsűrség nulla, tehát $l > 0$ esetén az elektron biztosan nincs az origóban. Az $l = 0$ esethez az $L_n^i(0) = \text{binom}(n+i, n)$ és az $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ összefüggést kell felhasználni, és kiderül, hogy a keresett érték $1/\pi n^3 a^3$ – ennyi

tehát annak valószínűsége, hogy az $l = 0$ pályán lévő elektron éppen az origóban, azaz az atommaggal azonos helyen van!

Az állapotokat első körben m szerint degeneráltan, csak az n és az l megadásával jelöljük, ahol az $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ értékeknek az s, p, d, f stb. betűk felelnek meg, azaz 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f stb. állapotok lehetségesek. Fontos ugyanakkor látni, hogy a fenti egyszerű gondolatmenet már két elektronra sem működik, mert nem tudjuk zárt alakban felírni a hullámfüggvényt, azaz megoldani a Schrödinger-egyenlet háromrészesecsés verzióját. Ugyanakkor sokszor nagyobb atomokra is mégis azt a közelítést vesszük, hogy az atom Coulomb-potenciálja $Z\alpha/r$, és akkor a fentieknek megfelelő, $\alpha \rightarrow Z\alpha$ csere utáni állapotok és energiák jelennek meg.

A spin is figyelembe véve az m szerint degenerált pályákat három számmal írjuk le: n és l mellett a spin perdület-irányú vetülete (ez legyen s_z) vagy a teljes perdülethez tartozó kvantumszám (j) is megjelenhet. Ahogy korábban is említettük, $|l - s| \leq j \leq l + s$, így s pályák ($l = 0$) esetén $j = 1/2$, minden más esetben $j = l \pm 1/2$, ami éppen az $s_z = \pm 1/2$ eseteknek felel meg. Így tehát minden p pályából kétféle van: $p_{1/2}$ és $p_{3/2}$, d pályából $d_{3/2}$ és $d_{5/2}$, és így tovább. Így például a $3d_{5/2}$ állapotban az energia sajátértékéhez tartozó kvantumszám $n = 3$, a pályaperdülethez $l = 2$, a teljes perdülethez $j = 5/2$ tartozik, míg a spin pályaperdület-irányú vetületéhez $s_z = +1/2$ tartozik. A pályaperdület adott (tetszőleges) irányú vetületének kvantumszáma -2 és 2 között egy egész szám lesz, míg a teljes perdületé $-5/2$ és $5/2$ között egy „feles” szám.

A perdület adott irányú vetülete, azaz az m szerinti energia-degeneráció a perdületoperátorba és a gömbfüggvényekbe van „kódolva”. Ugyanakkor **mágneses tér jelenlétében m szerint felhasadás figyelhető meg**, a mágneses momentum és a mágneses tér kölcsönhatásának köszönhetően. Mivel ilyenkor egy $V = \mu_B$ perturbáció jelenik meg a Hamilton-operátorban, a 6.7. fejezetben említetteknek megfelelően ennek várható értékét kell kiszámolnunk az n, l, m állapotban, hogy megkapjuk az energiaszint eltolódását. Legyen a mágneses tér iránya a z irány, ekkor $V = \mu_z B_z$ perturbációnk van, és mivel $\mu_z = \mu_B L_z / \hbar$ (kizárólag a pályaperdületet vizsgálva most), így az L_z operátor sajátértéke, azaz az m mágneses kvantumszám jelenik meg a **Zeeman-effektusnak** nevezett energiaeltolódásban, amelynek nagysága

$$\Delta E_{\text{Zeeman}} = -\mu_B B_z m \quad (316)$$

Mivel a Bohr-magneton értéke $5,8 \cdot 10^{-5}$ eV/T, ezért 1 T mágneses térben a felhasadás egy százszázred elektronvolt nagyságrendű. Érdemes megemlíteni, hogy valójában spin jelenlétében J , a teljes perdület számít majd, illetve az ebből származó mágneses momentum, és ilyenkor a felhasadás $\mu_B B_z g_j m_j$ lesz, ahol g_j értékét a (282) egyenletben adott módon kaphatjuk meg.

A 6.7. fejezetben említett perturbációs számítás későbbi alkalmazásakor fontos lesz, így érdemes megemlíteni egyes operátorok várható értékét a fenti állapotokban. Értelemszerűen az energia-, perdület- és spinoperátoroknak a fenti állapotok sajátállapotai, így ezek szórásmentesek, várható értékük pedig az adott (kvantumszámmal jellemzett) sajátérték. Egyéb operátorok várható értéke viszont korántsem triviális, így ezeket itt megadjuk. Vegyük először az r^{-n} típusú operátorokat:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{an^2} \quad (317)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a^2 n^3 (l + 1/2)} \quad (318)$$

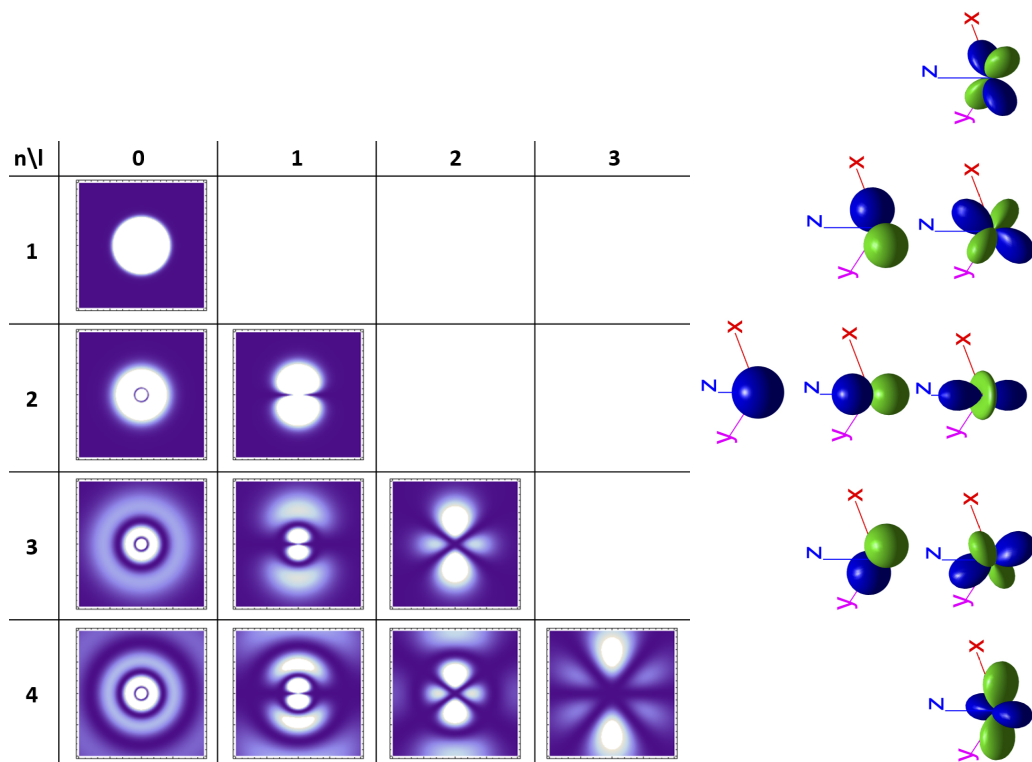
$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a^3 n^3} \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (\text{ha } l > 0) \quad (319)$$

Szükség lesz továbbá a háromdimenziós Dirac-delta operátor várható értékére is, ami a Dirac-delta $\int \delta f = f(0)$ definíciójának megfelelően $|\Psi(0)|^2$ -tel egyezik meg, ami $l > 0$ esetén nulla (a hullámfüggvényben megjelenő r^l tényező miatt), $l = 0$ esetén pedig

$$\langle \delta^3 \rangle_{nl} = \frac{m^3 c^4 \alpha^4}{\pi \hbar^2 n^3} = \frac{1}{\pi n^3 a^3} \quad (320)$$

adódik. Ez egyébként azért lesz lényeges, mert a Coulomb-potenciál Laplace-operátor általi képe éppen a háromdimenziós Dirac-delta. Ezt onnan is láthatjuk, hogy $r \neq 0$ esetén

$$\Delta \frac{1}{r} = 0, \quad (321)$$



28. ábra. A hidrogénatom elektronjának lehetséges hullámfüggvényei abszolútérték-négyzetének kétdimenziós vetületei a Schrödinger egyenlet megoldásai alapján (balra). Láthatólag a nulla valószínűségű felületek az első oszlopban koncentrikus gömbök, és l egyre nagyobb értékei esetén egyre több gömb cserélődik sík felületre, míg $l = n - 1$ esetén l darab síkot látunk. A jobb oldali ábrán (amely nagyobb méretben a 27. ábrán is megtekinthető) a gömbfüggvények kontúrfelülete látható. Az m különböző értékei az eloszlások különböző 3D elforgatásainak felelnek meg, illetve $m > 1$ esetén $m = 0$, $m > 2$ esetén $m = 2$ is más egy kicsit.

ugyanakkor a $\Delta(1/r)$ operátor várható értéke az adott állapot nullában vett értékének abszolútérték-négyzetének -4π -szeresét adja. Ezt onnan tudjuk, hogy $\Delta(1/r)$ térfogati integrálja -4π . Ezt pedig úgy láthatjuk be, hogy veszünk egy origóra centrált gömböt, és erre $\Delta(1/r)$ integrálja megegyezik $\nabla(1/r) = -1/r^2$ felületi integráljával. Bármely más (a nullát magában foglaló, véges méretű) térfogatra is igaz lesz ez, hiszen a függvény minden máshol nulla értéket vesz fel (így a térfogati integrálja csak a nullában felvett értéktől függ).⁵

8.2. A finomfelhasadás

A Schrödinger-egyenletből kapott energiasajátértékek jól egyeznek a kísérleti tapasztalatokkal, de nagy felbontású spektrométerrel kiderül, hogy a vonalak eltolódnak és felhasadnak, azaz egyfajta **finomszerkezet** jelenik meg. Ennek három oka van: a spin és a pálya kölcsönhatása, a relativisztikus hatások megjelenése, illetve az úgynevezett Darwin-hatás. Ezeket mind úgy tudjuk megadni, hogy a korrekciót a Hamilton-operátor δV perturbációjának tekintjük, és a 6.7. fejezetben említetteknek megfelelően ilyenkor $\Delta E_{nl} = \langle \delta V \rangle_{nl}$ energiaeltolódást kapunk, ahol az adott állapot szerinti várható értéket kell vennünk.

A **relativisztikus hatást** úgy foglalhatjuk össze, hogy az energia valójában nem $p^2/2m$ formában írható, hanem $\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2$ (ami kis korrekció, ha $p \ll m$), és ennek sorbafejtése

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \dots \quad (322)$$

Ebből az elsőrendű korrekció az első tagnak felel meg, tehát ennek energiáját kell vizsgálnunk. Az eredmény ezen operátor n, l állapotbeli várható értékéből számolható ki (felhasználva, hogy szórástmentes állapotban egy operátor négyzetének várható értéke megegyezik a várható érték négyzetével), a

$$-\frac{p^4}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2} E_{\text{kin},n}^2 = -\frac{1}{2mc^2} (E_n - V)^2 = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha\hbar c}{r} \right)^2 \quad (323)$$

összefüggés felhasználásával, az $1/r$ és $1/r^2$ operátorok fent említett várható értékével

$$\Delta E_{n,l}^{\text{rel.korr.}} = -\frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{n} \right) \quad (324)$$

adódik, ahol $\alpha = ke^2/\hbar c$ a finomszerkezeti állandó. Ez az l -függő felhasadás az 1s alapállapotban (ahol $n = 1$ és $l = 0$) kb. $9 \cdot 10^{-4}$ eV korrekciót jelent. Ezt a korrekciót a valóságban a Dirac-egyenlettel kellene megtenni, a fenti levezetés matematikailag nem teljesen korrekt az $l = 0$ esetre, de elsőrendben helyes.

A **spin-pálya csatolás** abból adódik, hogy ha az elektron mozgó rendszeréből vizsgáljuk, a mának van mágneses tere is, és ezzel kölcsönhat az elektron sajátperdületére, $\vec{\mu}\vec{B}$ mértékű perturbációt okozva a Hamilton-operátorban. A mozgó töltés mágneses tere $\vec{B} = \vec{v} \times \vec{E}/c^2$, és miután a skalárpotenciál alakja $V = -ke^2/r$, így $\vec{E} = -\vec{\nabla}V = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{ke}{r^2}$, a mag mágneses tere pedig az impulzus $p = v/m$ kifejezésével

$$\vec{B} = \vec{v} \times \frac{\vec{E}}{c^2} = -\frac{ke}{mc^2r^3} \vec{p} \times \vec{r} = \frac{ke\vec{L}}{mc^2r^3}. \quad (325)$$

A mag fentiek szerinti mágneses terét és az elektron

$$\vec{\mu} = g_s\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} = \frac{g_s e}{2m} \vec{S} \quad (326)$$

mágneses momentumát skalárszorozva kapjuk meg a perturbáló operátort, azaz a Hamilton-operátorhoz hozzáadott tagot. Ez az igen naív számolás majdnem helyes eredményt ad, ugyanis a korrekt eredmény

$$\hat{V}^{\text{spin-pálya}} = \frac{1}{2} \frac{ke^2g_s}{2m^2c^2r^3} \vec{L}\vec{S} = \frac{ke^2}{2m^2c^2r^3} \vec{L}\vec{S} = \frac{\alpha\hbar}{2m^2cr^3} \vec{L}\vec{S} \quad (327)$$

⁵Mindennek matematikailag korrektebb formába öntött tárgyalásához disztribúcióelméleti alapok szükségesek.

ahol felhasználtuk a $\mu_B = e\hbar/2m$ összefüggést.

A fenti (327) egyenletben az első $1/2$ faktort Llewellyn Thomas számolta ki, a koordinátarendszer-váltás következtében jön be. Szemléletes magyarázata a Thomas-precesszió: a sebességtér a relativitáselméletben hiperbolikus, azaz egy vektor kör mentén való körbevitele esetén a végeredmény nem ugyanabba az irányba fog mutatni (a sebességösszeadás nem-asszociativitása miatt). Valójában a Schrödinger-egyenlet relativisztikus verziója, a Dirac-egyenlet adja meg a fentiek konzisztens magyarázatát. A végeredményben tehát az LS szorzat szerepel (ahol most elhagytuk a vektor-jelölést, de azért észben tartjuk, hogy itt vektorokról van szó).

Az LS szorzat sajátértékét a 7.3. fejezetben tárgyaltakhoz hasonlóan a $J = L + S$ vektoros összefüggés négyzetéből számíthatjuk ki. Itt a sajátértékek $j(j+1)$, $l(l+1)$ és $s(s+1)$ módon adódnak, így $s = 1/2$ és $j = |l + s|$ miatt, $l > 0$ esetén

$$\langle \vec{L}\vec{S} \rangle = \frac{\hbar^2}{2}(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \Rightarrow \begin{cases} j = l + 1/2 \rightarrow 2\langle LS \rangle = \hbar^2 l \\ j = l - 1/2 \rightarrow 2\langle LS \rangle = -\hbar^2(l+1) \end{cases} \quad (328)$$

de $l = 0$ esetén $j = 1/2$ így $\langle \vec{L}\vec{S} \rangle = 0$. Az r^{-3} operátor fentebb megadott várható értékéből így már meghatározható a tényleges vonalfelhasadás. Minden állandót csoportosítva

$$\Delta E_{n,l,+1/2}^{\text{spin-pálya}} = l\gamma_{n,l} \quad (329)$$

$$\Delta E_{n,l,-1/2}^{\text{spin-pálya}} = -(l+1)\gamma_{n,l}, \text{ ahol} \quad (330)$$

$$\gamma_{n,l} = \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \frac{1}{2l(l+1)(l+1/2)} \quad (331)$$

ami az $n = 2$ és $l = 1$ esetén tehát ($l = 0$ esetén $\Delta E = 0$) $mc^2\alpha^4/96$, azaz kb $1,5 \cdot 10^{-5}$ eV, és ez egyúttal $n = 2$ esetén az s és a p pálya energiájának különbsége.

Egy további korrekciót ad az úgynevezett **Darwin-tag**, amelyet Charles Darwin unokája, Sir Charles Galton Darwin fedezett fel, a Dirac-egyenlet nemrelativisztikus közelítésének vizsgálatával. Ez szemléletesen az elektron relativisztikus „rezgéséből”, a Zitterbewegungból adódik: a Dirac-egyenletből adódó negatív és pozitív energiájú állapotok között ingadozik az elektron, amely térbeli „rezgésként” nyilvánul meg, kb. $2mc^2/\hbar$ frekvenciával és nagyságrendileg $\lambda_{\text{Compton}} = \hbar/mc$ amplitúdóval. Ez elkeni a mag által kifejtett potenciált, amely λ_{Compton} nagyságrendű elektron-elmozdulást eredményez. Könnyen kiszámítható, hogy ennyi elmozdulás után a potenciál átlagos perturbációja ennek négyzetével és az eredeti potenciál Laplace-ával lesz arányos. Legyen a potenciál fluktuációja felírható így:

$$\delta V = V(r + \delta r) - V(r) = \vec{\delta r} \cdot \vec{\nabla} V + \frac{1}{2}(\vec{\delta r} \cdot \vec{\nabla})^2 V + \dots \quad (332)$$

Itt kihasználhatjuk, hogy

$$\langle (\vec{\delta r} \cdot \vec{\nabla})^2 V \rangle = \frac{1}{3} \langle \delta r^2 \rangle \langle \vec{\nabla}^2 V \rangle \quad (333)$$

illetve izotróp fluktuációk esetén $\langle \vec{\delta r} \rangle = 0$, és ekkor

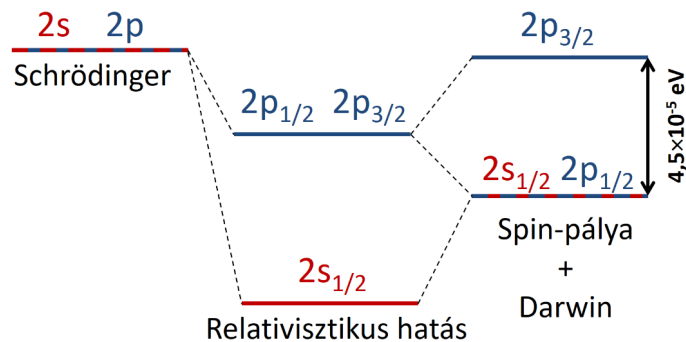
$$\langle \delta V \rangle = \frac{1}{6} \langle \delta r^2 \rangle \langle \vec{\nabla}^2 V \rangle. \quad (334)$$

Így tehát a Hamilton-operátor ebből adódó perturbációja

$$V_{\text{Darwin}} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V, \quad (335)$$

azaz az $1/r$ potenciál Laplace-a szerepel benne. Ez $r \neq 0$ esetén nulla, de ott nem nulla értékű függvénnyel szorozva véges értéket ad, így operátor értelemben a $\delta^3(\vec{r})$ operátorral lesz arányos. Erre az adott n állapotban $l = 0$ esetén fentebb már megadtuk a várható értéket, ezzel pedig

$$\Delta E^{\text{Darwin}} = \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \quad (336)$$



29. ábra. A hidrogénatom energiaszintjeinek finomszerkezete, először csak a relativisztikus hatást figyelembe véve, majd a spin-pálya csatolást és a Darwin-féle korrekciót is.

adódik. Érdeemes megemlíteni, hogy a fenti „Darwin-potenciál” a Dirac-egyenletből közvetlenül is adódik.

A relativisztikus korrekció és a spin-pálya-hatás alapján az s és a p állapotok energiája különböző lenne, de a Darwin-tag miatt az energiaszintek végül l és s helyett csak j -től függenek. A fenti három faktossal a felhasadás és a **finomszerkezetbeli energiaszintek** megadhatóak:

$$\Delta E_{n,l} = -\frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{n} \right), \text{ azaz} \quad (337)$$

$$E_{n,l,s} = E_n \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n} \right)^2 \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (338)$$

Az $n = 1$ pályával összességében nem történik semmi (hiszen itt $j = 1/2$ mindenképpen). Mi a helyzet $n = 2$ esetén? A relativisztikus korrekció az s és a p pályára is hat, utóbbira kisebb mértékben. Ugyanakkor a spin-pálya kölcsönhatás csak a p pályát módosítja (illetve két részre osztja), míg a Darwin-tag csak az s pályát. Összességében az $n = 2$ pályák két részre szakadnak, a $2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ azonos energiájú, a $2p_{3/2}$ ezzel szemben egy másik energiaszintet ad, ahogy azt a 29. ábra is mutatja.

8.3. A hiperfinom felhasadás

A **proton mágneses momentuma** a $g_p = 5,58$ giromágneses faktoriall és a mag-magneton $\mu_N = e\hbar/2m_p$ definíciójával kifejezve

$$\vec{\mu}_p = \frac{eg_p}{2m_p} \vec{S}_p = g_p \mu_N \frac{\vec{S}_p}{\hbar}, \quad (339)$$

ahol \vec{S}_p a proton spinje. Ez a mágneses momentum mágneses teret kelt, ami hat az elektron mágneses momentumára, az energiaeltolódás pedig $\vec{\mu}_e \vec{B}_{\mu,p}$ várható értéke lesz (ezt úgy is mondhatjuk, hogy a proton mágneses momentuma érzi az elektron által keltett mágneses teret). A $\vec{\mu}_p$ mágneses momentum vektorpotenciálja $\vec{A} = -kc^2 \frac{\vec{\mu}_p \times \vec{r}}{r^3}$, és ebből a mágneses tér $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ módon adódik, azaz

$$\vec{B} = kc^2 \left(\frac{3(\vec{\mu}_p \vec{r})\vec{r} - \vec{\mu}_p r^2}{r^5} \right) + \frac{8\pi kc^2}{3} \vec{\mu}_p \delta^3(\vec{r}) \quad (340)$$

Ehhez szükség lesz a δ^3 várható értékére, ami csak az $l = 0$ pályákra nem nulla, itt $1/(\pi a^3 n^3)$.

Az elektron mágneses momentuma $\vec{\mu}_e = e(g_s \vec{S} + g_l \vec{L})/m_e = g_j e \vec{J}/m_e$ módon írható (ahol g_j a Landé-féle g-faktor, ami $g_s \approx 2$ és $g_l = 1$ értékéből az s, l, j kvantumszámok függvényében adódik, $l = 0$ esetén $g_j = g_s \approx 2$). Ezzel felírható az energiaeltolódás, amelyben a mágneses tér és a momentum szorzata miatt J és S_p szorzata szerepel. Erre az előzőekhez hasonlóan

$$2 \langle \vec{J} \vec{S}_p \rangle = \hbar^2 (f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)) \quad (341)$$

ahol f az $\vec{F} = \vec{J} + \vec{S}_p$ operátor sajátértékét leíró kvantumszám. A teljes számolást nem csináljuk itt végig, a konkrét eredmény:

$$\Delta E^{\text{hiperfinom}} = \frac{4}{3} \frac{m_e}{m_p} \alpha^4 m_e c^2 g_p \frac{1}{n^3} \left\langle \frac{\vec{J} \vec{S}_p}{\hbar^2} \right\rangle = \frac{A}{2} (f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)) \quad (342)$$

ahol A az úgynevezett intervallumfaktor, továbbá $s_p = 1/2$ a proton spinje. Az $1s$ pálya (ahol $j = 1/2$) esetén az $f = j + s_p = 1$ vagy $f = j - s_p = 0$ állapotok fordulnak elő, ekkor az egyik energia $A/4$, a másik pedig $-3A/4$. Itt tehát a két pálya közötti felhasadás felhasadás

$$\Delta E^{f=0 \text{ vs. } f=1} = A = \frac{4}{3} \frac{m_e}{m_p} \alpha^4 m_e c^2 g_p \approx 5,88 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \quad (343)$$

azaz 1418,9 MHz-es sugárzás, amelynek hullámhossza 21 cm, és a rádiócsillagászatban sokszor látszódik, ugyanis ez áthatol a csillagközi poron. Annyira fontos, hogy a Pioneer-táblára is rákerült. Ugyanakkor kísérletileg 1420,2 MHz adódik, azaz még mindig nincs egyezés, tehát hiányzik még egy korrekció! Ennek az az oka, hogy eddig az elektron spinjére a $g_s = 2$ értéket használtuk, illetve a Dirac-egyenlet eredményeit, az azonban ennyire pontos csak. A kvantumelektrodinamika elmélete adja meg a kísérleti eredményeket a legpontosabban.

8.4. A Lamb-féle eltolódás

A **kvantumtérelmélet** szerint az elektron bármikor kibocsáthat egy fotont magából, ha azt el is nyeli (ez az úgynevezett egyhurok korrekció), lényegében az energiahatározatlanság miatt. Ezek a **virtuális fotonok** „körbelengik” az atom elektronjait, és lecsökkentik az elektron „effektív” tömegét és töltését (és ezt később **renormálás** néven ismerjük majd). Az elektromos tér egy kicsit kisebb lesz, de igazán csak kis távolságon lesz ennek hatása, tehát az s állapotot befolyásolja igazán, amely a mag körül nagy sűrűségű. Ezen kölcsönhatás miatt lesz különbség a $2s_{1/2}$ és $2p_{1/2}$ pályák energiái között, illetve a $g_s = 2$ összefüggés is emiatt nem teljesül. Igazából ezt az eltolódást a 30. ábrán látható három effektus okozza, a „vákuumpolarizáció” (mikor a foton elektron-pozitron párrá „fluktuál”, majd újra egyesül), az elektron tömegének módosulása (renormálása, amelyet a fluktuációként kibocsátott és elnyelt foton okoz) és az elektron anomális mágneses momentuma (amelyet a fotonnal való kölcsönhatás egyhurok-korrekciójával lehet illusztrálni, ld. az elektron anomális mágneses momentumáról szóló alfejezetet).

A Lamb-eltolódást úgy lehet egyébként „félklasszikusan” kiszámítani, ha észrevesszük, hogy ugyanúgy a potenciál fluktuációjáról van szó, mint a Darwin-hatásnál, tehát itt is egy

$$\langle \delta V \rangle = \frac{1}{6} \langle \delta \vec{r} \rangle \langle \vec{\nabla}^2 V \rangle. \quad (344)$$

jellegű tag jelenik meg. Ugyanakkor itt δr átlaga nem a Compton-hullámhossznak felel meg, hanem kicsit bonyolultabban adódik, amellyel az energiaeltolódás

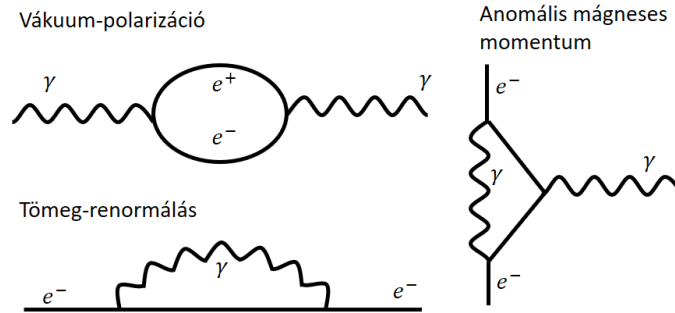
$$\langle \delta V \rangle = \alpha^5 m c^2 \frac{1}{6\pi} \ln \frac{1}{\pi \alpha} \quad (345)$$

ami nagyságrendnél jobb egyezést ad a kvantumtérelméleti számolással, amely szerint

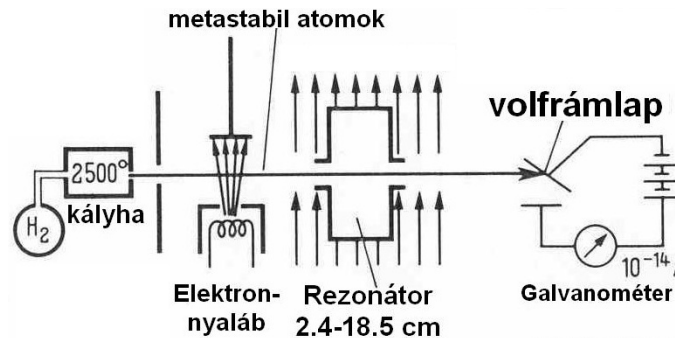
$$\Delta E^{\text{Lamb}} = \alpha^5 m c^2 \frac{\xi_n}{4n^3} \quad (346)$$

adódik, ahol $\xi_n \approx 13$, és n -től gyengén függ.

Lamb és Retherford 1947-es kísérlete mutatta ki ezt az igen kicsi eltolódást (lásd 31. ábra), amely a rádiófrekvenciás tartományban van, $4,4 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$ az értéke. Ezt optikai úton nem lehet kimutatni, csak nagyfrekvenciás rezonanciával. Ez viszont azért szerencsés, mert így a Doppler-kiszélesedés nem jelent problémát (mert az a frekvenciával arányos). A fő kísérleti kérdés, hogy a sok átmenet között hogyan különböztették meg éppen a $2s_{1/2}$ és $2p_{1/2}$ közöttit? A kísérlet lényege, hogy egy 2500 fokaló kályhából bocsátották ki a hidrogén-atomokat, amelyek az $1s_{1/2}$ alapállapotban voltak. Ezt a nyalábot elektronokkal bombázták, és ennek hatására némely atomok átkerültek



30. ábra. A Lamb-féle eltolódáshoz hozzájáruló folyamatok Feynman-diagramjai.



31. ábra. A Lamb-Retherford kísérlet.

a metastabil $2s_{1/2}$ állapotba (mivel a kiválasztási szabályok szerint az ebből az alapállapotba való átmenet nagyon gyenge, és így az állapot élettartama tizedmásodperc nagyságrendű). Az atomok eztán átmennek egy gigahertzes elektromágneses téren, és ha itt egy atom átmegy az $2p_{1/2}$ állapotba (ami akkor következik be tömegesen, ha a gerjesztő tér frekvenciája éppen ennek a $2s_{1/2}-2p_{1/2}$ átmeneti energiának felel meg), az már milliárdod másodperc alatt alapállapotba bomolhat. Ezen tér után az atomok egy volfrám fóliába ütköznek, és a még mindig $2s_{1/2}$ állapotban lévő atomok elbomlanak, és a fóliából úgynevezett Auger-elektronokat bocsátanak ki⁶. A $2s_{1/2}$ és az $2p_{1/2}$ állapot közötti energiát a nagyfrekvenciás generátorral eltalálva lényegesen kevesebb ilyen Auger-elektront fogunk észlelni (mivel ekkor a $2p_{1/2}$ hidrogén egyből alapállapotba bomlik, azaz $1s_{1/2}$ hidrogén érkezik a volfrámlapra), tehát meghatározható a $2s_{1/2}-2p_{1/2}$ átmenet energiája! A mérésük szerint ez kb. 1 GHz volt, mai számított értéke 1057,833(4) MHz, mért értéke pedig 1057,845(3) MHz: a hidrogénatom spektrumát ezzel a lehető legnagyobb pontossáig értjük, ahogy azt a 32. ábra is illusztrálja.

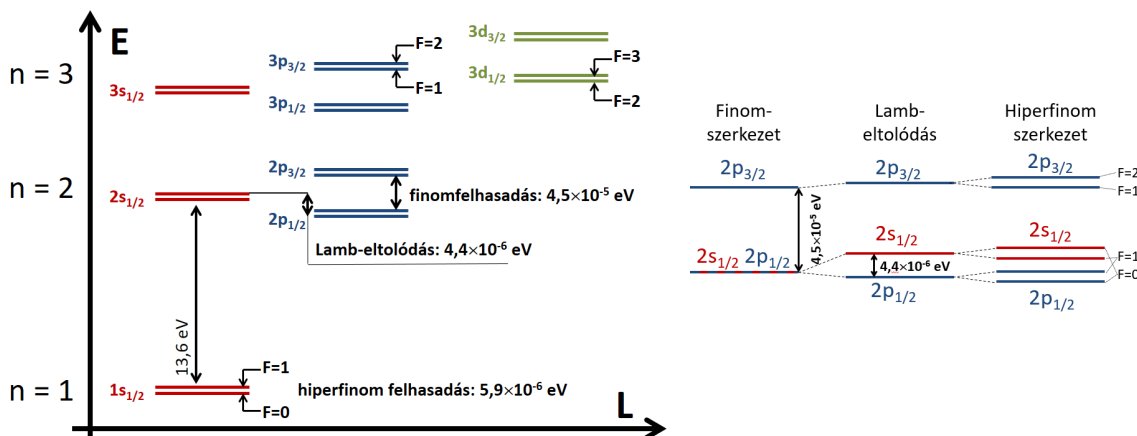
Érdeemes hozzáfűzni, hogy nagy rendszámú, de csak egyetlen elektront tartalmazó atomokkal igen nagy pontossáig lehet ellenőrizni a fentiek nagy rendszámra általánosított verzióját. Például U^{91+} esetén (azaz 92-szeresen pozitív mag és egyetlen elektronnal) az első energiaszint (a Z^2 -tel való skálázás miatt) 132 keV, és ehhez a tömeg-renormálás 355 eV korrekciót ad, a vákuumpolarizáció -89 eV korrekciót, a mag véges méretéből adódó korrekció 199 eV, és még a kvantumtérelmélet másodrendű korrekciói is 1 eV nagyságrendűek – ennek oka az, hogy ezen korrekciók Z^4 szerint skáláznak.

8.5. Többelelektronos atomok szerkezete

Több elektron esetén észre kell vennünk, hogy ilyenkor többelelektronos hullámfüggvényt kell felírunk:

$$\Psi(x_1, x_2)_{p_1, s_1; p_2, s_2}, \quad (347)$$

⁶Az Auger-emisszió során először fotonelnyelés vagy más hatás miatt az egyik belső elektron kilép az atomból, így ott egy „lyuk” keletkezik az elektronszerkezetben. Ezt egy külső elektron betölti, és az energiefel szabadulás egy további elektront lökhet ki az atomból. Ez utóbbit hívjuk Auger-elektronnak.



32. ábra. A hidrogénatom energiaszintjeinek részletes szerkezete. A főkvantumszám szerinti felhasadás a Coulomb-kölcsönhatásból adódik, a perdületek szerinti felhasadás (finomszerkezet) ennek relativisztikus korrekciójából és a spin-pálya csatolásból (melynek során a mag elektron által észlelt mágneses tere hat az elektron saját mágneses nyomatékára). A Lamb-féle eltolódás oka a kvantum-elektrodinamikában keresendő, míg a hiperfinom felhasadás az elektron mágneses terének és a mag spinjének kölcsönhatásából adódik. A jobb oldali ábrán a finomszerkezet, a hiperfinom szerkezet és Lamb-féle eltolódás látható „kinagyítva”.

ahol x_i az egyes elektronok helye, p_i az impulzusa és s_i a spinvetülete. Ezek a függvények nem a szokásos Hilbert-terünkben vannak, hanem egy másik Hilbert-tér elemei, de ezekbe a részletekbe most itt nem megyünk bele. Megemlítjük viszont, hogy ilyenkor definiálhatjuk a kicserélés operátorát:

$$P_{12}\Psi_{p_1,s_1;p_2,s_2} = \Psi_{p_2,s_2;p_1,s_1}. \quad (348)$$

Mivel $P_{12}^2 = id$, ezért a sajátértéke nyilván ± 1 lesznek. A $+1$ sajátértékhez tartozó sajátállapotot szimmetrikus, a -1 -hez tartozót antiszimmetrikus hullámfüggvénynek nevezzük, és értelemszerűen ezek ilyen alakot vesznek fel:

$$\Psi_{p_1,s_1;p_2,s_2}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{p_1,s_1;p_2,s_2} \pm \Psi_{p_2,s_2;p_1,s_1}). \quad (349)$$

kiderül, hogy a fermion típusú (azonos) részecskepárok mindig antiszimmetrikus, míg a bozonok szimmetrikus hullámfüggvénybe írhatóak. Ez valahol mélyen azt jelenti, hogy az azonos típusú kvantumos részecskék **teljesen azonosak**, kicserélésük nem megfigyelhető – hiszen csak egy ± 1 faktor adódik a hullámfüggvényben. Kiderül azonban, hogy bár egyetlen részecskepár esetén a kicserélés nem fizikai hatás, de interferenciát okozhat: az ebből adódó hatást nevezzük kvantum-statisztikus korrelációnak.

Visszatérve az atomfizikára, fontos látni, hogy a többatomos elektronok hullámfüggvénye minden elektron cseréjére antiszimmetrikus kell, hogy legyen, ezt hívják Pauli elvnek. Így tehát az 1s pályán két elektron lehet: ilyenkor a térbeli hullámfüggvény azonos, de a spintérbeli hullámfüggvény antiszimmetrikus:

$$\Psi(x_1)\Psi(x_2) \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1(+)\chi_2(-) + \chi_1(-)\chi_2(+)) \quad (350)$$

ahol $\chi_{1,2}$ a spin-hullámfüggvény, és az argumentumba írt \pm a spinvetületet jelzi.

Ezen túl a többelektronos atomokat a **soktestprobléma** bonyolultsága miatt analitikusan sem tudjuk jól kezelni. Az elektronszerkezetet alakító legfontosabb tényezők:

1. Coulomb-vonzás a mag és az elektronok között
2. Coulomb-taszítás az elektronok között
3. Spin-pálya csatolás

4. Elektronspinből eredő mágneses momentumok kölcsönhatása
5. Elektronpályából eredő mágneses momentumok kölcsönhatása
6. Elektronspin-magspin kölcsönhatása
7. Elektronpályamomentum-magspin kölcsönhatása
8. Relativisztikus korrekciók
9. Fermion-hullámfüggvény antiszimetriájából adódó energiaeltolódás

Ezt általában perturbatíven próbáljuk kezelni, centrális tért feltételezve, és valamilyen maradék kölcsönhatást számolva. A legfontosabb ebben: 2, 3 és 9.