

# Előszó

*„Ha az ember magára tekint, először a testét látja, azaz bizonyos anyagmennyiséget, amelyet a magáénak mondhat. De hogy megérthesse, hogy mi is ez, össze kell hasonlítani mindazzal, ami felette van, és mindazzal, ami alatta van, hogy pontos határait megismerhesse. És ne csak a közvetlenül környező tárgyakat nézze, hanem a teljes természetet fenséges tökélyében, méltóságában...*

*És ha már nem láthatunk többet, szálljon tovább a képzeletünk. Képzeletünk elfáradt, de a természet kimeríthetetlenül gazdag marad...*

*S ha magához tért az ember, gondolja meg, mi ő a mindenséghez képest; lássa magát a természet egy félreeső kis zugában... Mert mi az ember a végtelenben?*

*De hogy egy még megdöbbentőbb csodát lásson, keresse a legkisebbet az ismert tárgyakban...*

*...és beleszédül a csodákba, mert a kicsinység csodája nem kisebb, mint a nagyság csodája. Mert ki ne ámulna el azon, hogy testünk, mely észrevétlen a világban, láthatatlan a mindenségben, most egyszerre hatalmas kolosszussá lesz; új világ, vagy még inkább minden a semmihez képest, ahová el nem érhetünk...*

*Mert mi az ember a természetben? Semmi a végtelenhez képest, minden a semmihez képest. Valami a semmi és minden közt, a középén...”*

**PASCAL: Gondolatok**

Amikor Pascal a fenti gondolatokat a XVII. században megfogalmazta, még nem ismerték az anyag szerkezetét, de kimeríthetlenségét már sejtették. Ma már tudjuk, hogy az anyag atomokból épül fel. Az atomok atommagból és a körülötte lévő elektronokból állanak. Az atommag tovább osztható protonokra és neutronokra, amelyeknek, mai ismereteink szerint belső szerkezetük van: kvarkokból állanak. A jövőben valószínűleg az anyag még mélyebb struktúráit fogják feltárni.

Az anyag szerkezetének mérhetetlen gazdagságából az atomfizika csak a struktúra egy adott szintjével foglalkozik. Azt írja le, hogy az atommagok és az elektronok hogyan állnak össze atomokká. Az atommag szerkezete, illetve az egyes atomok összekapcsolódásának módja már a fizika más területeinek a tárgyát képezik.

Ez a könyv a kolozsvári Babeş-Bolyai egyetemen a harmadéves fizikus hallgatóknak tartott atomfizika előadásaim alapján készült. Az első hat fejezet megértéséhez a középiskolás fizika és matematika ismerete elegendő. Az utolsó három fejezet követé-

séhez már alapvető kvantummechanikai ismeretek is szükségesek.

Az atomfizika körébe tartozó jelenségek tárgyalásánál egyaránt törekedtem a kísérleti és az elméleti megközelítésre. Igyekeztem hangsúlyozni, hogy e tudományág fejlődése csak a kísérleti és az elméleti fizikusok szoros együttműködése útján lehetséges.

Ajánlom ezt a könyvet a fizika szakos egyetemi hallgatókon kívül a kémia szakos és műszaki egyetemi hallgatóknak is, fizikatanároknak (különös tekintettel a fokozati vizsgákra készülőkre), középiskolás diákoknak, és mindenkinek, aki érdeklődik az atomfizika iránt.

*A szerző*

*Kolozsvár, 1997 szeptember*

# Tartalomjegyzék

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Az atomfogalom kialakulása</b>                                   | <b>7</b>  |
| 1.1      | Ókor . . . . .  | 7         |
| 1.2      | A hő kinetikus emélete . . . . .                                    | 8         |
| 1.3      | Kémia . . . . .   | 8         |
| <b>2</b> | <b>Az elektron</b>  | <b>11</b> |
| 2.1      | Faraday törvényei az elektrolízisre . . . . .                       | 11        |
| 2.2      | Az elektron felfedezése . . . . .                                   | 12        |
| 2.3      | A fajlagos töltés meghatározása a parabolamódszerrel . . . . .      | 13        |
| 2.4      | Az elektron töltésének közvetlen meghatározása . . . . .            | 17        |
| 2.5      | Az elektron elektromágneses tömege és sugara . . . . .              | 19        |
| <b>3</b> | <b>Az atomok tömege és mérete</b>                                   | <b>21</b> |
| 3.1      | Atomtömegegység . . . . .   | 21        |
| 3.2      | Az atomok tömegének közvetlen mérése. Izotópok . . . . .            | 21        |
| 3.3      | Tömegspektrográfok és tömegspektrométerek . . . . .                 | 23        |
| 3.4      | Az atomok mérete . . . . .  | 27        |
| <b>4</b> | <b>Klasszikus atommodellek. A magmodell</b>                         | <b>31</b> |
| 4.1      | A Thomson-modell. Atomok bombázása elektronokkal . . . . .          | 31        |
| 4.2      | Atomok bombázása alfa részecskékkel. A bolygómodell . . . . .       | 32        |
| 4.3      | A Rutherford-szórás . . . . .                                       | 34        |
| 4.4      | A bolygómodell hiányosságai . . . . .                               | 38        |
| <b>5</b> | <b>Az elektromágneses hullámok részecsketermészete</b>              | <b>41</b> |
| 5.1      | A feketetest hőmérsékleti sugárzása . . . . .                       | 41        |
| 5.2      | A fényelektromos hatás. A foton . . . . .                           | 47        |
| 5.3      | A röntgensugárzás . . . . .   | 51        |
| 5.4      | A Compton-hatás . . . . .   | 56        |
| <b>6</b> | <b>Az atomok régi kvantumelmélete. Az elektron hullámtermészete</b> | <b>61</b> |
| 6.1      | Az atomok optikai spektruma . . . . .                               | 61        |
| 6.2      | A Bohr-féle atommodell . . . . .                                    | 62        |
| 6.3      | A hidrogénszerű atomok Bohr-Sommerfeld modellje . . . . .           | 67        |
| 6.4      | Franck és Hertz kísérlete . . . . .                                 | 70        |
| 6.5      | Az elektron hullámtermészete . . . . .                              | 72        |

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| <b>7</b> | <b>A hidrogénatom kvantummechanikai leírása</b>   | <b>77</b>  |
| 7.1      | Az elektron mozgása gömbszimmetrikus erőterben. Az impulzusmomentum sajátértékei . . . . .            | 77         |
| 7.2      | A hidrogénatom radiális Schrödinger-egyenlete. Az energia sajátértékei és a sajátfüggvények . . . . . | 80         |
| 7.3      | Az elektron megtalálhatósági valószínűsége és az orbitálok . . . . .                                  | 82         |
| 7.4      | Az elektron orbitális mozgásából származó mágneses nyomatéka. A normális Zeeman-hatás . . . . .       | 87         |
| 7.5      | Az elektron spinje . . . . .  | 92         |
| 7.6      | A spin-pálya kölcsönhatás félklasszikus modellje és a teljes impulzusmomentum . . . . .               | 95         |
| 7.7      | A hidrogénatom relativisztikus és kvantumelektrodinamikai leírásának következményei . . . . .         | 99         |
| <b>8</b> | <b>A többelektronos atom</b>  | <b>105</b> |
| 8.1      | A Pauli-féle kizárási elv . . . . .   | 105        |
| 8.2      | Elektron-konfigurációk . . . . .  | 107        |
| 8.3      | Az elektron impulzusmomentumainak csatolása . . . . .   | 111        |
| 8.4      | Az atom gyenge mágneses térben. Az anomális Zeeman-hatás . . . . .                                    | 114        |
| 8.5      | Az atom erős mágneses térben. A Paschen-Back hatás . . . . .  | 117        |
| 8.6      | Az atom elektromos mezőben. A Stark-hatás . . . . .   | 118        |
| 8.7      | A perturbációs és variációs módszer alkalmazása a hélium alapállapotára                               | 120        |
| 8.8      | A Hartree-Fock módszer alkalmazása a héliumatomra . . . . .   | 124        |
| 8.9      | A Hartree-Fock módszer alkalmazása többelektronos atomok esetén . .                                   | 128        |
| <b>9</b> | <b>Atomi spektrumok</b>   | <b>131</b> |
| 9.1      | Foton elnyelés és kibocsátás . . . . .  | 131        |
| 9.2      | Kiválasztási szabályok . . . . .  | 133        |
| 9.3      | Egy-elektron átmenetek . . . . .  | 135        |
| 9.4      | Két-elektron átmenetek . . . . .  | 137        |
| 9.5      | Röntgenspektrumok . . . . .   | 139        |
|          | <b>Univerzális fizikai állandók</b>   | <b>143</b> |
|          | <b>Név-és tárgymutató</b>   | <b>144</b> |
|          | <b>Könyvészet</b>   | <b>147</b> |

# 1

## Az atomfogalom kialakulása

### 1.1 Ókor

Az ókori görög filozófusok voltak az elsők, akik a körülöttük található sokféle anyag tulajdonságait és szerkezetét egyszerű elvek alapján próbálták magyarázni. Alapelvük az volt, hogy az anyag néhány egyszerű elemből áll, és ezeknek a különböző kombinációi vezetnek az anyag sokféleségéhez.

Empedoklész (i.e. V. század) vezette be a később széles körben elfogadott négy elemet, melyből minden anyagfajta felépül. Ezeket az elemeket földnek, víznek, levegőnek és tűznek nevezte el, mivel ezek az elterjedt „anyagok” jól megkülönböztethető tulajdonságokkal rendelkeznek. Ilyen kevés fajta építőkö feltételezéséhez az az elv vezetett, hogy a világ bonyolultsága egyszerű törvények (ideák) alapján magyarázható meg.

Démokritosz a korabeli filozófia egyik alapvető kérdésére, az állandóságnak és a változásnak az ellentmondásos voltára kereste a választ. Spekulatíve arra a következtetésre jutott, hogy a dolgok alapvető, állandó és örök részecskékből állanak. Ezek oszthatatlanok, mert ha oszthatóak lennének, már nem lennének örökéletűek, változóakká válhatnának. Ezt az elgondolást az is alátámasztotta, hogy egyes anyagok szaga láthatatlanul terjed a levegőben, ami úgy is magyarázható, hogy minden test nagyon kicsi, szemmel láthatatlan részecskékből áll, melyek közül néhány leválhat és nagy távolságra eljuthat (és orrunkba kerülve szagérzetet okoz). Ezeket az apró részecskéket atomnak nevezte el (amely görögül oszthatatlant jelent). Az atomokat végtelenül változatos alakúnak és nagyságúnak tekintette, amelyek egymásba kapcsolódhatnak. Helyesen látta meg azt, hogy az atomok állandó mozgásban vannak, és az atomokat csak az „űr”, vagyis légtüres tér választja el egymástól. Démokritosz világképe mintegy előrevetíti a XVIII. század mechanisztikus világképét.

Platón (i.e. 427-i.e. 347), az ókor egyik legnagyobb filozófusa, nem fogadhatta el ezt az elképzelést a szabálytalan alakú és végtelen változatosságú atomokról, mert hiányzott belőle a rendező elv, az „idea”, amely Platón filozófiájában központi helyet foglal el. Platón megtartotta az empedoklészi négy elemet, és egy adott elem minden atomját azonosnak tételezte fel. A négy típusú atomnak négy szabályos testet feleltetett meg: a tűznek a tetraédert, a levegőnek az oktaédert, a víznek az ikozaédert és a földnek a kockát. Továbbmenve a gondolatmenetben, ezek a testek lapokból állanak, és minden lap felosztható derékszögű háromszögekre. Végül minden anyag derékszögű

háromszögekből áll, és ezért a különböző anyagfajták kölcsönösen átalakulhatnak egymásba.

Természetesen, Platón gondolatmenete mai szemmel túl spekulatívnak tűnik. Azonban észre kell vennünk benne a lényegét: ez az első kísérlet az anyag felépítésének matematikai leírására. Heisenberg, a kvantummechanika egyik megalkotója, hívta fel a figyelmet arra, hogy Platón atomelképzelése jóval közelebb áll a mai felfogáshoz, mint a Démokritoszé, mert csak néhány alapvető elemi részecske létezik, és ezek nem szilárd, változatlan építőkövek, hanem a megmaradási törvények tiszteletbentartásával kölcsönösen átalakulhatnak egymásba. Ami pedig a leglényegesebb: ezek a részcskék matematikai absztrakciókkal írhatók le, persze bonyolultabbakkal, mint Platón háromszögei.

Arisztotelész Platón tanítványa volt, de nem fogadta el sem az ő geometriai szemléletét, sem a démokritészi atomokat. Megtartotta az empedoklészi négy alapelemet, de szerinte az anyag folytonos felépítésű és végtelenül osztható. Arisztotelésznek igen nagy hatása volt a középkor tudományára, ezért az atomelmélet egészen a XVIII. századig nem fejlődött tovább.

## 1.2 A hő kinetikus emélete

A hő mibenlétének a magyarázatára már a XVII. században felmerült, hogy a hő összefüggésbe hozható a mozgással. Ezzel kapcsolatban a XVIII. században Bernoulli feleleveníti Démokritosz atomelméletét. A gázok nyomását helyesen annak tulajdonítja, hogy az apró gázcsepscék ütköznek az edény falával, erőt gyakorolva arra.

James Waterson az 1840-es évek elején már a hőt egyértelműen az atomok mozgásához köti. Megfogalmazza azt, hogy a test hőmérséklete az őt alkotó részecskék közepes kinetikus energiájával arányos. Később, az 1850-es évek végétől kezdve, a kinetikus gázelmélet robbanászerű fejlődésen megy át (elsősorban Clausius, Maxwell és Boltzmann munkásságának köszönhetően), és teljesen elfogadottá válik az a felfogás, hogy a testek kis részecskékből, atomokból állanak.

A kinetikus gázelmélet azonban az atomokat egyszerűen rugalmas golyókként kezeli, nem foglalkozik azok minőségével és struktúrájával. Az atomfogalom további fejlődéséhez más tudományágak jelentették a hajtóerőt.

## 1.3 Kémia

A kémikusok már a XVIII. században megkülönböztették az elem és a vegyület fogalmát, és sok elemet azonosítottak. A vegyületek létrejöttének a tanulmányozása az egyszerű elemekből vezetett ahhoz a meggyőződéshez, hogy egy adott elem atomjai mind azonosak egymással.

Proust fogalmazta meg a XVIII. század végén az állandó súlyviszonyok törvényét, amely kijelenti, hogy egy kémiai vegyületben az azt alkotó elemek súlyainak az aránya állandó.

Dalton a XIX sz. elején végzett kísérleteinek alapján felállítja a többszörös súlyviszonyok törvényét. E szerint ha két elem többféle arányban egyesülhet vegyületté,

a súlyarányok mindig egy legkisebb súlyarány egész számú többszörosei. Pl. (mai írásmóddal) a nitrogén és az oxigén a következő vegyületeket alkothatja:  $N_2O$ ,  $NO$ ,  $N_2O_3$ ,  $NO_2$ ,  $N_2O_5$ . Ezekben a vegyületekben 1 egység nitrogénre vonatkoztatva a vegyülő oxigén tömegei úgy aránylanak egymáshoz, mint az 1:2:3:4:5. Dalton ezt az empirikus törvényt az atomelmélet alapján magyarázta: minden elem atomjai azonosak, és a különböző anyagok legkisebb egységei (molekulák) csak kevés atomból állanak.

Ehhez kapcsolódóan Gay-Lussac megállapítja a reagáló gázok térfogati arányát, majd Avogadro kimondja nevezetes törvényét: azonos nyomás, térfogat és hőmérséklet mellett a különböző gázok azonos számú molekulát tartalmaznak. Ez a szám lényeges szerepet játszik a fizikában, mert képet nyújt az atomok, molekulák méretéről és tömegéről. Kísérletileg ezt a fontos számot először Loschmidt határozta meg 1865-ben. Később értelmezték az anyagmennyiség fogalmát, mely a molekulatömeggel arányos mennyiség, és így egy olyan állandó értelmezhető, mely független a külső körülményektől. Ezt az univerzális állandót Avogadro-számnak nevezték el, mely megadja bármely anyag 1 kilomóljában található molekulák számát. Az Avogadro-szám mai elfogadott értéke

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{26} \frac{\text{molekula}}{\text{kmol}} \quad (1.1)$$

Ez az állandó teremti meg a mennyiségi kapcsolatot a mikrovilág és a makroszkopikus testek fizikája között. Minden olyan képletben szerepet játszik, mely makroszkopikus tulajdonságokat ír le az atomok és molekulák tulajdonságainak alapján.

A XIX. század végén, az elektron felfedezése után kiderült, hogy az atom nem oszthatatlan, hanem belső struktúrával rendelkezik. Ezért, ha az atomot mégis az oszthatatlanság felől megközelítve akarják definiálni, azt szokták mondani, hogy az atom az anyag azon részecskéje, mely kémiai módszerekkel tovább nem osztható.





# 2

## Az elektron

### 2.1 Faraday törvényei az elektrolízisre

Faraday az 1830-as években kísérletileg vizsgálta az elektrolízis jelenségét. Az általa felállított mennyiségi törvények kapcsolatot teremtenek a mikrofizika világával, és segítségükkel meghatározható az elemi töltés nagysága.

Az első törvény szerint az elektrolízis folyamán kiválasztott anyagmennyiség az áthaladt töltéssel arányos,

$$m = kQ, \quad (2.1)$$

ahol a  $k$  az elektródon kivált anyagra jellemző állandó. A második törvény ennek az anyagállandónak az értékét adja meg

$$k = \frac{1}{F} \frac{A}{n}, \quad (2.2)$$

ahol  $A$  a kivált anyag atomtömege (móltömege),  $n$  a vegyértéke, míg  $F$  egy univerzális állandó, amit Faraday-állandónak neveztek el. Ennek értéke  $9,65 \cdot 10^7$  C/kmol.

Ha a két törvényt egyetlen képletbe foglaljuk össze

$$m = \frac{1}{F} \frac{A}{n} Q, \quad (2.3)$$

az így kapott összefüggést az atomelmélet alapján meg lehet magyarázni. Feltételezve, hogy minden ugyanazon elemhez tartozó ion ugyanannyi  $q$  töltést szállít, 1 kmol ion által elszállított töltés  $N_A q$  lesz. Az  $m$  tömegű ion kiválásával elszállított töltés

$$Q = \frac{m}{A} N_A q \quad (2.4)$$

lesz. Faraday második törvényéből következik, hogy az elszállított töltés arányos a vegyértékkal, ezért írhatjuk, hogy  $q = ne$ , ahol  $e$  az egyvegyértékű ion töltése. Így ebből az elméleti megfontolásból is eljutunk a Faraday törvényeit leíró képlethez

$$m = \frac{1}{N_A e} \frac{A}{n} Q, \quad (2.5)$$

ahol a Faraday-állandót két másik állandó szorzata helyettesíti.

Az elektrolízisnek a fent leírt értelmezése Stoney-tól származik (1874). Mivel az egyvegyértékű ion töltésénél kisebb töltést nem észleltek, ezt az elemi töltést Stoney először az elektromosság atomjának, majd elektronnak nevezte el. Értéke meghatározható két, már ismert állandó segítségével

$$e = \frac{F}{N_A} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}. \quad (2.6)$$

A fenti érték a mai ismereteinket tükrözi, a múlt század végén még nem ismerték kellő pontossággal az Avogadro-féle számot, de a nagyságrendeket már meg tudták becsülni.

## 2.2 Az elektron felfedezése

A múlt század kísérleti fizikusai sokat tanulmányozták a ritkított gázokban keltett elektromos kisüléseket. Azt észlelték nagy légritkítás esetén, hogy a negatív elektródból egy láthatatlan sugárzás lép ki, egyes anyagokon fluoreszcenciát okozva. Ezt elnevezték katódsugárzásnak. Hosszas kísérletezés után a katódsugárzás következő tulajdonságait állapították meg:

- a katódból lép ki, merőlegesen a katód felületére;
- egyenes vonalban terjed;
- mágneses térben eltéríthető;
- tulajdonsága független a katód anyagától;
- energiát és impulzust hordoz.

A katódsugarak természetét tekintve több feltevés fogalmazódott meg. Tekintették őket különleges elektromágneses hullámoknak és negatív molekulák áramának is. Végül 1897-ben J.J. Thomson adta meg a problémára a helyes választ: a katódsugárzás negatív töltésű részecskékből áll. Mivel a sugárzás természete független a katód anyagától, Thomson feltételezte, hogy ez a negatív részecske – amelyet elektronnak nevezett el – minden elem atomjának alkotórésze.

Egy töltött részecske fajlagos töltését a  $B$  indukciójú homogén mágneses mezőben leírt körpálya  $r$  sugarának segítségével meg lehet határozni, ha ismerjük a részecske  $v$  sebességét. A részecskére ható Lorentz-erő mindidig merőleges a részecske pályájára, tehát a centripetális erő szerepét fogja betölteni

$$\frac{mv^2}{r} = evB, \quad (2.7)$$

ahonnan

$$\frac{e}{m} = \frac{v}{rB}. \quad (2.8)$$

Thomson még 1897-ben az elektron fajlagos töltését két különböző módszerrel is meghatározta. Mindkettőnek alapja a mágneses mezőben való eltérítés mérése, azonban valamilyen módszerrel meg kellett határozni az elektronok sebességét.

Az első esetben mérte az elektronok által szállított töltést és energiát (ami a felfogó elektródra becsapódva hővé alakul), és így még egy egyenletet fel tudott írni az elektronok sebessége és fajlagos töltése között. A második (pontosabb) módszerrel az elektronokat egymásra merőleges elektromos és mágneses mezőbe vezette, amelyek ellentétes irányítású eltérítést okoztak. Ha úgy állítjuk be az  $E$  elektromos térerősség és a  $B$  mágneses indukció arányát, hogy a részecske ne szenvedjen eltérítést, az  $e\vec{E}$  és a  $-e\vec{v} \times \vec{B}$  erők egyenlőségéből a részecske  $v$  sebessége meghatározható

$$v = \frac{E}{B}. \quad (2.9)$$

Elvégezve most a mérést elektromos mező hiányában, a mágneses tér okozta eltérítésből és az elektron ismert sebességéből a fajlagos töltés meghatározható.

Így Thomsonnak sikerült az elektron fajlagos töltésének meghatározása, és azt kapta, hogy ez három nagyságrenddel nagyobb a  $H^+$  ion fajlagos töltésénél (pontosabb mérések szerint 1836-szor). Mivel feltételezése szerint az elektron az atom alkotórésze, kézenfekvőnek tűnt, hogy egy semleges atom elektron leadás útján válik pozitív ionná, tehát az elektron töltése ugyanakkora mint az egyszerűen töltött pozitív ioné, csak ellentétes előjelű. Így azt kapjuk, hogy az elektron tömege három nagyságrenddel kisebb a hidrogén atom tömegénél.

Az elektron fajlagos töltésének ma elfogadott értéke

$$\frac{e}{m} = 1,759 \cdot 10^{11} \frac{\text{C}}{\text{kg}}. \quad (2.10)$$

Felhasználva az elektron töltésének az értékét, az elektron tömegére  $9,1 \cdot 10^{-31}$  kg adódik, 1836-szor kisebb érték, mint a hidrogén ion tömege.

## 2.3 A fajlagos töltés meghatározása a parabolamódszerrel

A parabolamódszert az elektron fajlagos töltésének meghatározására Kaufmann vezette be először 1901-ben. Később Thomson ezt a módszert különböző ionok fajlagos töltésének meghatározására használta, ezért Thomson-féle parabolamódszernek is hívják. A módszer tárgyalásához először ismertetjük, hogyan térül el a töltött részecske homogén elektromos és mágneses mezőkben.

**Eltérítés homogén elektromos mezőben.** Az  $E$  intenzitású homogén elektromos mezőt sík kondenzátorlemezek segítségével hozzuk létre (2.1 ábra). A  $q$  töltésű,  $m$  tömegű részecske az erővonalakra merőlegesen lép be az elektromos mezőbe. Az elektrosztatikus erő következtében a részecskének

$$a = \frac{qE}{m} \quad (2.11)$$

nagyságú gyorsulása lesz az  $Oy$  tengely irányában. Az eltérítés mértéke a kondenzátorlemezekkel párhuzamosan mért  $d$  távolság megtétele után

$$y_1 = \frac{at^2}{2} = \frac{qE d^2}{2m v_0^2} \quad (2.12)$$

2.1. ábra: Elektron eltérítése homogén elektromos mezőben.

lesz, ahol  $v_0$  a részecske sebességének  $Ox$  irányú, állandó komponense, míg  $t = d/v_0$  az az idő, amíg a részecske a kondenzátor-lemezek között mozog.

Az elektromos mezőt elhagyva a részecske egyenesvonalú pályán halad, mely  $\alpha$  szöget zár be az eredeti mozgásiránnyal, majd a kondenzátorlemezekhez viszonyítva  $l$  távolságban lévő ernyőbe csapódik. A sebesség  $Oy$  irányú komponense ezen a szakaszon állandó

$$v_y = at = \frac{qE}{m} \frac{d}{v_0} \quad (2.13)$$

A háromszögek hasonlóságát felhasználva

$$\frac{v_y}{v_0} = \frac{y_2}{l}. \quad (2.14)$$

Innen az  $y_2$  eltérítésre

$$y_2 = \frac{qE}{mv_0^2} dl \quad (2.15)$$

adódik. Összegezve az  $y_1$  és az  $y_2$  eltérítést, az elektromos mező által okozott teljes eltérítés

$$y_E = y_1 + y_2 = \frac{qEd}{2mv_0^2}(d + 2l) \quad (2.16)$$

lesz.

**Eltérítés homogén mágneses mezőben.** A töltött részecske az erővonalakra merőlegesen lép be  $v_0$  sebességgel a  $B$  indukciójú homogén mágneses mezőbe (2.2 ábra).

A 2.7 egyenletből kifejezhető annak a körpályának a sugara, amelyen a részecske a mágneses mezőben mozogni fog

$$R = \frac{mv_0}{qB} \quad (2.17)$$

2.2. ábra: Az elektron eltérítése homogén mágneses mezőben.

Feltételezzük, hogy a mágneses mező  $d$  vastagsága sokkal kisebb, mint a körpálya sugara, ezért a mágneses mező kis  $\theta$  szögű eltérítést okoz. Ennek  $y_1$  lineáris eltérítés felel meg a mágneses mezőből való kilépéskor, ahol  $y_1 \ll R$ .

Felírva az  $OA'D$  háromszögben a Püthagorasz tételét

$$R^2 = (R - y_1)^2 + d^2. \quad (2.18)$$

Elvégezve a négyzetreemelést elhanyagoljuk az  $y_1^2$  tagot. Innen

$$y_1 \approx \frac{d^2}{2R}. \quad (2.19)$$

A mágneses teret elhagyva a részecske egyenesvonalú pályán mozog, majd becsapódik a mágneses tér szélétől  $l$  távolságban lévő ernyőbe. Az ábra alapján felírhatjuk, hogy

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{y_2}{l}; \quad \sin\theta = \frac{d}{R}; \quad \sin\theta \approx \operatorname{tg}\theta. \quad (2.20)$$

Innen az  $y_2$  eltérítésre

$$y_2 \approx \frac{ld}{R} \quad (2.21)$$

adódik. A mágneses tér okozta teljes eltérítés

$$y_B = y_1 + y_2 \approx \frac{d}{2R}(d + 2l) = \frac{qBd}{2mv_0}(d + 2l) \quad (2.22)$$

lesz.

2.3. ábra: A parabolamódszer.

**A parabolamódszer.** A részecskenyalábot egyidejűleg ugyanolyan méretű, egymással párhuzamos homogén elektromos és mágneses mezőbe vezetik (2.3 ábra). Az elektromos mező  $z$  irányú, míg a mágneses mező  $y$  irányú eltérítést okoz. Mivel az eltérítés mértéke függ a részecske sebességétől, és a nyalábben különböző sebességű elektronok találhatóak, az ernyőn nem egy pont, hanem egy görbe jelenik meg, amelynek különböző pontjaiba különböző sebességű részecskék csapódnak be.

Átírjuk a (2.16) és a (2.22) kifejezéseket

$$y_B = K \frac{qB}{mv_0} \quad (2.23)$$

$$z_E = K \frac{qE}{mv_0^2}, \quad (2.24)$$

majd kiküszöböljük innen a  $v_0$  sebességet

$$\frac{y_B^2}{z_E} = K \frac{e}{m} \frac{B^2}{E} \quad (2.25)$$

A számítások alapján az ernyőn megjelenő görbe parabola kell hogy legyen, mert

$$z_E = C y_B^2. \quad (2.26)$$

A részecske fajlagos töltése a (2.25) egyenletből a görbe bármely pontját felhasználva kiszámítható. Ezt a módszert nem használjuk pontos fajlagos töltés meghatározásra, mert az ernyőn az részecskék nyoma eléggé elmosódott.

**Az elektron tömegének függése a sebességtől.** A fent leírt módszerrel Kaufmann még a relativitáselmélet kidolgozása előtt megállapította, hogy az elektron tömege nő a sebesség növekedésével. Elektronforrásként egy radioaktív izotópot használt, amelyből

2.4. ábra: Az elektronnyaláb nyoma nemrelativisztikus (a) és relativisztikus (b) esetben.

a  $c$  fénysebességhez közeli sebességű elektronok is kilépnek. A méréseket kétszer egymás után végezte el úgy, hogy az elektromos térerősség irányítását ellentétesre változtatta. Azt várta, hogy két, egymást érintő parabolaívét kap (2.4a ábra). Ezzel szemben a 2.4b ábrán látható görbéket kapta. Látható, hogy a görbék nem folytatódnak az origóig, és meghosszabbításukhoz húzott érintők egymással  $2\alpha$  szöget zárnak be, nem érintik egymást, mint a parabolák. Mivel  $m \sim z_E/y_B^2$  és  $z_E/y_B$ -nek  $y_B = 0$ -ban véges értéke van,  $y_B \rightarrow 0$  (nagyon nagy sebességek) esetén az elektron tömege végtelen felé tart. Kaufmann mérési eredményei a hibahatáron belül jól egyeznek a ma jól ismert, relativisztikus tömegnövekedést megadó képlettel

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (2.27)$$

ahol  $m_0$  az elektron nyugalmi tömege.

## 2.4 Az elektron töltésének közvetlen meghatározása

Az elektron töltését közvetett módon az elektrolízisre vonatkozó Faraday-állandó értékéből lehetett kiszámítani. Millikan 1911-ben olyan kísérletet végzett el, melyből az elektron töltése közvetlenül, az Avogadro-szám ismerete nélkül volt meghatározható.

Millikan olajat porlasztott egy vízszintesen elhelyezkedő síkkondenzátor lemezei közé. A porlasztás következtében a cseppek elektromosan feltöltődtek, úgy, hogy leadtak vagy felvettek néhány elektront. A cseppek mozgását mikroszkóp segítségével lehet megfigyelni, és lehet mérni azt az időt, amíg a csepp megtesz egy adott távolságot, tehát különböző körülmények között meghatározható a cseppek sebessége.

Először, a csepp sugarának a meghatározása érdekében, a kiválasztott csepp mozgását csak tisztán gravitációs mezőben vizsgáljuk, nem kapcsolunk feszültséget a kondenzátorlemezekre. A cseppre a saját súlyán kívül hat az arkhimédészi felhajtóerő ( $F_A$ ) és a légellenállás ( $F_g$ , 2.5a ábra). A csepp, kis mérete miatt, nagyon gyorsan eléri a határsebességet, amikor a rá ható erők kiegyensúlyozzák egymást, így a csepp mozgása egyenletes lesz a megfigyelés alatt.

a)

b)

2.5. ábra: Az olajcseppekre ható erők elektromos tér hiányában (a) és elektromos térben (b).

Gömb alakú test levegőben való lassú mozgása esetén a légellenállási erőre a Stokes-képlet érvényes

$$F_g = 6\pi\eta r v_g, \quad (2.28)$$

ahol  $r$  a csepp sugara,  $v_g$  a sebessége, míg  $\eta$  a levegő belső surlódási (viszkózitási) együtthatója. Felírjuk a cseppekre ható erők egyensúlyi feltételét az egyenletes mozgás során

$$F_g = G - F_A, \quad (2.29)$$

ahonnan az olaj sűrűségét  $\rho$ -val és a levegő sűrűségét  $\rho_0$ -val jelölve a

$$6\pi\eta r v_g = \frac{4}{3}\pi r^3(\rho - \rho_0)g \quad (2.30)$$

összefüggésre jutunk. Innen meghatározható a csepp sugara

$$r = \sqrt{\frac{9v_g\eta}{2(\rho - \rho_0)g}}. \quad (2.31)$$

Ezek után rákapcsoljuk a feszültséget a kondenzátorlemezre. Olyan cseppet vizsgálunk, amely az elektrosztatikus erő hatására felfelé mozog. A testre ható négy erő, ebben az esetben is, egy nagyon rövid gyorsulási szakaszt leszámítva kiegyensúlyozza egymást (2.5b ábra)

$$F_E = G + F_k - F_A. \quad (2.32)$$

Az  $F_E$  elektrosztatikus erő és az  $F_k$  légellenállás képletét felhasználva és a  $G - F_A$  helyett (2.29)-ből  $F_g$ -t írva azt kapjuk, hogy

$$qE = 6\pi\eta r(v_g + v_E), \quad (2.33)$$



ahol  $E$  az elektromos térerősség és  $v_E$  az elektromos mező jelenlétében mért sebesség. Innen a csepp sugarának a kifejezését felhasználva a csepp töltése meghatározható

$$q = 9\pi \sqrt{\frac{2\eta^3}{(\rho - \rho_0)g}} \frac{\sqrt{v_g}}{E} (v_g + v_E). \quad (2.34)$$

A kondenzátorlemezek közötti levegőt röntgensugarakkal ionizálva a csepp töltése megváltozik. Így a mérés ugyanannak az olajcseppnek a különböző töltésállapotaira elvégezhető. Ezenkívül a mérést más, különböző sugarú cseppekre is elvégezték. Az eredmény egyértelmű volt: az olajcsepp töltése mindig egy legkisebb érték, az elemi töltés egész számú többszöröse. Evvel Millikan bebizonyította, hogy a töltés nem folytonosan változó, hanem kvantált mennyiség. Mivel a csepp feltöltődése elektronleadással vagy felvétellel történik, a legkisebb észlelt töltésváltozás az elektron töltésének nagyságával azonosítható. Ennek az elemi töltésnek az értéke

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}. \quad (2.35)$$

Mindazonáltal, nagyon kis méretű cseppek esetén a fenti képletből számított töltés nagyobbak adódik az  $ne$  értéknél. Ennek oka az, hogy a Stokes-képlet nagyon kis cseppek esetén nem érvényes. A légellenállást megadó képlet javított változata szerint

$$F_g = \frac{6\pi\eta r v_g}{1 + A\frac{\lambda}{r}}, \quad (2.36)$$

ahol  $\lambda$  a levegőmolekuláinak átlagos szabad úthossza,  $A$  pedig egy állandó. A méréseket különböző nyomáson elvégezve az  $A$  állandó kiküszöbölhető. Evvel a korrekcióval az olajcsepp töltése most már minden esetben pontosan az elemi töltés egész számú többszörösének adódik.

## 2.5 Az elektron elektromágneses tömege és sugara

Az elektron méretéről a mai napig sincsenek pontos adatok. A szórási kísérletek eredményeinek döntő többsége (még nagyon nagy energián is) azt sugallja, hogy az elektron pontszerű részecske.

Ez a feltételezés azonban ellentmond a klasszikus elektrodinamikának. Az elektron töltése következtében elektrosztatikus, vagy ha mozgásban van, elektromágneses mezőt hoz létre. Ez a mező energiát hordoz, amelynek forrása az elektron. A tömeg-energia ekvivalencia következtében az elektronnak elektromágneses eredetű tömeggel kell hogy rendelkeznie.

Az elektron által létrehozott elektrosztatikus mező energiáját a

$$W_e = \int \frac{\varepsilon_0 E^2}{2} dV \quad (2.37)$$

képlettel tudjuk kiszámítani, ahol  $E$  a generált tér erőssége,  $\varepsilon_0$  a légüres tér permittivitása, és az integrált a teljes térre kell kiterjeszteni. Feltételezzük, hogy a töltés csak a gömb alakúnak tekintett elektron felületén helyezkedik el. Ekkor

$$\begin{aligned} E &= 0 & \text{ha } r < R \\ E &= \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r^2} & \text{ha } r \geq R, \end{aligned}$$

ahol  $R$  az elektron feltételezett sugara. A (2.37) integrál így szférikus koordinátákat használva egyszerűen kiszámítható

$$W_e = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_R^\infty \frac{\varepsilon_0}{2} \frac{e^2}{16\pi^2\varepsilon_0^2 r^4} r^2 dr = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}. \quad (2.38)$$

A fenti eredmény nem változik meg lényegesen, ha másfajta töltésselosztást tételezünk fel. Például homogén töltéssűrűséget tételezve fel az elektron belsejében a képletben az  $1/2$  szorzó helyett  $3/5$  fog szerepelni. Ezért, mivel a valódi töltésselosztást nem ismerjük, nagyságrendi következtetések levonásakor a képlet előtti szorzót el szokták hanyagolni

$$W_e \approx \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}. \quad (2.39)$$

Mivel az elektron léte klasszikusan egy  $W_e$  energiájú mező létének feleltethető meg, az elektron nyugalmi energiájának legalább  $W_e$ -nek kell lennie. Az elektron nyugalmi tömegének azt a részét, amely elektromágneses eredetű, elektromágneses tömegnek hívjuk

$$m_e = \frac{W_e}{c^2} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R c^2} \quad (2.40)$$

Lehetséges, hogy az elektromágneses eredetű tömegén kívül az elektronnak más belső tulajdonságokból adódó, intrinszek tömege ( $m_i$ ) is van. Ekkor az elektron teljes, kísérletileg is mérhető tömege két tag összegeként írható fel

$$m = m_e + m_i \quad (2.41)$$

Ha feltételezzük, hogy  $m_i = 0$ , akkor  $m_e = m$ , és az elektron sugarának értéke az elektron tömegének ismeretében (2.40)-ből megbecsülhető

$$R_e = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m c^2} = 1,7 \cdot 10^{-15} \text{m}. \quad (2.42)$$

Az így kapott értéket nevezzük az elektron klasszikus elektromágneses sugarának.

Ha az elektronnak intrinszek tömege is van ( $m_i > 0$ ), akkor az elektron sugara  $R > R_e$ . Ha megengedjük, hogy  $m_i < 0$  (bármit jelentsen is ez), akkor azt kapjuk, hogy  $R < R_e$ . Egyes kísérletek arra utalnak, hogy az elektron sugara kisebb, mint az elektromágneses sugár, más kísérletek (pl. fotonokkal való kölcsönhatás) az  $R_e$  nagyságrendjébe eső sugarat adnak.

Annak ellenére, hogy a klasszikus elektromágneses sugár egy gyakorlati jelentőséggel rendelkező mennyiség, nem jelenthetjük ki, hogy ennyi az elektron sugara. Az elektron stabilitása természetesen nem magyarázható meg a klasszikus elektrodinamika alapján, de a modern kvantumtérelmélet sem oldja meg közvetlenül a problémát. Ha elfogadjuk, hogy az elektronban lévő elektomos töltésnek valamilyen (folytonos vagy diszkrét) struktúrája van, léteznie kéne egy, a Coulomb-kölcsönhatásnál erősebb vonzó kölcsönhatásnak, amely összetartja az elektront. Ennek az elképzelésnek azonban egyelőre nincs semmilyen kísérleti vagy elméleti alapja. Mai tudásunk szerint az elektron struktúra nélküli elemi részecske, a leptonok családjába sorolható be.

# 3

## Az atomok tömege és mérete

### 3.1 Atomtömegegység

A kémiai reakciókban résztvevő elemek és vegyületek tömegét mérve következtetni lehet a különböző elemek atomjainak relatív tömegeire. Az elemek növekvő atomtömeg szerinti rendezése már a XIX. században sikerült, ennek alapján alkotta meg Mengyelejev a periódusos rendszert. A legkisebb tömegű atom, a hidrogénatom tömegét tekintették egységnek, ennek függvényében fejezték ki a kémikusok a többi atom tömegét. Olyan megfontolásból, amelyre később e fejezet keretén belül visszatérünk, ma atomtömegegységnek (*amu*–*atomic mass unit*) a szén 12-es izotópja tömegének 1/12-ed részét tekintjük, amely néhány ezrelékkal eltér a hidrogénatom tömegétől

$$1 \text{ amu} = m_{C^{12}}/12. \quad (3.1)$$

Az atomtömegegység és a kilogramm közötti átalakítási kulcsot az Avogadro-szám szolgáltatja, mivel értelmezés szerint 1 kilomól (Avogadro-számnyi) atom tömege annyi kg, ahány atomtömegegység egyetlen atom tömege

$$1 \text{ amu} = \frac{1 \text{ kg/kmol}}{N_A} = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}. \quad (3.2)$$

Századunk elején már úgy a relatív atomtömegek, mint az Avogadro-szám elég pontosan ismert volt, így egy elem atomjainak a tömegét meg lehetett határozni. Az ilyen jellegű, makroszkopikus méréseken alapuló tömegmeghatározás az illető elem atomjainak átlagos tömegét szolgáltatja. Ezekből az eredményekből nem derül ki az, hogy egy adott elem atomjai mind azonos tömegűek-e vagy sem. Ennek eldöntése érdekében olyan módszert kell használni, amely az atomok tömegét egyénileg méri.

### 3.2 Az atomok tömegének közvetlen mérése. Izotópok

Soddy már 1907-ben felfedezte, hogy egyes radioaktív bomlásokban keletkező atomok bár kémiaileg azonos módon viselkednek, de különböző radioaktív tulajdonsággal rendelkeznek. Ezeket az atomokat izotópoknak (azonos helyen levőknek) nevezte el. Tömegük meghatározásával nem foglalkozott.

3.1. ábra: A Thomson-féle parabolamódszernél használt berendezés.

Az egyes atomok tömegének a közvetlen mérését Thomson végezte el először 1912-ben, a már tárgyalt parabolamódszer alkalmazásával. Ahhoz, hogy egy atom tömegét olyan elv alapján határozzuk meg, mint az elektronét (tehát elektromos és mágneses mezőben való eltérítéssel), az atomot ionizálni kell. Thomson ionforrásként kisnyomású kisülési csövet használt, amilyen a katódsugárzás forrása is volt. Ebben az esetben azonban a katódon egy nyílást vágnak, amely egy csőben folytatódik. A katód felé haladó pozitív ionok egy része áthalad a csövön, ahonnan kilépve elektromos és mágneses mezőbe vezethetők, viselkedésük tanulmányozható. Az ily módon létrehozott ionnyalábot csősugárzásnak hívjuk. A csősugarakat ugyanolyan kiterjedésű, egymással párhuzamos homogén elektromos és mágneses mezőbe vezette, amelyek egymásra merőleges eltérítést okoznak (3.1 ábra). Az ionok egy fluoreszkáló ernyőbe csapódnak be, ahol, amint azt a 2.3 fejezetben levezettük, a különböző sebességű részecskék egy parabolát fognak kirajzolni.

Ahhoz, hogy az ionok fajlagos töltése a parabola adatai segítségével meghatározható legyen, meg kell hogy szerkeszteni a koordinátatengelyeket. Ennek érdekében a mágneses tér irányítását a mérés során ellenkezőjére változtatják, így szimmetrikus parabolaívek jelennek meg (3.2 ábra). Ezek segítségével meg lehet szerkeszteni a tengelyeket és meg lehet határozni a csősugarakban található ionok fajlagos töltését.

Thomson a méréseket neon gázra végezte el, és az egyszeresen töltött ionok által létrehozott parabolákat vizsgálta. Amint a 3.2 ábrán látható, 2 szimmetrikus parabolaívet kapott. Ebből azt a következtetést lehet levonni, hogy két különböző tömegű neon atom (izotóp) létezik. A mérések 20 és 22 hozzávetőleges atomtömegű izotópokat mutattak ki. A parabolaívek intenzitásából meghatározható a gázt alkotó izotópok aránya is. A természetes neon gázban Thomson 91%  $Ne^{20}$ -as izotópot és 9%  $Ne^{22}$ -es izotópot talált. Ezekből az adatokból ki lehet számítani a neon átlagos atomtömegét

$$A_{Ne} = 0,91 \cdot 20 + 0,09 \cdot 22 = 20,18. \quad (3.3)$$

Az így kapott érték jól egyezik a más módszerekkel mért átlagos atomtömeggel.

3.2. ábra: A szimmetrikus parabola-párok.

Az atomok tömegét közvetlenül mérve kiderült, hogy a kémiai elemek nagy többsége több izotóp keveréke. Ezek kémiai módszerekkel nem, de különböző fizikai módszerekkel (pl. difúzió vagy elektromágneses térben való eltérítés segítségével) szétválaszthatók.

A fent leírt módszer az atomok tömegének közvetlen mérésére minőségi áttörést jelentett, de a parabolaívек elmosódottsága vagy gyenge fényereje miatt nem alkalmas pontos tömegmeghatározásra.

### 3.3 Tömegspektrográfok és tömegspektrométerek

A tömegspektrográfok és tömegspektrométerek az atomok tömegének a pontos mérésére és az anyagok összetételének vizsgálatára kifejlesztett készülékek. Alapelvük az ionizált atomok elektromos és mágneses mezőben való eltérítése. Ezeket a mezőket úgy alakítják ki, hogy fókuszálják az ionnyalábot, nagyobb pontosságot és intenzitást eredményezve.

A tömegspektrográfoknak fő jellemzője az, hogy az ionokat fényképezőlemezen regisztrálják, és az így nyert fényképet dolgozzák fel. Ionforrásként a tömegspektrográfban általában a kisülési csöveket használják. A csősugarakat szűk diafragmákon való áthaladás segítségével párhuzamossá teszik. Az ionnyalábnak ez a leszűkítése gyenge ionintenzitást fog eredményezni. A csősugarakban különböző sebességű ionok találhatóak, külön probléma annak megvalósítása, hogy ezek az eltérítés után egy pontban találkozzanak a fényképezőlemezen (sebességfókuszálás). A fényképezőlemez feketedésének mértéke arányos lesz a vizsgált ionfajta koncentrációjával, de pontos koncentrációmérésre ez a módszer nem alkalmas.

Tömegspektrométerek esetén az ionokat Faraday-kalitkával gyűjtik össze, majd az így nyert elektromos jelet elektronsokszorozóval és más elektronikus erősítőfokozatokkal erősítik, és mérik az intenzitását. Az elektromos vagy a mágneses tér erősségét változtatva mindig egy adott fajlagos töltésű ion kerül a Faraday-kalitkába, és a nyert elektromos jel intenzitása arányos lesz az illető ion koncentrációjával. Így pontos mennyiségi

### 3.3. ábra: Az Aston-féle tömegspektrográf.

analízist (koncentrációmérést) lehet végezni, azonban az izotóp tömege a kalitka véges mérete miatt nem határozható meg nagy pontossággal.

A tömegspektrométereknél az ionokat általában a vizsgált anyag párologtatásával (szilárd halmazállapotú próba esetén) vagy elektronyalábbal való ütköztetéssel (gázok esetén) nyerik, amely módszerek igen kis mozgási energiájú ionokat eredményeznek. Ezeket az ionokat elektromos mezőben gyorsítva gyakorlatilag monoenergetikus ionnyalábot nyernek. A nagy ionintenzitás megőrzése érdekében a széttartó nyalábot nem szűkítik le diafragmákkal, hanem elektromos vagy mágneses mező segítségével összetartóvá alakítják, mely a Faraday-kalitkán fókuszálódik (irányfókuszálás).

A tömegmérés pontosságát a felbontóképességgel szokták jellemezni

$$R = \frac{M}{\Delta M}, \quad (3.4)$$

ahol  $M$  az atom tömegét, és  $\Delta M$  a legkisebb észlelhető tömegkülönbséget jelenti. A Thomson-féle parabolamódszer felbontóképessége 600 körül van, míg egy jó spektrográf felbontóképessége eléri a több tízezret.

**Az Aston-féle tömegspektrográf.** Az Aston-féle tömegspektrográfban az ionokat csősugárzásból nyerik. Ezeket először homogén elektromos mezőben térítik el egy kis szöggel, majd mágneses mező segítségével is, az ellenkező irányba (3.3 ábra). A két ellentétes irányú eltérítést be lehet úgy állítani, hogy a berendezés sebességfókuszálást valósítson meg a megfelelőképpen elhelyezett fényképezőlemezen. Az azonos fajlagos töltésű de különböző sebességű ionok így a lemez egyazon pontján találkoznak.

**A Bainbridge-féle tömegspektrográf.** Az eltérítést ebben az esetben homogén mágneses mezővel valósítják meg, amelyben az ionnyaláb félkört ír le a fényképezőlemezen való becsapódásig (3.4 ábra).

Az eltérítést okozó mágneses térbe való belépés előtt az ionok egy egymásra merőleges elektromos és mágneses tér segítségével megvalósított sebességszűrőn haladnak át, amely (amint azt az elektron fajlagos töltésének meghatározásánál is láttuk) csak a  $v = E/B$  sebességű ionokat engedi át.

3.4. ábra: A Bainbridge-féle tömegspektrográf.

3.5. ábra: A Dempster-féle tömegspektrométer.

Az elvileg egyszerű Bainbridge-féle tömegspektrográffal elég pontos méréseket lehet végezni. Technikai megvalósítása nem a legegyszerűbb, mivel nagy méretű, erős elektromágneset igényel.

**A Dempster-féle tömegspektrométer.** A 3.5 ábrán felvázolt Dempster-féle tömegspektrométer első ránézésre hasonló elven működik, mint a Bainbridge-féle tömegspektrográf, tehát a homogén mágneses mező  $180^\circ$ -os eltérítést okoz. Azonban lényeges különbségek vannak.

A párologtatással nyert, gyakorlatilag elhanyagolható mozgási energiájú ionokat  $U$  feszültségű elektromos mező segítségével  $v = \sqrt{2Uq/m}$  sebességre gyorsítják. Mivel a Faraday-kalitka, amely segítségével az adott fajlagos töltésű ionokat felfogják, rögzített, mindig azokat az ionokat fogják fel, amelyek mágneses mezőben egy adott sugarú körpályán mozognak. Változtatva a gyorsítófeszültséget más és más fajlagos töltésű ionokat lehet a Faraday-kalitkába juttatni, és így mindegyik ionfajtának a koncentrációját meg lehet határozni az adott próbából.

A gyorsítás nyomán a tömegspektrométerbe enyhén széttartó nyaláb kerül. Be lehet bizonyítani, hogy  $180^\circ$ -os eltérítés után a nyaláb ismét hozzávetőlegesen egy pontban egyesül, így a nyaláb divergenciája nem rontja le lényegesen a felbontóképességet (irányfókuszálás). Itt jegyezzük meg, hogy az irányfókuszálást más szögeltérítésű homogén mágneses mezővel is meg lehet valósítani (pl.  $60^\circ$  a Nier-féle tömegspektrométernél).

**A Bainbridge-Jordan-féle tömegspektrográf.** A Bainbridge-Jordan-féle tömegspektrográfot nagy pontosságú atomtömeg-mérésre használják. A készülék kettős fókuszálást valósít meg (3.6 ábra). Az ionnyalábot először egy hengerkondenzátor által keltett elektromos mező készíti körpályára. Mivel a kondenzátoron áthaladó ionok

3.6. ábra: A Bainbridge-Jordan tömegspektrográf vázlata.

pályájának  $R$  sugara adott, a kondenzátorból csak adott energiájú ionok lépnek ki.

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2}qER, \quad (3.5)$$

ahol  $E$  az elektromos térerősség a kondenzátor középvonalán. A hengerkondenzátor  $\pi/\sqrt{2}$  rad =  $127^{\circ}17'$  nyílásszögű, mert a széttartó nyaláb a hengerszimmetrikus elektromos mezőben ilyen szög leírása után fókuszálódik. Ezután a nyalábot  $60^{\circ}$ -os nyílásszögű, körcikk alakú homogén mágneses mező bontja fel a fajlagos töltések szerint és fókuszálja ismét a fényképezőlemezre. Ennek a tömegspektrográfnak igen nagy a nyalábintenzitása (csökkenthető az expozíciós idő), és jó a felbontóképessége (6000 és 15000 között).

**Az atomok tömegének pontos meghatározása. A dublett módszer.** A tömegspektrográfok az atomok tömegét közvetlenül, abszolút módszerrel kb.  $10^{-4}$  pontossággal képesek meghatározni. Az abszolút mérések esetében a tömeg kiszámításához fel kell használnunk az elektromos és mágneses mező intenzitásának értékét, amely az inhomogenitások miatt nem adható meg egészen pontosan. Nagyobb pontossággal tudják meghatározni az atomok relatív tömegét, mert igen kis eltérítés-különbségek is kimutathatók, amelyeket át lehet transzformálni tömegkülönbséggé.

Mivel a tömegek pontos ( $10^{-7}$  relatív pontosságú) értékét csak összehasonlító módszerrel tudják meghatározni, fontos az atomok közül egy etalont választani, és ahhoz viszonyítani a többi atom tömegét. Mivel a szén nagyon könnyen alkot különböző vegyületeket, sok összehasonlító mérést lehet vele végezni, és ennek leggyakoribb izotópja a 12-es, a  $C^{12}$  izotópot választották etalonnak, ennek értelmezés szerint a tömege



3.7. ábra: Az atomok egy köbös kristályrácásban.

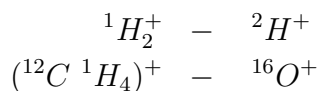
3.8. ábra: A geometriai ütközési hatás-keresztmetszet.

pontosan 12 atomtömegegység (amint azt a 3.1 fejezetben már láttuk). A többi atom pontos tömegét ezen izotóp tömegével összehasonlítva lehet megadni.

A dublett módszer lényege, hogy olyan ionokat keresnek, amelyeknek fajlagos töltése csak nagyon kis mértékben tér el egymástól, ezért a fényképezőlemezeken két igen közeli vonalat (dublettet) adnak. A dublett egyik tagjának a tömegét pontosan ismerve a másiké is nagy pontossággal meghatározható. Tekintsük pl. a következő, kb.  $e/6$  amu fajlagos töltésű dublettet



ahol a kétszeresen töltött szén iont hasonlítjuk össze a három deutérium atomból álló, egyszeresen ionizált molekulával. A  $\text{C}^{12}$  tömegét pontosan ismerjük, innen a deutériumé meghatározható. Továbbá a



dublettekből a  $\text{H}^1$  és az  $\text{O}^{16}$  tömege számítható ki, és a sor folytatható.

### 3.4 Az atomok mérete

Szilárd testek esetén az Avogadro-szám, a sűrűség és az atomtömeg ismeretében megbecsülhető két atom centruma közötti távolság. Mivel a szilárd testek gyakorlatilag összenyomhatatlanok, úgy tekintjük, hogy ezekben az atomok szorosan egymás mellett, egymást „érintve” helyezkednek el. Az egyszerűség kedvéért köbös rendszerben kristályosodó anyagot vizsgálunk. Ekkor minden gömb alakú atom egy-egy kockába írható be (3.7 ábra), melyek szabályosan elhelyezkedve teljesen kitöltik a teret. Ha

az anyag sűrűségét  $\rho$ -val, egy atom tömegét  $m$ -el, az általa elfoglalt kocka térfogatát  $V = d^3$ -al jelöljük, felírhatjuk, hogy

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{A}{N_A d^3}, \quad (3.6)$$

ahol  $A$  a móltömeg. Innen a kocka élhossza, vagy két szomszédos atom centruma közötti távolság

$$d = \sqrt[3]{\frac{A}{\rho N_A}} \quad (3.7)$$

A számítást pl. alumíniumra elvégezve, amelyre  $A = 27 \text{ kg/kmol}$  és  $\rho = 2,7 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ , a  $d$ -re  $2,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$  adódik. Ez a becslés alapján tehát az alumínium atom sugara  $1,2 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,2 \text{ \AA}$ . Más atomfajták esetén is hasonló nagyságrendű eredményre jutunk.

Az atomok méretét gáz halmazállapotban is meg lehet határozni az atomok ütközésének tanulmányozása alapján. Tekintsünk egy gázmennyiséget, melynek minden atomja egyforma, és ezek koncentrációja  $n_{\text{cél}}$ . Az egyszerűség kedvéért legyenek ezek az atomok nyugalomban. Bombázzuk ezt a gázt egy másfajta atomokból álló nyalábbal, melyek fluxusa  $\Phi$ . Fluxus alatt itt a nyaláb merőleges keresztmetszetének egységnyi területén egységnyi idő alatt áthaladó részecskék számát értjük. Azok a lövedék-atomok, amelyek ütköznek a célgáz atomjaival, eltérnek eredeti pályájukról. A térfogat-egységben időegység alatt lejátszódó ütközések számát jelöljük  $n_{\text{ütk}}$ -el. Ez a mennyiség kísérletileg meghatározható az eltérített atomok kimutatása vagy a nyaláb fluxusa gyengülésének mérése útján. Az ütközés valószínűségét egy terület jellegű fizikai mennyiséggel, az ütközési hatáskeresztmetszettel jellemezzük. Ez értelmezés szerint

$$\sigma = \frac{n_{\text{ütk}}}{\Phi n_{\text{cél}}} \quad (3.8)$$

Könnyen belátható, hogy ha az atomokat merev gömböknek tekintjük, amelyek csak akkor lépnek kölcsönhatásba egymással, ha érintkeznek, a hatáskeresztmetszet annak a körnek a területével lesz egyenlő, amelyen belül a lövedéknek haladnia kel, hogy érinkezésbe lépjen a céltárggyal (3.8 ábra). Ez a geometriai hatáskeresztmetszet közvetlen összefüggésbe hozható az atomok sugarával

$$\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2. \quad (3.9)$$

Az atomok sugarára vonatkozó becslés érdekében Born a lövedéknyaláb intenzitás-csökkenését figyelte meg. A kísérletben ezüst atomokat párologtatott légüres térben, majd az ezekből álló nyalábot különböző ritkított gázokon vezette keresztül. A nyaláb fluxusának a gyengülése  $dx$  távolságon

$$d\Phi = -n_{\text{ütk}} dx = -\Phi \sigma n_{\text{cél}} dx. \quad (3.10)$$

Ezt integrálva azt kapjuk, hogy a fluxus egy exponenciális függvény szerint csökken

$$\Phi = \Phi_0 e^{-\sigma n_{\text{cél}} x}. \quad (3.11)$$

Ezt az exponenciális csökkenést Born a különböző távolságokra elhelyezett diafragmákon kicsapódott ezüst mennyiségével mutatta ki. A csökkenés mértékéből a hatáskeresztmetszet kiszámítható. Több célgázra és lövedéktípusra elvégezve a méréseket meg lehet határozni az egyes atomok geometriai sugarát. Ez, akár csak a szilárd halmazállapotban történő becslésnél,  $10^{-10}$  m nagyságrendűnek adódik.

Azonban megfigyelték azt, hogy az így meghatározott atomsugár a részecskék relatív sebességével csökken. Ez a tény azt sugallja, hogy az atomok nem tekinthetők merev gömböknek, hanem nagyobb sebesség esetén egymásba hatolhatnak. Ezért egy atomot nem jellemezhetünk általánosságban egy jól meghatározott atomsugárral, csak ennek egy hozzávetőleges értékével. Ennek oka az, hogy nincs pontosan definiálva az atom határfelülete. A hatáskeresztmetszet egy jól meghatározott mennyiség marad, de mivel ennek értéke függ az ütközés energiájától, nem tekinthető egyenlőnek a geometriai hatáskeresztmetszettel.



# 4

## Klasszikus atommodellek. A magmodell

J.J. Thomson az elektron felfedezése után tisztázta, hogy az elektron minden elem univerzális alkotórésze. Ezért kimondhatjuk, hogy minden atom tartalmaz elektronokat. Mivel az elektronok negatív töltésűek, és az atomok általában semlegesek, az atomoknak valamilyen formában pozitív töltéseket is kell tartalmazniuk. Ezeknek a tényeknek az alapján már a századfordulón különböző modelleket állítottak fel az atomok belső struktúrájának leírására.

### 4.1 A Thomson-modell. Atomok bombázása elektronokkal

A legkézenfekőbb modellt J.J Thomson állította fel 1904-ban. A Thomson-modell szerint az atomok egy pozitív töltésű masszából állanak és ebbe beágyazva foglalnak helyet az elektronok. Mivel az elektronok tömege csekély az atom tömegéhez viszonyítva, az atom tömegének döntő részét a pozitív massa teszi ki. Ezt a modellt szemléletes ábrája alapján mazsolás puding modellnek is hívják (4.1 ábra). E modell keretén belül elképzelhető, hogy az elektronokat valamilyen úton rezgésbe lehet hozni, minek következtében elektromágneses sugárzást fog kibocsátani, amely megmagyarázhatja a gerjesztett atomok fénykibocsátását. A modell egyszerű, és nem mond ellent a klasszikus fizikának. Helyességét valamilyen jól megválasztott kísérlettel kell ellenőrizni. Kézenfekvő az atomoknak különböző típusú és energiájú részecskékkel való bombázása, amelyek behatolhatnak az atomba. Ezeknek az eltérítését vizsgálva következtetéseket lehet levonni az atom belső szerkezetére vonatkozóan.

Elektronokkal bombázva különböző gázok atomjait mérték a teljes ütközési hatáskeresztmetszetet (pl. az elektronnyaláb intenzitásának a csökkenésével, mint az előző fejezetben az atomnyaláb esetén). Arra a következtetésre jutottak, hogy az ütközési hatáskeresztmetszet kb. a sebesség negyedik hatványával csökken. Pl. levegő esetén 400 eV energiájú ( $v = 1,2 \cdot 10^7$  m/s = 0,04  $c$  sebességű) elektronokat használva a hatáskeresztmetszet  $\sigma = 2,7 \cdot 10^{-20}$  m<sup>2</sup>-nek adódik, hasonló nagyságrendűnek mint atomok közötti ütközéseknél. Világos, hogy ezen az energián az elektron nem hatol

#### 4.1. ábra: Az atom Thomson-modellje

át az atomon. Viszont gyors elektronokkal végezve a kísérletet, a hatáskeresztmetszet jóval kisebb lesz. Így  $v = 0,9c$  sebesség esetén  $\sigma = 2,88 \cdot 10^{-26} \text{ m}^2$  értékű hatáskeresztmetszetet mértek. Tehát az ennek megfelelő energián az elektronok gyakorlatilag eltérítés nélkül áthatolhattak az atomon, csak néhány térült el, amit meg lehet magyarázni az elektronokkal való ütközéssel.

Ennek a kísérletnek az eredményei összeegyeztethetők a Thomson-moddellel, de nem támasztják egyértelműen alá azt. Ezért az atom szerkezetének feltárására további kísérletekre is szükség van.

## 4.2 Atomok bombázása alfa részecskékkel. A bolygómodell

A Thomson-moddellel szemben Rutherfordnak az volt az elképzelése, hogy az atom egy kis méretű központi magból, és a körülötte keringő elektronokból áll. Annak érdekében, hogy eldöntsék, melyik modell helyes, Rutherford azt javasolta, hogy az atomot olyan nehéz részecskékkel bombázzák, melyeket az elektronok nem képesek észrevehetően eltéríteni, csak a nagy tömegű pozitív töltés. Ennek az eltérítésnek a jellegéből aztán következtetni lehet a pozitív töltés méretére.

Kézenfekvőnek tűnt az atomokat alfa részecskék segítségével szondázni. Az  $\alpha$  részecskék  $+2e$  töltésű és 4 amu tömegű részecskék (ma tudjuk, hogy ezek hélium atommagok), amelyeket egyes radioaktív elemek bocsátanak ki meghatározott (4–9 MeV közötti) energiával. Rutherford javaslatára Geiger és Marsden  $\alpha$  részecskékkel bombáztak vékony fémlémezt (4.2 ábra). A radioaktív anyag által kibocsátott  $\alpha$  részecskéket egy keskeny, ólom lemezen vágott nyílás segítségével gyakorlatilag párhuzamos nyalábbá szűkítik. Ezek a részecskék egy igen vékony fémlémezre (leggyakrabban

#### 4.2. ábra: A Rutherford-féle szórási kísérlet.

aranylemezre) esnek. Azért lényeges, hogy a lemez vékony legyen, hogy egy  $\alpha$  részecske nagy valószínűséggel csak egy atommagon szenvedjen szóródást. A lemez mögé egy forgatható,  $ZnS$  ernyőt helyeztek, melyen az  $\alpha$  részecskék fényfelvillanásokat (szcintillációt) okoznak. A kísérletezők a lemez által szórt  $\alpha$  részecskék szögeloszlását mérték.

Azt találták, hogy a legtöbb részecske gyakorlatilag irányváltoztatás nélkül haladt át a lemezen, elég sok kis szöggel szóródott, de néhány egész nagy szögű, akár  $180^\circ$ -os szórást is szenvedett. Ha a Thomson-modellt tételezzük fel helyesnek, akkor a sok eltérítetlen lövedék csak úgy magyarázható, hogy az  $\alpha$  részecskék áthatolnak a pozitív masszán. Belátható azonban, hogy ezek a nagy (atomi méretű) pozitív töltések nem hoznak létre elég erős elektromos mezőt ahhoz, hogy a részecskéket nagy szögben szórják.

Ahhoz, hogy a nagy szögű szórásokat megmagyarázzák, fel kellett tételezni, hogy az atommagban a pozitív töltés az atom méreténél jóval kisebb térfogatba összpontosul, így jóval erősebb elektromos teret hoz létre. Ez a modell, amelynek lényege az, hogy az atom egy kis méretű pozitív magból és a körülötte lévő elektronokból áll, az atom magmodellje (4.3 ábra). Ez a modell máig is érvényesnek tekinthető.

Rutherford az atomban lévő elektronokról feltételezte, hogy úgy keringenek a mag körül, ahogy a Naprendszer bolygói a Nap körül. Ezért Rutherford modelljét bolygómodellnek is hívják. Ebben a modellben,  $r$  sugarú körpályát tételezve fel, az elektron potenciális energiája a mag terében

$$E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (4.1)$$

ahol  $Z$  a rendszám. A mozgási energia felírásához felhasználjuk, hogy a centripetális erő szerepét a Coulomb-erő tölti be

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (4.2)$$

4.3. ábra: Az atom magmodellje.

tehát

$$E_c = \frac{mv^2}{2} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (4.3)$$

Az elektron teljes energiája, mivel kötött állapotban van, negatív lesz

$$E = E_c + E_p = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (4.4)$$

Ez a képlet a klasszikus fizikában is csak a hidrogén atomra vagy a hidrogénszerű ionokra érvényes pontosan, több elektront tartalmazó atomok esetén figyelembe kell venni az elektronok egymás közötti kölcsönhatását is.

## 4.3 A Rutherford-szórás

Ebben a fejezetben részletesen megvizsgáljuk, hogyan szóródnak az  $\alpha$  részecskék az atom térfogatánál jóval kisebb térfogatú, pozitív töltésű atommagokon. A levezetés során a következő feltételezéseket tesszük:

- az elektronok nem térítik el az  $\alpha$  részecskéket;
- az atommag jóval nagyobb tömegű, mint az  $\alpha$  részecske, ezért az atommagot rögzítettnek tekintjük; (Az  $Au$  atommag kb. 50-szer nagyobb tömegű, mint az  $\alpha$  részecske.)
- a vizsgált  $\alpha$  részecske csak egy atommagon szóródik;
- az atommag és az  $\alpha$  részecske szórás közben nem „érintkezik”, közöttük csak az elektrosztatikus taszítóerő hat; így ezek a részecskék pontszerűnek tekinthetők.



4.4. ábra: A Rutherford szórás.

Tudjuk azt, hogy az  $1/r$  szerint csökkenő göbszimmetrikus taszító potenciálban egy részecske mindig hiperbola alakú pályán mozog. Minket a Rutherford-szórás elméleti tanulmányozásánál csak az aszimptotikus állapotok érdekelnek, ezért nem használjuk fel a pálya konkrét alakját. A 4.4 ábrán az  $N$  pont a rögzítettnek tekintett atommagot jelöli,  $b$  pedig az ütközési paraméter, amely a szórt részecske pályájának az aszimptotája és a szórócentrum közötti távolság.  $\theta$  a szóródási szög, míg  $\phi$  a lövedék helyzetét jellemző változó poláris szöget jelöli, amelyet a pálya szimmetriatengelyéhez viszonyítva mérünk.

A részecskének a szórás alatti impulzusváltozását az  $F$  taszítóerő okozza

$$\Delta\vec{p} = \vec{p}_2 - \vec{p}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{F} dt, \quad (4.5)$$

ahol  $\vec{p}_1$  és  $\vec{p}_2$  az aszimptotikus impulzusokat jelentik az ütközés előtt illetve után. Mivel közelítésünkben a mag nyugalomban marad, a lövedék mozgási energiája, és így impulzusának modulusza is a magtól elég nagy távolságra ugyanaz marad

$$p_2 = p_1 = mv, \quad (4.6)$$

ahol  $v$  az  $\alpha$  részecske aszimptotikus (magtól távoli) sebessége.

Az impulzusok háromszögében felírva a szinusztételt

$$\frac{\Delta p}{\sin \theta} = \frac{mv}{\sin \frac{\pi - \theta}{2}}, \quad (4.7)$$

majd felhasználva, hogy

$$\sin \frac{\pi - \theta}{2} = \cos \frac{\theta}{2} \quad \text{és} \quad \sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}, \quad (4.8)$$

az impuzusváltásra azt kapjuk, hogy

$$\Delta p = 2mv \sin \frac{\theta}{2}. \quad (4.9)$$

Másrészt, mivel a 4.5 egyenletből kifolyólag az  $\int \vec{F} dt$  vektor iránya megegyezik a  $\Delta \vec{p}$  irányával, elég, ha az integrálnak a kiszámításánál csak az  $\vec{F}$  erőnek a  $\Delta \vec{p}$ -vel párhuzamos komponensét ( $F \cos \phi$ ) vesszük figyelembe (az erre merőleges komponensek integrálja nulla lesz). Így a 4.5 és 4.9 egyenletekből azt kapjuk, hogy

$$2mv \sin \frac{\theta}{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} F \cos \phi dt \quad (4.10)$$

A  $t$  integrálási változó helyett bevezetjük a  $\phi$ -t.

$$dt = \frac{dt}{d\phi} d\phi = \frac{1}{\omega} d\phi, \quad (4.11)$$

ahol az  $\omega$  a részecske szögsebessége. A szögsebességet az  $L$  impulzuszóránymomentum segítségével fejezzük ki

$$L = m\omega r^2, \quad (4.12)$$

amely megmaradó mennyiség. Az aszimptotikus állapotra felírva

$$L = mvb, \quad (4.13)$$

ahonnan

$$\omega = \frac{vb}{r^2}. \quad (4.14)$$

Bevezetjük a 4.10 integrálba a 4.11 változócsereét

$$2mv^2 b \sin \frac{\theta}{2} = \int_{-\frac{\pi-\theta}{2}}^{\frac{\pi-\theta}{2}} F r^2 \cos \phi d\phi \quad (4.15)$$

Esetünkben a két,  $Ze$  és  $Z_\alpha e$  töltésű részecske között ható erő

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_\alpha Z e^2}{r^2}. \quad (4.16)$$

Ezt behelyettesítjük az előbbi integrálba és átvisszük az állandókat a bal oldalra

$$\frac{8\pi\epsilon_0 m v^2}{Z_\alpha Z e^2} b \sin \frac{\theta}{2} = \int_{-\frac{\pi-\theta}{2}}^{\frac{\pi-\theta}{2}} \cos \phi d\phi = 2 \cos \frac{\theta}{2}. \quad (4.17)$$

Innen megkapjuk a szórási szöget az ütközési paraméter függvényében

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = \frac{8\pi\epsilon_0 E_\alpha b}{Z_\alpha Z e^2}, \quad (4.18)$$

ahol  $E_\alpha$  az alfa részecske aszimptotikus mozgási energiája.

4.5. ábra: A  $d\Omega$  térszög és a hatáskeresztmetszet geometriai kapcsolata.

A fenti képletet azonban nem lehet közvetlen módon kísérletileg is ellenőrizni, mert az ütközési paramétert nem lehet megmérni, csak a szóródási szöget. Annak érdekében, hogy az elméleti modellt közvetlenül hasonlítsuk össze a kísérleti adatokkal, az alfa részecskék szóródását statisztikailag vizsgáljuk.

Feltételezzük, hogy egy kiválasztott szórócentrumra egyenletes intenzitású részecskenyaláb esik. A  $\theta$  és  $\theta + d\theta$  közötti szögintervallumba szórt részecskék a hengerszimmetria miatt

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta \quad (4.19)$$

térszögben fognak mozogni. (Az ütközési paraméter elhanyagolható ahhoz a távolsághoz képest, ahol a részecskéket detektáljuk.) A 4.5 ábrán látható, hogy azok a részecskék szóródnak a  $d\Omega$  térszögbe, melyek ütközési paramétere  $b$  és  $b + db$  között van. Így a  $d\Omega$  térszögbe szórást jellemző differenciális hatáskeresztmetszet az ábrán besatírozott terület, tehát

$$d\sigma = 2\pi b db \quad (4.20)$$

lesz.

A 4.18 kifejezést differenciálva

$$db = -\frac{Z_\alpha Z e^2}{8\pi\epsilon_0 E_\alpha} \frac{1}{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta \quad (4.21)$$

felírhatjuk a differenciális hatáskeresztmetszetet a  $\theta$  függvényében

$$d\sigma = 2\pi \frac{1}{2} \left( \frac{Z_\alpha Z e^2}{8\pi\epsilon_0 E_\alpha} \right)^2 \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} |d\theta|}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (4.22)$$

Felhasználva, hogy

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta = 2\pi \cdot 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta, \quad (4.23)$$

a hatáskeresztmetszetet szokásosan, a térszög differenciáljával fejezhetjük ki

$$d\sigma = \frac{1}{4} \left( \frac{Z_\alpha Z e^2}{8\pi\epsilon_0 E_\alpha} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (4.24)$$

Közvetlenül mérhető mennyiség a detektorba az időegység alatt az egységnyi felületre beérkező részecskék száma

$$N(\theta) = \frac{dN}{dS} = \frac{N_\alpha n_0 D d\sigma}{dS}, \quad (4.25)$$

ahol  $N_\alpha$  az időegység alatt beérkező lövedékek száma,  $n_0$  a szórócentrumok (atommagok) koncentrációja,  $D$  a lemez vastagsága. Felhasználva még, hogy  $d\Omega/dS = 1/r^2$ , ahol  $r$  a lemez és a detektor közötti távolság, a Rutherford szórási képlethez jutunk, amely a detektált részecskék számát fejezi ki a szórási szög függvényében

$$N(\theta) = \frac{N_\alpha n_0 D}{4r^2} \left( \frac{Z_\alpha Z e^2}{8\pi\epsilon_0 E_\alpha} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (4.26)$$

A kísérleti adatok teljes mértékben alátámasztották a fenti képletet. Ebből azt a következtetést lehetett levonni, hogy a szórás során az  $\alpha$  részecske és az atommag nem „érintkeznek”, közöttük csak a Coulomb-féle taszítóerő lép fel. Ehhez az atommag sugarának (pontosabban a  $\alpha$  részecske és a mag sugarai összegének) megfelelően kicsinek kell lennie. A legnagyobb energiájú természetes eredetű alfa részecskék, melyekkel a kísérleteket végezték, 7,7 MeV-osak voltak. Egy ilyen energiájú részecske frontális ütközés esetén egy  $Z$  rendszámú atommagot  $r_{\min} = Z \cdot 3,8 \cdot 10^{-16}$  m-re közelít meg. Arany atommag esetén, amelyre a Rutherford szórási képlet érvényes,  $r_{\min} = 3 \cdot 10^{-14}$  m. Azt mondhatjuk, hogy az arany atommag sugara  $R_{Au} < 3 \cdot 10^{-14}$  m.

Később a kísérleteket elvégezték mesterségesen nagyobb energiára gyorsított  $\alpha$  részecskékkel is, és azt találták, hogy egy bizonyos energia fölött a Rutherford szórási képlet már nem érvényes. Ugyanezt a jelenséget észlelték akkor is, ha a szórási kísérleteket kisebb rendszámú atomokon végezték el. Ennek oka az, hogy ezekben az esetekben a lövedék annyira megközelíti az atommagot, hogy más típusú erők, a magerők is működésbe lépnek az alfa részecske és az atommag között.

Végül azt mondhatjuk, hogy az atommag mérete 4-5 nagyságrenddel kisebb az atom átmérőjénél. Általában  $R_{\text{mag}} = 1,3 \cdot 10^{-15} A^{1/3}$  m, ahol  $A$  a tömegszám.

## 4.4 A bolygómodell hiányosságai

A Rutherford által felállított atommodellben az atommag körül található elektronok kör vagy ellipszis pályán keringenek, tehát állandóan gyorsuló mozgást végeznek. A klasszikus elektrodinamika szerint egy gyorsuló mozgást végző töltött részecskének sugározni kell. A kibocsátott elektromágneses sugárzás energiája a részecske energiáját csökkenti. Így a klasszikus fizika szerint egy, az atommag körül lévő elektronnak állandóan sugározni kéne, és energiacsökkenése következtében mind közelebb kéne

hogy kerüljön az atommaghoz. A teljesítmény, amellyel egy  $a$  gyorsulással mozgó elektron sugároz

$$P = \frac{e^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}, \quad (4.27)$$

ahol  $c$  a fénysebesség. Körpályán mozgó elektronra a (4.2) alapján

$$a = \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2} \quad (4.28)$$

Hidrogénatom esetén, ahol  $r = 5,29 \cdot 10^{-11}$  m, az elektron által az első pillanatban kisugárzott teljesítmény

$$P = 4,6 \cdot 10^{-9} \text{W} = 2,9 \cdot 10^{10} \text{ eV/s} \quad (4.29)$$

lenne. Ahogy az elektron energiavesztesége következtében közeledik a maghoz, a kisugárzott teljesítmény  $r^4$ -el fordított arányban növekedne. A számítások azt mutatják, hogy a klasszikus fizika szerint a hidrogén atom elektronja  $10^{-16}$  s elteltével, egy spirális alakú pálya végén belezuhanna az atommagba.

Ez a jóslat természetesen ellentmond a mindennapi tapasztalatnak. Először is az atomok nagyon ritkán bocsátanak ki elektromágneses sugárzást, másrészt pedig az atomok stabil struktúrák: egy nem perturbált atom korlátlan ideig fennmarad anélkül, hogy bármilyen módon energiát veszítene. Azt a következtetést kell levonnunk, hogy a klasszikus fizika nem érvényes az atomokon belül mozgó elektronokra.



# 5

## Az elektromágneses hullámok részecsketermészete

A XIX. század végén több kísérleti adatot, tapasztalatot nem tudtak a klasszikus fizika segítségével megmagyarázni. Ezeknek a jelenségeknek a tanulmányozása a fény kettős (hullám és részecske) természetének feltételezéséhez, és végül a kvantummechanika megalkotásához vezetett.

### 5.1 A feketetest hőmérsékleti sugárzása

A tapasztalat szerint minden test elektromágneses sugárzást bocsát ki magából, melynek jellege a test egyes jellemzőitől (szín, visszaverőképesség), és a hőmérsékletétől függ. Ezt hőmérsékleti sugárzásnak hívjuk. Ugyanakkor a testek el is nyelik a rájuk eső sugárzás egy részét. Termodinamikai megfontolásokból következik, hogy a sugárzó-képesség és elnyelőképesség aránya minden testnél ugyanakkora.

A hőmérsékleti sugárzás elméleti tanulmányozásához bevezetünk egy sajátos modellt, az abszolút fekete testet. Ez definíció szerint minden rá eső sugárzást elnyel. Ezért (a sugárzó-képesség és az elnyelőképesség állandó aránya következtében), adott hőmérsékleten az abszolút fekete test nagyobb intenzitással sugároz minden más testnél. A gyakorlatban az abszolút fekete test tulajdonságait megközelíti egy nagy méretű zárt doboz oldalán vágott kis nyílás: ez gyakorlatilag minden rá eső sugárzást elnyel. Fontos, hogy a doboz belsejében az elektromágneses sugárzás termikus egyensúlyban legyen a doboz falaival. Ez az egyensúlyi hőmérséklet lesz az abszolút fekete test hőmérséklete.

A mennyiség, amelyet a következőkben tanulmányozni fogunk, a sugárzás spektrális energiasűrűsége. Ezt az egységnyi térfogatra és az egységnyi frekvencia-vagy hullámhossztartományra vonatkoztatjuk

$$\rho_\nu = \frac{d^2W}{dV d\nu}; \quad \rho_\lambda = \frac{d^2W}{dV d\lambda}. \quad (5.1)$$

Termodinamikai megfontolások alapján be lehet bizonyítani a Kirchhoff-törvényt, amely kimondja, hogy a feketetest által kisugárzott sugárzás spektrális sűrűsége univerzális függvénye a frekvenciának és a hőmérsékletnek

$$\rho_\nu d\nu = F(\nu, T) d\nu. \quad (5.2)$$

5.1. ábra: A feketetest-sugárzás spektrális energiasűrűsége a frekvencia függvényében.

Szintén általános termodinamikai megfontolások alapján vezették le a Wien-törvényt, amely szűkíti a lehetséges függvények osztályát

$$\rho_\nu d\nu = \nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu. \quad (5.3)$$

Az  $f(\nu/T)$  függvény alakja kísérletileg meghatározható. Az 5.1 ábrán látható a két különböző hőmérsékletre felrajzolt kísérleti görbe.

A múlt század végi fizikusok számára komoly kihívás volt ennek a függvénynek az elméleti levezetése. Annak érdekében, hogy a függvény konkrét alakját megkapják, valamilyen feltételezéssel kellett élniük a sugárzás-kibocsátás mechanizmusára. Ha valaki ily módon a kísérlettel egyező képletet talál, nagy valószínűséggel rátalált arra a módra, ahogyan az atomok sugárzást bocsátanak ki.

A Wien-törvényből az  $f(\nu/T)$  függvény konkrét alakja nélkül is két fontos, kísérletileg ellenőrizhető összefüggés vezethető le. Az első a Stefan-Boltzmann törvény, amely a sugárzás teljes energiasűrűségére vonatkozik

$$u = \int_0^\infty \rho_\nu d\nu = \int_0^\infty \nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu. \quad (5.4)$$

Elvégezve az  $x = \nu/T$  behelyettesítést azt kapjuk, hogy a  $T$  hőmérsékletű abszolút fekete testtel egyensúlyban lévő sugárzás energiasűrűsége az abszolút hőmérséklet negyedik hatványával arányos

$$u = T^4 \int_0^\infty x^3 f(x) dx = \alpha T^4. \quad (5.5)$$



Ha a feketetest egységnyi felülete által egységnyi idő alatt kibocsátott ( $c$  sebességgel terjedő) elektromágneses sugárzás energiáját fejezzük ki, akkor megkapjuk a Stefan-Boltzmann törvényt

$$\Phi = uc = \alpha cT^4 = \sigma T^4, \quad (5.6)$$

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

A másik egyszerűen levezethető törvény a Wien-féle eltolódási törvény. Ez a hullámhossz szerinti spektrális energiasűrűségre vonatkozik. Felhasználva, hogy

$$\rho_\nu d\nu = -\rho_\lambda d\lambda; \quad \nu = \frac{c}{\lambda} \quad \text{és} \quad d\nu = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda \quad (5.7)$$

azt kapjuk, hogy

$$\rho_\lambda d\lambda = \frac{c^4}{\lambda^5} f\left(\frac{c}{\lambda T}\right) d\lambda. \quad (5.8)$$

Az eltolódási törvény a  $\rho_\lambda$  függvény maximumának a helyét adja meg. Ennek meghatározása érdekében a függvény  $\lambda$  szerinti deriváltját egyenlővé tesszük nullával, ahonnan az  $\eta = \frac{c}{\lambda T}$  jelölés bevezetésével azt kapjuk, hogy

$$5f(\eta) + \eta f'(\eta) = 0. \quad (5.9)$$

A fenti egyenletet az  $f(\eta)$  függvény konkrét alakjának ismerete nélkül nem tudjuk megoldani, de feltételezzük, hogy van egy megoldás, amit  $C'$ -vel jelölünk, és ez egy adott állandó mennyiség. Ha  $\lambda_{\max}$ -al jelöljük azt a hullámhosszat, amelyre a spektrális energiasűrűségnek maximuma van, akkor

$$\frac{c}{\lambda_{\max} T} = C', \quad (5.10)$$

ahonnan megkapjuk a Wien-féle eltolódási törvényt

$$\lambda_{\max} T = C, \quad (5.11)$$

vagyis nagyobb hőmérsékleten a spektrum maximuma alacsonyabb hullámhosszak felé tolódik el. A  $C$  állandó kísérleti értéke  $2,898 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$ .

A továbbiakban bemutatjuk, milyen próbálkozások születtek a spektrális energiasűrűséget megadó univerzális függvény levezetésére. A XIX. század végén Rayleigh és Jeans egy zárt dobozban található, a doboz falaival egyensúlyban lévő elektromágneses sugárzás modelljével dolgoztak. A zárt térben található sugárzás akkor van egyensúlyban, ha állóhullámokat alkot. Ha az üreg egy  $L$  élhosszúságú kocka, akkor az  $x$ ,  $y$  és a  $z$  irányokba terjedő állóhullám esetén a  $2L$  és a hullámhossz hányadosa egész szám kell hogy legyen

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{2L}{\lambda_x} = 1, 2, 3 \dots \\ j_y &= \frac{2L}{\lambda_y} = 1, 2, 3 \dots \\ j_z &= \frac{2L}{\lambda_z} = 1, 2, 3 \dots \end{aligned} \quad (5.12)$$

5.2. ábra: Az állóhullám kialakulása.

Ha egy tetszőleges,  $\theta_x$ ,  $\theta_y$  és  $\theta_z$  irányszögekkel jellemzett irányba terjedő hullámra írjuk fel a feltételt, akkor az 5.2 ábra alapján meg kell figyelniünk azt, hogy ahhoz, hogy az  $S$  felületre beeső hullám és a visszavert hullám az  $A$  pontban kioltsa egymást, fenn kell állnia az

$$L \cos \theta_x = j_x \frac{\lambda}{2} \quad (5.13)$$

egyenlőségnek. Ugyanezt a kifejezést az  $y$  és  $z$  irányokra is felírva, és figyelembe véve, hogy

$$\cos^2 \theta_x + \cos^2 \theta_y + \cos^2 \theta_z = 1, \quad (5.14)$$

a következő feltételt kapjuk

$$j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 = \left( \frac{2L}{\lambda} \right)^2, \quad (5.15)$$

ahol

$$\begin{aligned} j_x &= 0, 1, 2 \dots \\ j_y &= 0, 1, 2 \dots \\ j_z &= 0, 1, 2 \dots \end{aligned} \quad (5.16)$$

A következőkben meghatározzuk, hogy hány állóhullám alakulhat ki a  $\lambda$  és a  $\lambda + d\lambda$  hullámhossz-intervallumban. Ennek érdekében az állóhullámokat a  $j_x$ ,  $j_y$  és  $j_z$  tengelyek által alkotott fázistérben ábrázoljuk, ahol minden pontnak egy lehetséges állóhullám felel meg (5.3 ábra). Az állandó hullámhosszúsággal jellemzett állóhullámok ebben a térben egy

$$j = \sqrt{j_x^2 + j_y^2 + j_z^2} = \frac{2L}{\lambda} \quad (5.17)$$

sugarú gömbfelület első nyolcadán helyezkednek el. Nagy  $j$  esetén, amikor a hullámhossz jóval kisebb az üreg méreténél, a  $j$ -t folytonos változónak lehet tekinteni. Ekkor azok az állóhullámok, melyeknek hullámhossza  $\lambda$  és  $\lambda + d\lambda$  intervallumban van, a  $j$  és

5.3. ábra: A  $j$  fázistér pontjai.

a  $j + dj$  sugarú nyolcad gömbfelületek között helyezkednek el a fázistérben. Ezeknek a száma

$$N(j)dj = \frac{1}{8}4\pi j^2dj = \frac{\pi}{2}j^2dj. \quad (5.18)$$

Felhasználva a 5.17 kifejezést, és azt, hogy

$$dj = -\frac{2L}{\lambda^2}d\lambda, \quad (5.19)$$

ezt a számot felírhatjuk a hullámhossz függvényében is

$$N(\lambda)d\lambda = -N(j)dj = \frac{4\pi L^3 d\lambda}{\lambda^4}. \quad (5.20)$$

Az eddigi számításoknál nem vettük figyelembe, hogy egy állóhullámnak két egymásra merőleges polarizációs iránya lehet. Ez a tény megkétszerezi az állóhullámok számát  $N'(\lambda) = 2N(\lambda)$ . Elosztva ezt az üreg térfogatával megkapjuk az egységnyi térfogatra eső,  $\lambda$  és  $\lambda + d\lambda$  hullámhossz-intervallumban lévő állóhullámok számát

$$n(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi d\lambda}{\lambda^4}. \quad (5.21)$$

Az eddigi levezetés nem tartalmazott semmi olyan feltételezést, amely ma nem állná meg a helyét. Azonban a továbbiakban, amikor Rayleigh és Jeans a spektrális

5.4. ábra: A feketetest-sugárzás spektrális energiasűrűsége a különböző elméletekben.

energiasűrűséget fejezték ki, egy olyan feltételezéssel éltek, amely csak folytonos energiaeloszlás esetén érvényes, az energia ekvipartíció elvét használták fel. Ennek a klasszikus fizikában érvényes tételnek értelmében egy oszcillátor két szabadsági fokára összesen  $\epsilon = kT$  energia jut ( $k$  a Boltzmann-állandó), a hullámhossztól (frekvenciától) függetlenül. Evvel a feltételezéssel a spektrális energiasűrűségre a következő képlet adódik

$$\rho_\lambda d\lambda = \epsilon n(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi kT d\lambda}{\lambda^4}, \quad (5.22)$$

vagy a frekvencia függvényében

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT d\nu}{c^3}. \quad (5.23)$$

A fenti képletek a Rayleigh-Jeans sugárzási törvényt fejezik ki. A spektrális energiasűrűségnek az így kapott értékeit összehasonlítva a kísérleti adatokkal (5.4 ábra), azt látjuk, hogy csak nagy hullámhosszakra kapunk egyezést. A rövid hullámhosszakon tapasztalható nagyméretű eltérést a XIX. század végén ibolyántúli katasztrófa néven emlegették.

Az elletmondás feloldása végett Wien feltételezte, hogy az energia-ekvipartíció elve a sugárzásra nem érvényes. E helyett úgy vette, hogy a sugárzó energia eloszlása a különböző frekvenciák között hasonló a gázmolekulák Maxwell-féle sebességeloszlásához. Így jutott el a Wien-féle sugárzási törvényhez

$$\rho_\lambda d\lambda = \frac{c_1}{\lambda^5} \exp\left(-\frac{c_2}{\lambda T}\right) d\lambda. \quad (5.24)$$

Amint az a 5.4 ábrán is látható, ez a törvény csak kis hullámhosszakra érvényes.

Ilyen előzmények után Planck 1900-ban empirikus úton egy olyan összefüggést írt fel, mely egyezett a kísérleti tapasztalattal. Ahhoz, hogy ezt a képletet elméleti úton is megindokolja, avval a feltételezéssel kellett élnie, hogy az elektromágneses állóhullámok (oszcillátorok) csak olyan energiaállapotban lehetnek, mely egész számú

többszöröse egy legkisebb,  $\epsilon_0$  energiának. Ezekre az energiákra érvényes a Boltzmann-féle statisztikai eloszlás, tehát egy  $E_n$  energiájú állapot valószínűsége az  $\exp(-E_n/kT)$  faktorial arányos, ahol  $E_n = n\epsilon_0$ . Egy adott  $\nu$  frekvenciájú oszcillátor átlagos energiája ennek alapján

$$\bar{E} = \frac{\sum n\epsilon_0 \exp\left(-\frac{n\epsilon_0}{kT}\right)}{\sum \exp\left(-\frac{n\epsilon_0}{kT}\right)} \quad (5.25)$$

lesz. A fenti hányadost felírjuk úgy, mint a logaritmus deriváltját, a végtelen mértani sort összegezzük, majd elvégezzük a deriválást

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \epsilon_0 \frac{d}{d\left(-\frac{\epsilon_0}{kT}\right)} \ln\left(1 + e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}} + e^{-\frac{2\epsilon_0}{kT}} + \dots\right) \\ &= \epsilon_0 \frac{d}{d\left(-\frac{\epsilon_0}{kT}\right)} \ln \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\epsilon_0}{kT}\right)} = \frac{\epsilon_0}{\exp\left(-\frac{\epsilon_0}{kT}\right) - 1}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Innen

$$\rho_\lambda d\lambda = \bar{E} \frac{8\pi}{\lambda^4} d\lambda = \frac{8\pi\epsilon_0}{\lambda^4} \frac{1}{\exp\left(-\frac{\epsilon_0}{kT}\right) - 1} d\lambda \quad (5.27)$$

és

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2\epsilon_0}{c^3} \frac{1}{\exp\left(-\frac{\epsilon_0}{kT}\right) - 1} d\nu. \quad (5.28)$$

Annak érdekében, hogy ez az összefüggés kielégítse az (5.3) törvényt, fel kell tételeznünk, hogy  $\epsilon_0$  arányos a frekvenciával

$$\epsilon_0 = h\nu, \quad (5.29)$$

ahol  $h$  egy univerzális állandó. Így megkapjuk a kísérleti adatokkal pontosan egyező Planck-féle sugárzási törvényt

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}. \quad (5.30)$$

A  $h$  univerzális állandót Planck-féle állandónak hívjuk. Ennek kísérletileg meghatározott értéke  $6,626 \cdot 10^{-34}$  Js.

Így végül Planck arra a következtetésre jutott, hogy az elektromágneses sugárzás kibocsátása és elnyelése csak  $h\nu$  energiaadagokban történhet. Ezt a minimális mennyiséget energiakvantumnak nevezte el. Az 1900-ban bevezetett energiakvantum fogalma volt az alapja a később megalkotott, az atomfizikában alapvető szerepet játszó kvantummechanikának.

## 5.2 A fényelektromos hatás. A foton

A múlt század végén egy másik jelenség, amelyet a klasszikus fizika szerint nem tudtak értelmezni, a fényelektromos hatás volt. A külső fényelektromos hatás lényege az, hogy

5.5. ábra: A fényelektromos hatás vizsgálata fotocellával.

ha egy fémlapot megfelelő frekvenciájú fényel megvilágítunk, akkor az elektronokat bocsát ki magából.

A fényelektromos hatás mennyiségi tanulmányozásához az 5.5 ábrán látható légritkított csövet (fotocellát) lehet használni. Az anód és a katód között keletkező (a kibocsátott fotoelektronok által szállított) áram erősségét az elektródok közé kapcsolt feszültség és a katódot megvilágító fény frekvenciája és intenzitása függvényében vizsgálták. Ezen mérések alapján állították fel a fényelektromos hatás törvényeit.

Az 5.6 ábrán az áramerősséget a feszültség függvényében ábrázoltuk, különböző intenzitású, de azonos frekvenciájú fény esetén. Az  $U_s$  zárófeszültség a kibocsátott fotoelektronok maximális energiájának a mértéke ( $E_e = eU_s$ ), míg a nagyobb pozitív feszültségeken beálló telítési áramerősség (ennek megfelelően minden kibocsátott elektron eljut az anódra) az időegység alatt kibocsátott elektronok számával arányos.

A fényelektromos hatás **első törvénye** azt modja ki, hogy a telítési áramerősség egyenesen arányos a katódra érkező fény fluxusával. A **második törvény** szerint a zárófeszültség értéke csak a fény frekvenciájától függ, az intenzitásától nem (5.6 és 5.7 ábra). A zárófeszültség, és így az elektronok maximális energiája is lineárisan nő a fény frekvenciájával (5.8 ábra). Másképp, a sugárzás intenzitása a fotoelektronok számára van hatással, energiájára nem, míg a kibocsátott elektronok maximális energiája csak a fény frekvenciájától függ. A fény hullámelmélete nem képes magyarázatot adni ezekre a tényekre.

A fényelektromos hatás **harmadik törvénye** kiegészíti a másodikat: létezik egy, a katód anyagára jellemző küszöbfrekvencia, mely alatt nem jön létre a fényelektromos hatás. A **negyedik törvény** pedig azt mondja ki, hogy fényelektromos hatás a megvilágítás kezdetekor azonnal (kevesebb mint  $3 \cdot 10^{-9}$  s után) jelentkezik. Erre az azonnali jelentkezés magyarázatára sem képes a hullámelmélet. Ezen elmélet szerint az elektronnak hosszú időn keresztül kéne gyűjtenie a sugárzás energiáját ahhoz, hogy képes legyen kilépni a fémből. Egyes klasszikus számítások szerint ez az idő az egy évet

5.6. ábra: Az áramerősség a feszültség függvényében különböző intenzitású de azonos frekvenciájú fény esetén.

5.7. ábra: Az áramerősség a feszültség függvényében különböző frekvenciájú fény esetén.

5.8. ábra: Az elektron maximális energiájának és a megvilágító fény frekvenciájának a kapcsolata.

is elérheti!

Nyilvánvaló, hogy a fényelektromos hatáskor a fénynek egy olyan tulajdonsága jelentkezik, amelyet a klasszikus hullámelmélet nem vett figyelembe. A fényelektromos hatás magyarázatát Einstein adta meg 1905-ben.

Kiindulva Planck elméletéből, hogy az elektromágneses sugárzás csak  $h\nu$  energiaadagokban bocsátódik ki és nyelődik el, Einstein feltételezte, hogy ez a kvantálás terjedés közben is megmarad, vagyis bizonyos körülmények között a fény úgy viselkedik, mintha  $h\nu$  energiájú részecskékből állana. Ezeket a fényt alkotó részecskéket fotonnak nevezték el.

Mivel a foton teljes energiája  $E = h\nu$ , a tömeg-energia ekvivalencia szintén Einstein-féle képletéből ( $E = mc^2$ ) kifejezhetjük a foton mozgási tömegét

$$m = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda}. \quad (5.31)$$

A foton egy fénysebességgel mozgó részecske, így impulzusa

$$p = mc = \frac{h}{\lambda}. \quad (5.32)$$

A foton csak  $c$  sebességgel mozoghat, nyugalomban (vagy  $c$ -nél kisebb sebességnél) nem létezik. Ez abból következik, hogy fénysebességgel mozogva véges a mozgási tömege (ellentétben a szokásos részecskéktől), és a

$$m_0 = m\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (5.33)$$

képletbe  $v = c$ -t írva a nyugalmi tömeg  $m_0 = 0$ -nak adódik.

Ez a fotonelmélet látszólagos ellentmondásban van a fény elektromágneses hullám jellegével amit számos kísérleti tény (interferencia, diffrakció, polarizáció) támaszt alá. A megoldást a kvantummechanika nyújtja. E szerint a fény kettős (részecske és hullám) természetű, és a kísérleti berendezéstől függ, melyik jelleg kerül előtérbe.

A fotonelmélet segítségével a fényelektromos hatás magyarázata igen egyszerű. Egy foton, a fémbe elnyelődve teljes energiáját egy elektronnak adja át, amely ennek hatására kiléphet a fémbe. Felírva ennek a folyamatnak az energiamérlegét, az Einstein-képlethez jutunk

$$h\nu = L + E_e. \quad (5.34)$$

Itt  $L$  a kilépési munka, vagyis az elektronnak a fémbe való kilépéséhez szükséges energia. Ez a képlet azonnal megmagyarázza az elektron  $E_e$  energiájának lineáris függését a frekvenciától. A minimális frekvenciát, amelyre még a fényelektromos hatás létrejön, avval a feltételezéssel kapjuk meg, hogy a kilépő elektron energiája elhanyagolható

$$h\nu_0 = L. \quad (5.35)$$

A kilépési munka, és így a küszöbfrekvencia is, egy, a fémre jellemző állandó.

Az első törvény magyarázata is kézenfekvő: a fény intenzitása a fotonok számával arányos, és ezzel lesz arányos a fotonok által kiütött elektronok száma is. A fotonok és elektronok energiája nem fog függeni a fény intenzitásától.

A fényelektromos hatás kísérleti vizsgálata és a 5.34 képlet segítségével határozható meg kísérletileg igen egyszerűen a Planck-állandó számértéke.



5.9. ábra: A röntgenső.

### 5.3 A röntgensugárzás

Az előbbi fejezetben láttuk, hogy a fényelektromos hatás során a foton teljes energiáját egy elektronnak adja át. Felvetődik a kérdés, lehetséges-e a fordított folyamat, vagyis hogy egy elektron energiája egy részének rovására fotont hozzon létre.

Ezt a jelenséget Röntgen fedezte fel 1895-ben. Az általa X-sugaraknak elnevezett sugárzás akkor keletkezik, amikor a nagy energiájú elektronok becsapódnak egy fém felületébe. A 5.9 ábrán látható légritkított cső elektródjai közé több tízezer volt feszültséget kapcsolnak. A fűtött katód által kibocsátott, nagy energiára felgyorsított elektronok becsapódnak az antikatódnak nevezett fémfelületbe. A keletkezett X (vagy Röntgen) sugárzás az antikatód felületét elhagyva kilép a csőből. Azt észlelték, hogy ez a sugárzás különösen penetráns, sok anyagon áthalad, amin pl. a látható fény nem. Észlelni annak alapján lehet, hogy megfeketíti a fényképező lemezt, fluoreszcenciát okoz és ionizálja a gázokat. Megállapították, hogy az elektromos és a mágneses mező nem téríti el az X-sugarakat, tehát ezek nem hordoznak elektromos töltést.

Azt, hogy a röntgensugarak elektromágneses természetűek, már a felfedezésük után feltételezték. Ugyanis a klasszikus elektrodinamika szerint, ha egy mozgó töltés lefékeződik, akkor elektromágneses hullámokat bocsát ki. Kézenfekvőnek tűnt, hogy a röntgensugarak elektromágneses jellegűek, amelyek az elektronok fémbe való lefékeződése miatt keletkeznek, csak jóval rövidebb hullámhosszúságúak, mint a látható fény.

Ezt a feltételezést később több kísérleti eredmény támasztotta alá.

Az első, Barkla kísérlete (1906), bebizonyította azt, hogy a röntgensugarak polarizálhatók, tehát transzverzális hullám természetűek. A kezdetben polarizálatlan röntgensugarak grafitra esnek, amely szórja a sugarakat (5.10 ábra). A szórás úgy történik, hogy az elektromágneses sugárzás az elektromos tér rezgési irányával párhuzamos rezgésre kényszeríti az elektronokat, majd ezek a rezgési irányukra merőlegesen másodlagos sugárzást bocsátanak ki. Így a merőleges irányba szórt sugárzás lineárisan

5.10. ábra: A Barkla-kísérlet vázlata.

polarizált kell hogy legyen. Ezt a tényt egy második polarizáló közeg segítségével lehet ellenőrizni. Ha a polarizált sugárzás szóródását ismét merőleges irányba vizsgáljuk a polarizációs irányhoz viszonyítva  $\theta$  szög alatt kilépő sugarak esetén, a polarizáció elméletéből ismert  $\sin^2 \theta$ -val arányos intenzitáseloszlást kell hogy kapjunk.

A kísérleti eredmények jól egyeztek az így megjósolt intenzitáseloszlással, tehát bizonyítást nyert, hogy a röntgensugarak transzverzális hullámok. Most már azt a feltételezést kellett bizonyítani, hogy hullámhosszuk jóval kisebb a látható fény hullámhosszánál.

A hullámhossz meghatározását az optikából átvett módszerekkel, diffrakció és interferencia létrehozásával lehet elvégezni. Olyan diffrakciós rácsot kell alkalmaznunk, amelynek rácsállandója nem sokkal nagyobb a röntgensugarak feltételezett hullámhosszánál. Ilyen természetes diffrakciós rács a kristályrács, ahol a szomszédos atomok közötti távolság felel meg a diffrakciós rács állandójának.

Ha egy kristályrácsra röntgensugarat bocsátunk, az atomok másodlagos hullámforrássá válnak, tehát mindegyik gömbhullámot bocsát ki. A szabályosan elhelyezkedő atomokról szóródott sugarak adott irányokba erősíteni fogják egymást, és így diffrakciós maximumokat észlelünk. Ezek helyzetéből a sugárzás hullámhossza meghatározható.

Az első ilyen jellegű kísérletet Laue végezte el 1912-ben. A röntgensugarak kollimálás után egy kristályra (pl. kvarc) esnek. A kristályon áthaladó és szóródott sugarakat egy fényképezőlemezen fogják fel, itt alakul ki a diffrakciós kép (5.11 ábra). A maximumok helyzetéből Laue meghatározta a használt röntgensugarak hullámhosszát. Ezek a 0,13 és 0,48 Å intervallumban voltak. Ma a 0.1 és 100 Å hullámhosszak közötti elektromágneses sugárzást szokták röntgensugaraknak nevezni.

A röntgensugarak spektrumának a meghatározásához a Laue-módszer elég nehézkes. Sokkal célravezetőbb a Bragg-módszer (1913), amely szerint a röntgensugarak úgy szóródnak, mintha a különböző kristálysíkokról verődnének vissza. Ilyen egymással párhuzamos kristálysíkokból álló család több is szerkeszthető egy kristályon belül, de csak néhány olyan van, amelyek esetében a rácspon-t-sűrűség elegendően nagy (5.12

5.11. ábra: Röntgensugarak elhajlásának vizsgálata a Laue-módszerrel és a kvarckristállyal kapott diffrakciós kép.

ábra). Az egymással párhuzamos kristálysíkokat Bragg-síkoknak nevezzük.

Egy adott kristálysíkra eső párhuzamos sugárnyalábot a sík minden atomja tetszőleges irányába szórní fogja. Abban az esetben, ha a beeső sugár és a szórt sugár a kristálysíkkal ugyanazt a  $\theta$  szöget fogja bezárni, akkor a szórt nyalábot alkotó sugarak közötti útkülönbség nulla, tehát ebbe az irányba diffrakciós maximumot kapunk, a hullámhossztól függetlenül. Mivel ezen nullad rendű diffrakciós maximumot a visszaverődés törvénye által megadott irányban kapjuk, az egy kristálysík általi szórását visszaverődésnek is tekinthetjük.

A különböző párhuzamos kristálysíkokról „visszaverődött” hullámok bizonyos esetekben erősíteni fogják egymást. Ez akkor következik be, ha a visszavert sugarak közötti útkülönbség a hullámhossz egész számú többszöröse. Így az 5.13 ábra alapján

$$2d \sin \theta = n\lambda; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.36)$$

ahol  $d$  két szomszédos kristálysík közötti távolság, míg  $\theta$  a beeső sugár és a kristálysík által bezárt szög. A fenti képletet Bragg-féle összefüggésnek nevezik.

A Bragg-féle összefüggésen alapul a röntgenspektroszkópia, vagyis a röntgensugarak hullámhossz szerinti elemzése. Az egyik bevált módszer a röntgensugarak spektrumának meghatározásához a Bragg-féle forgókristályos módszer (5.14 ábra). A különböző diffrakciós maximumokat a detektor helyzetének a változtatásával észleljük. A detektor méri az egy adott irányba szórt röntgensugarak intenzitását. Annak érdekében, hogy az interferencia ugyanazon Bragg-síkokról „visszaverődött” hullámok között jöjjön létre, míg a detektort  $2\theta$  szöggel forgatják el, addig a kristályt is elforgatják  $\theta$  szöggel. Így egy adott röntgenforrás esetén a szórt sugarak intenzitását mérik a  $\theta$  szög függvényében. Az (5.36) Bragg-összefüggésből, lerögzítve az  $n$  értékét (pl.  $n = 1$ -re, mert ezek a maximumok a legintenzívebbek), a  $\theta$  szögből ki lehet számítani a hullámhosszt. Így bármely röntgensugárzás spektruma meghatározható.

5.12. ábra: Kristálysíkok egy köbös elrendezésű kristálynál.

5.13. ábra: Szóródás a Bragg-síkokon.

5.14. ábra: A Bragg-féle forgókristályos módszeren alapuló röntgenspektrométer.

5.15. ábra: Ruténiummal (*Ru*) szennyezett ródiium (*Rh*) antikatód által kibocsátott röntgensugarak spektruma különböző gyorsító feszültségek esetén.

A röntgensugarak spektrumát elemezve arra a következtetésre jutottak, hogy ennek két összetevője van: egy folytonos spektrum, mely egy, a gyorsító feszültségtől függő minimális hullámhossztól kezdve minden hullámhosszúságú sugárzást tartalmaz; erre rátevéődik egy diszkrét spektrum, amely bizonyos, a katód anyagától függő hullámhosszokon megjelenő éles csúcsokból áll (5.15 ábra).

A spektrum folytonos összetevője a klasszikus elmélet szerint is várható volt. Ugyanis a nagy energiájú elektronok az antikatódban, az atommagok elektromos terében lefékeződnek, ami elektromágneses sugárzás kibocsátással jár (fékezési sugárzás). Viszont a gyorsító feszültséggel szigorúan fordítottan arányos minimális hullámhossza a spektrumnak nem magyarázható meg a sugárzás hullámtermészete alapján. Azonban a fotonelmélet igen egyszerű magyarázattal szolgál.

Az  $eU$  energiára gyorsított elektronok az atommagok közelébe kerülve energiájuk egy részét foton vagy fotonok formájában kisugározzák. Határesetben egy elektron olyan nagy energiájú fotonot bocsáthat ki, hogy teljes mozgási energiáját elveszíti. Tehát kibocsátott foton energiája nem lehet nagyobb az elektron kezdeti mozgási energiájánál

$$eU = h\nu_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}}. \quad (5.37)$$

Innen a minimális hullámhossza a fékezési röntgensugárzásnak

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}. \quad (5.38)$$

A fenti képlet tökéletesen megmagyarázza a kísérleti tapasztalatot.

A diszkrét spektrumú röntgensugárzást karakterisztikus sugárzásnak is hívják, mert a diszkrét vonalak helyzete kizárólag az antikatód anyagától függ. A karakterisztikus sugárzás hullámhosszait Moseley különböző sorozatokba rendezte, melyeket  $K$ ,  $L$ ,  $M$  stb. betűkkel jelölünk. Az egyes sorozaton belüli vonalakat  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$  stb.-vel jelöljük. Az egyes színképvonalak hullámszámaira (a hullámhossz reciproka) Moseley a következő empirikus összefüggéseket állította fel

$$\tilde{\nu}_K = R(Z - 1)^2 \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \quad (5.39)$$

$$\tilde{\nu}_L = R(Z - 7,5)^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right). \quad (5.40)$$

A fenti képletek a Moseley-törvényt fejezik ki.  $Z$  az antikatód anyagának rendszáma,  $R$  a következő fejezetben részletesen tárgyalandó Rydberg-állandó. A  $K_\alpha$  vonalra  $n = 2$ , a  $K_\beta$ -ra  $n = 3$  és így tovább, míg az  $L$  sorozat esetében az  $n$  minimális értéke 3.

A Moseley-törvény magyarázata az atomokban létező diszkrét energiszintek közötti elektronátmenetek segítségével lehetséges. A diszkrét spektrum léte az atomok diszkrét energiaszintjei létezésének egyik bizonyítéka. Erre a témára és az elektronátmenetek tárgyalására egy későbbi fejezetben visszatérünk.

Nagyon fontos a Moseley-törvényben, hogy egy adott színképvonal hullámszámának négyzetgyöke lineárisan változik az antikatód anyagának rendszámával (5.16 ábra). Ennek alapján egyszerű hullámhossz-méréssel egy ismeretlen anyag rendszáma meghatározható.

A röntgensugaraknak sok gyakorlati felhasználásuk van a gyógyászatban, a kristályok, makromolekulák szerkezetének a meghatározásában stb.

## 5.4 A Compton-hatás

A Compton-hatás is egy olyan jelenség, melyben az elektromágneses sugárzás részecske-természete nyilvánul meg.

A fény szóródását szabad vagy gyengén kötött elektronokon a klasszikus elektrodinamika alapján Thomson tanulmányozta. Ezen elmélet szerint a szórás nem változtatja meg a fény hullámhosszát. A Thomson-szórás képlete látható fényre jól egyezik a kísérleti tapasztalattal. A röntgensugarakkal végzett szórási kísérletek azonban azt mutatták, hogy a szórt sugárzásban a beesőnél nagyobb hullámhosszúságú sugárzás is megjelenik. Ennek magyarázata ismét csak a sugárzás részecsketermészetének feltételezésével lehetséges.

Az 1920-as évek elején Compton a röntgensugarak szórását elméletileg és kísérletileg is tanulmányozta. Feltételezte, hogy ebben a szóródásban a sugárzás részecske-természete nyilvánul meg. Így a szórás leírása a foton-elektron ütközés tárgyalásával

5.16. ábra: A Moseley-diagram.

lehetséges. Ebben a megközelítésben a szórt sugárzás nagyobb hullámhossza természetes, mivel a foton az ütközés során energiájának egy részét átadja az elektronnak, ami hullámhossz-növekedéssel jár.

Az elektront szabadnak és kezdetben nyugalomban lévőnek tekintjük. A foton kezdeti impulzusa  $\vec{p}$ , a  $\phi$  szöggel való szóródás után  $\vec{p}'$ . Az elektron a  $\theta$  szöggel jellemzett irányba indul el  $\vec{p}_e$  impulzussal (5.17 ábra). A folyamatra felírjuk az impulzus-és energiamegmaradás törvényét

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e \quad (5.41)$$

$$E = E' + T_e. \quad (5.42)$$

5.17. ábra: A foton szórása szabad elektronon.

Az 5.17 ábra alapján

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \phi. \quad (5.43)$$

Az elektron impulzusát az energiája segítségével írjuk fel

$$c^2 p_e^2 = E_e^2 - m_0^2 c^4 = (T_e + m_0 c^2)^2 - m_0^2 c^4 = T_e^2 + 2m_0 c^2 T_e, \quad (5.44)$$

ahol  $E_e$  a teljes relativisztikus energiát,  $T_e$  a mozgási energiát jelöli.  $m_0$  az elektron nyugalmi tömege.

Másrészt a mozgási energia kifejezhető az (5.42)-ből

$$T_e = h\nu - h\nu' \quad (5.45)$$

Az utóbbi két kifejezést behelyettesítve az (5.43)-ba, majd néhány egyszerű átalakítást végezve megkapjuk a szórt foton és a beeső foton hullámhosszainak különbségét

$$(h\nu - h\nu')^2 + 2m_0 c^2 (h\nu - h\nu') = (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2h\nu h\nu' \cos \phi \quad (5.46)$$

$$2m_0 c^2 (h\nu - h\nu') = 2h\nu h\nu' (1 - \cos \phi) \quad (5.47)$$

$$\frac{m_0 c}{h} \left( \frac{\nu}{c} - \frac{\nu'}{c} \right) = \frac{\nu \nu'}{c^2} (1 - \cos \phi) \quad (5.48)$$

$$\frac{m_0 c}{h} \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{1 - \cos \phi}{\lambda \lambda'} \quad (5.49)$$

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \phi). \quad (5.50)$$

Tehát a Compton-szórás során a foton hullámhosszának megváltozása a következő egyszerű képlettel írható le

$$\Delta\lambda = \Lambda_0 (1 - \cos \phi), \quad (5.51)$$

ahol

$$\Lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} = 2,4 \cdot 10^{-12} \text{m} \quad (5.52)$$

a Compton-hullámhossz, ami egy univerzális állandó.

A 5.51 képletből leolvasható, hogy a hullámhosszváltozás csak a szóródási szögtől függ, nem függ a sugárzás kezdeti hullámhosszától, és ez a változás  $10^{-12}$  m nagyságrendű. Innen látható, miért nem észlelték a Compton-hatást látható fény esetén: a relatív hullámhossz-változás csak  $10^{-5}$  nagyságrendű. Röntgensugárzás esetén viszont ez a relatív hullámhossz-változás már számottevő.

Kísérletileg a Compton-hatás az 5.18 ábrán látható berendezéssel mutatható ki. Egy monokromatikus röntgennyalábot egy céltárgyra bocsátanak, majd egy röntgenspektrométerrel különböző szögek alatt vizsgálják a szórt sugarak spektrumát. Az így nyert spektrumokat néhány szórási szög esetén az 5.19 ábrán mutatjuk be. Jól látható a hullámhossz-változás növekedése a szórási szög függvényében. Ugyanakkor a szórt spektrum mindig tartalmazza az eredeti hullámhosszat. Ez a tény avval magyarázható, hogy a sugárzás nem csak a szabad, hanem az erősen kötött elektronokon is szóródik. Ebben az esetben a foton az egész atomnak adja át impulzusa egy részét. Mivel az atom tömege több ezerszer nagyobb az elektronénál, a teljes atomon szóródott fotonok hullámhossza csak igen kis mértékben változik. Ennek a változásnak a nagyságrendje  $\Lambda_A = h/(m_A c)$ , ahol  $m_A$  az atom tömege, több ezerszer kisebb a szabad elektronokon szóródott fotonok hullámhosszváltozásánál, ezért elhanyagolható.



5.18. ábra: A Compton-hatás kísérleti kimutatása.

5.19. ábra: A Compton-szórás spektruma.

# 6

## Az atomok régi kvantumelmélete. Az elektron hullámtermészete

### 6.1 Az atomok optikai spektruma

A szilárd testek által kibocsátott folytonos spektrumú hőmérsékleti sugárzással ellentétben egy gáz atomjai (egyedülálló atomok) valamilyen módon gerjesztve (elektromos kisülés vagy melegítés útján), vonalas színekkel jellemezhető sugárzást bocsátanak ki.

Már a XIX. században megfigyelték, hogy a színek a fényt kibocsátó elemre jellemző, tehát egy adott atomfajta mindig ugyanolyan hullámhosszakat tartalmazó színeképet ad. Logikusan következik, hogy a kibocsátott fény jellege az atom belső tulajdonságaitól függ, tehát a színeképek információt nyújthatnak az atomok stuktúrájára vonatkozólag. A 6.1 ábrán három elem színeképvonalait ábráztuk a látható tartományból.

Különböző elemek színeképei esetén a színeképvonalakat valamilyen módon rendszerezni próbálták, a hullámhosszak között matematikai összefüggéseket kerestek. A legyszerűbb színekép, a hidrogén színeképének vonalai között Balmer 1885-ben egyszerű matematikai összefüggést fedezett fel. A színeképvonalak hullámszámait megadhatók a következő egyszerű képlettel

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (6.1)$$

ahol  $m = 2$ ,  $R = 1,0967758 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  pedig egy univerzális állandó, amit ma Rydberg-állandónak hívunk. Az  $n$  egy 2-nél nagyobb egész szám, különböző értékei különböző színeképvonalak hullámszámát szolgáltatják.

Később felfedezték, hogy a hidrogénatom ibolyántúli és infravörös színeképében lévő színeképvonalak hullámszámait is leírhatók a 6.1 képlettel, csak az  $m$  helyébe más egész értéket kell írni. Minden esetben  $n > m$ .

Az egyazon  $m$ -hez tartozó színeképvonalak sorozatot alkotnak. Ezeket a sorozatokat felfedezőjükről nevezték el.  $m = 1$  esetén az ibolyántúli tartományban található Lyman-sorozatot kapjuk. A látható tartományban található színeképvonalak ( $m = 2$ )

6.1. ábra: Az atomos hidrogén, hélium és higany színeképvonalai a látható tartományból.

a Balmer-sorozatot alkotják. Az infravörös tartományban helyezkednek el a Paschen ( $m = 3$ ), a Brackett ( $m = 4$ ) és a Pfund ( $m = 5$ ) sorozatok.

Az ezeket a sorozatokat alkotó színeképvonalak logaritmikus skálán az 6.2 ábrán láthatók. Az infravörös tartományban található sorozatok nem különülnek el, fedik egymást.

Az atomok vonalas színeképe és a hidrogén vonalai közötti mennyiségi összefüggések megmagyarázhatatlanok az atom klasszikus bolygómodelljének keretén belül.

## 6.2 A Bohr-féle atommodell

Az atomok stabilitásának és vonalas színeképeének a magyarázatára Bohr 1913-ban egy új atommodellt alkotott. Az energia kvantáltságát, amit Planck a sugárzás leírására vezetett be, Bohr az atomokra is általánosította. Annak ellenére, hogy kitartott a Rutherford-modell azon kitétele mellett, hogy az elektronok a mag körül keringenek (és az egyszerűség miatt a pályát kör alakúnak vette), két forradalmian új posztulátumot vezetett be.

I. Az atomok tartósan csak meghatározott stacionárius állapotokban lehetnek. Ezekben az állapotokban az atomok nem sugároznak és nem nyelnek el energiát. A stacionárius állapotoknak megfelelő energiák diszkrét sorozatot képeznek ( $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n, \dots$ ).

II. A stacionárius állapotok közötti átmeneteknél az atomok pontosan meghatározott frekvenciájú sugárzást bocsátanak ki vagy nyelnek el. Az  $m$  és  $n$  állapotok közötti

6.2. ábra: A hidrogén színekének sorozatai.

átmeneteknél a kisugárzott vagy elnyelt fény  $\nu$  frekvenciájára érvényes a Bohr-féle frekvenciafeltétel

$$h\nu = E_m - E_n, \quad (6.2)$$

ahol  $h$  a már ismert Planck-állandó.

A fenti posztulátumok ellentétben állnak a klasszikus fizika törvényeivel, de segítségükkel megmagyarázhatók a kísérleti tények: az atomok stabilitása és vonalas színe.

Ahhoz, hogy a Bohr-modell a minőségi leíráson kívül mennyiségi összefüggések leírására és ellenőrzésére is alkalmas legyen, a stacionárius állapotok energiájának értékét kell meghatározni. Ez tulajdonképpen egy kvantálási szabály bevezetését jelenti. Ennek érdekében Bohr a Planck-féle kvantálási szabályból indult ki, amely egy harmonikus oszcillátor energiájának értékét adja meg

$$\frac{E}{\nu} = nh, \quad (6.3)$$

ahol  $n$  természetes szám. Ezt a képletet egy tetszőleges mechanikai harmonikus oszcillátor esetében is érvényesnek tekintjük, amelynek egy adott pillanatban a kitérése  $q$ , impulzusa  $p$ . Az oszcillátor energiáját felírjuk a mozgási és potenciális energiák összegeként

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2} = E, \quad (6.4)$$

ahol  $m$  az oszcillátor tömege,  $k$  a rugalmassági állandó. Átírva ezt az egyenletet a

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{2\frac{E}{k}} = 1 \quad (6.5)$$

formába, azt látjuk, hogy ez egy ellipszisnek az egyenlete a  $(p, q)$  síkban. Az ellipszis fél nagytengelye  $a = \sqrt{2mE}$ , a fél kistengelye  $b = \sqrt{2E/k}$ . Az ellipszis területét,

mint bármely síkidomét kiszámíthatjuk a  $p$ -nek a  $q$  szerinti körintegráljából, vagy felhasználhatjuk az ellipszis területére érvényes  $\pi ab$  képletet. Egyenlővé téve a kettőt

$$\oint pdq = \pi\sqrt{2mE}\sqrt{\frac{2E}{k}} = 2\pi E\sqrt{\frac{m}{k}}. \quad (6.6)$$

Felhasználva, hogy az oszcillátor frekvenciája

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (6.7)$$

azt kapjuk, hogy

$$\oint pdq = \frac{E}{\nu}. \quad (6.8)$$

Planck kvantálási tétele szerint  $E = nh\nu$ , ahol  $n$  természetes szám, tehát az impulzus és energia körintegráljára azt kapjuk, hogy csak a Planck-állandó egész számú többszöröse lehet

$$\oint pdq = nh. \quad (6.9)$$

A fenti egyenlet a Bohr-féle kvantumfeltétel. Ezt az oszcillátorra levezetett összefüggést Bohr általánosította bármely rendszer minden szabadsági fokára, ahol a  $p$  és a  $q$  általánosított koordinátát és impulzust jelölnek.

Bohr modelljében az elektron körpályán mozog. Polár koordinátákban dolgozva a radiális koordináta ( $r$ ) konstans, az impulzus radiális összetevője  $p_r = 0$ , ebből következik, hogy a fenti körintegrál a radiális koordinátákra nulla lesz. A kvantálási feltételt az elektron helyzetét jellemző  $\varphi$  szögre írjuk fel.

Ekkor az általánosított koordináta a  $\varphi$  szög lesz, az általánosított impulzus pedig  $L$ , az elektron impulzusnyomatéka, amelyről tudjuk, hogy állandó marad. Ebben az esetben a körintegrál könnyen kiszámítható

$$\oint Ld\varphi = L \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi L. \quad (6.10)$$

Tehát a 6.9 kvantumfeltétel az

$$L = n\frac{h}{2\pi} \equiv n\hbar \quad (6.11)$$

alakba írható. Ezek szerint az elektron impulzusmomentuma az atomban csak jól meghatározott, diszkrét értékeket vehet fel. Az  $n$  természetes számot ( $n \geq 1$ ) főkvantumszámnak nevezzük, mely az elektron állapotát jellemzi.

Ebből a kvantumfeltételből levezethetjük a sugárra és az energiára vonatkozó kvantumfeltételeket is.

Kiindulva abból, hogy a centripetális erő szerepét a Coulomb vonzóerő tölti be,

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (6.12)$$

és behozva ebbe a képletbe az  $L = mvr$  impulzusnyomatékokot

$$\frac{L^2}{r} = \frac{Ze^2 m}{4\pi\epsilon_0}, \quad (6.13)$$

majd felhasználva a 6.11 feltételt, azt kapjuk, hogy az elektron pályájának  $r$  sugara szintén az  $n$  főkvantumszám szerint kvantált

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0}{Ze^2m} \hbar^2 n^2. \quad (6.14)$$

A fenti képletekben  $Z$  az atommag rendszáma (hidrogénre  $Z = 1$ ),  $m$  pedig az elektron tömege. A legkisebb sugárú elektronpálya  $n = 1$ -re adódik, ennek számszerű értéke

$$r_1 \equiv a_0 = 0,528 \cdot 10^{-10} \text{ m}. \quad (6.15)$$

A fenti érték az alállapotú hidrogénatom sugarának tekinthető, és Bohr-sugárnak nevezzük.

Figyelembevéve, hogy a mag körül körmozgást végző elektron energiáját a sugár függvényében a 4.4 képlettel fejezhetjük ki, megkapjuk a kvantumfeltételt az atomban lévő elektron energiájára

$$E_n = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{Z^2 e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (6.16)$$

A hidrogén legalacsonyabb energiájú állapotának (alállapotának) energiájára a fenti képlet alapján ( $n = 1$  behelyettesítéssel)  $-13,6$  eV adódik. Ez az érték jól egyezik a kísérletileg mért ionizációs energiával. A hidrogénatom ionizációs energiájának értékét ( $I = -E_1$ ) energiamértékegységként is használják. Ennek neve a rydberg, és  $1 \text{ Ry} = 13,6$  eV.

Az atom gerjesztett állapotait  $n = 2, 3, \dots$  stb. értékeire kapjuk. A hidrogénatom diszkrét energiaszintjeinek diagramját a 6.3 ábrán mutatjuk be. Láthatjuk, hogy  $n$  növekedésével az energiaszintek mind jobban sűrűsödnek, és közelednek a nulla energiához. Ha az elektron pozitív energiára tesz szert, akkor elhagyja az atomot (ionizáció). A pozitív tartományban az energiaspektrum már folytonos jellegű.

A stacionárius állapotok energiáinak fenti képlete alapján a Bohr-modell mennyiségileg is pontosan ellenőrizhető. A Bohr-féle frekvenciafeltétel alapján, ha az atom az  $n$  állapotból az  $m$  állapotba megy át, a kibocsátott fény frekvenciája

$$\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h} \quad (6.17)$$

lesz. A (6.16)-ot felhasználva a  $\tilde{\nu} = \nu/c$  hullámszámra a

$$\tilde{\nu}_{nm} = \frac{Z^2 e^4 m}{8h^3 \epsilon_0^2 c} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (6.18)$$

kifejezést kapjuk, mely pontosan ugyanolyan alakú, mint a 6.1 képlet. A Rydberg-állandót így elméletileg is meg lehet határozni, vagyis

$$R = \frac{e^4 m}{8h^3 \epsilon_0^2 c}. \quad (6.19)$$

A fenti képletbe az univerzális állandók más úton meghatározott pontos értékeit behelyettesítve (ahol  $m$  az elektron tömege), az  $R = 1,0973731 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  értéket kapjuk, amely 0,055 százalékkal nagyobb a kísérleti értéknél.

6.3. ábra: A hidrogénatom diszkrét energiaszintjei közötti átmenetek.

Az elméleti számítást pontosítani lehet, ha figyelembe vesszük, hogy a proton tömege nem végtelen nagy az elektronéhoz képest, és így az elektron és a proton a közös tömegközéppontjuk körül keringenek. A két test relatív mozgására pontosan érvényesek a fenti képletek, de  $m$  nem az elektron tömegét, hanem a két test redukált tömegét kell hogy jelentse

$$m = \frac{m_e m_Z}{m_e + m_Z}, \quad (6.20)$$

ahol  $m_e$  az elektron,  $m_Z$  a mag tömege. Evvel a korrekcióval az elméletileg számolt Rydberg-állandó hat értékes tizedes jegyig megegyezik a kísérletileg kapott értékkel.

Ez az igen jó egyezés az elmélet és a kísérlet között a Bohr-posztulátumok helyes voltát bizonyította. Sőt, az energia kvantálására kapott képlet minden hidrogénszerű ionra érvényes, tehát olyan ionokra amelyek csak egy elektront tartalmaznak. Pl. a  $He^+$  ion esetében ( $Z = 2$ ), a 6.18 képlettel a Pickering-sorozat vonalait is pontosan megkapjuk  $m = 2$  esetére. A Pickering-sorozat színeképvonalait először a csillagok fényében észlelték. Bohr tisztázta, hogy ezeket a vonalakat az ionizált hélium hozza létre.

Nagy sikere ellenére a Bohr-modellnek komoly korlátai vannak. Először is nem érvényes a több elektront tartalmazó atomokra. Másoszor pedig, ha a hidrogén színeképvonalait nagy felbontású spektroszkóppal vizsgáljuk, azt észleljük, hogy a színeképvonalnak finomszerkezete is van. Ez azt jelenti, hogy minden eddig tárgyalt színeképvonal több egymáshoz közel álló vonalból áll. Ez a tapasztalat sem magyarázható a Bohr-modell segítségével.



## 6.3 A hidrogénszerű atomok Bohr-Sommerfeld modellje

Sommerfeld a Bohr-modellt természetes módon általánosította. A klasszikus mechanika szerint egy részecske egy  $r^2$ -el fordítottan arányos erőterben nem csak kör, hanem tetszőleges ellipszis alakú pályán is keringhet. Sommerfeld ellipszis alakú elektronpályákra alkalmazta a Bohr-féle kvantumfeltételt.

A síkban mozgó elektronnak két szabadsági foka van, helyzetét az  $r$  és  $\varphi$  koordinátákkal tudjuk leírni. Mivel most mind a két koordináta változik, a 6.9 kvantumfeltételt mindkettőre felírjuk

$$\oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h \quad (6.21)$$

$$\oint p_r dr = n_r h. \quad (6.22)$$

A fenti képletekben  $p_\varphi = mr^2\dot{\varphi} = L$  az impulzusnyomaték, míg  $p_r = m\dot{r}$  az impulzus radiális komponense.

A radiális impulzuskomponenst a következőképpen fejezzük ki

$$p_r = m \frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = m \frac{L}{mr^2} \frac{dr}{d\varphi}, \quad (6.23)$$

és az  $r$  szerinti körintegrált a  $\varphi$  szerinti körintegrállá alakítjuk át

$$\oint p_r dr = \oint \frac{L}{r^2} \frac{dr}{d\varphi} dr = \oint \frac{L}{r^2} \left( \frac{dr}{d\varphi} \right)^2 d\varphi. \quad (6.24)$$

A következőkben felhasználjuk, hogy polár koordinátákban az ellipszis egyenlete

$$r = \frac{a(1 - \epsilon^2)}{1 - \epsilon \cos \varphi}, \quad (6.25)$$

ahol

$$\epsilon = \frac{r_{\max} - r_{\min}}{2a} = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} \quad (6.26)$$

az ellipszis excentricitása. Amint az a 6.4 ábrán látható,  $a$  és  $b$  az ellipszis fél nagy- illetve kistengelye,  $r_{\max}$  és  $r_{\min}$  pedig az elektron maximális és minimális távolsága a magtól.

Az ellipszis 6.25 egyenletéből

$$\frac{dr}{d\varphi} = - \frac{(1 - \epsilon^2)\epsilon a \sin \varphi}{(1 - \epsilon \cos \varphi)^2}. \quad (6.27)$$

Ezt és a 6.25 kifejezést behelyettesítve a 6.24 integrálba azt kapjuk, hogy

$$\oint p_r dr = L\epsilon^2 \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \varphi}{(1 - \epsilon \cos \varphi)^2} d\varphi. \quad (6.28)$$

6.4. ábra: Ellipszis alakú pálya.

A fenti  $\varphi$  szerinti integrál analitikusan kiszámítható. A 6.22 kvantálási képlet az integrál értékének felhasználásával az

$$\oint p_r dr = 2\pi L \left( \frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2}} - 1 \right) = n_r h, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (6.29)$$

alakba írható. A 6.21 kvantálási feltételből az  $L$  impulzusmomentum megmaradását felhasználva az

$$L = n_\varphi \frac{h}{2\pi}, \quad n_\varphi = 1, 2, 3, \dots \quad (6.30)$$

kifejezést kapjuk. A fenti két feltételt kombinálva az

$$\frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2}} - 1 = \frac{n_r}{n_\varphi} \quad (6.31)$$

összefüggéshez jutunk, ahonnan

$$1 - \epsilon^2 = \frac{n_\varphi^2}{(n_r + n_\varphi)^2}. \quad (6.32)$$

Ismert mechanikából, hogy az ellipszispályán keringő elektron energiájára is érvényes a 4.4 képlet, de a nevezőben az ellipszis fél nagytengelye ( $a$ ) szerepel

$$E = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 a}. \quad (6.33)$$

Ugyanakkor az energia, az impulzusnyomaték és az excentricitás közötti összefüggés is megadható

$$E = -\frac{mZ^2e^4(1-\epsilon^2)}{2L^2(4\pi\epsilon_0)^2}. \quad (6.34)$$

Ebbe a kifejezésbe behelyettesítve a 6.30 és a 6.32 kvantálási feltételeket, az energia kvantálására azt kapjuk, hogy

$$E = -\frac{Z^2e^4m}{8h^2\epsilon_0^2} \frac{1}{(n_r + n_\varphi)^2}. \quad (6.35)$$

6.5. ábra: Különböző kvantumszámokkal jellemzett elektronpályák a Bohr-Sommerfeld modellben.

Mivel az energia csak a radiális és orbitális kvantumszám összegétől függ, bevezetjük az  $n = n_r + n_\varphi$  számot, amit főkvantumszámnak nevezünk. Így a fenti képlet pontosan meg fog egyezni a 6.16 kifejezéssel. Tehát a Bohr-Sommerfeld modell ugyanazokat az energiaszinteket szolgáltatja, amit az egyszerű Bohr-modell keretén belül kaptak.

Mégis, a Bohr-Sommerfeld modell elvi előrehaladást jelent. Kiderült az, hogy egy adott energiaállapothoz több, különböző kvantumszámokkal jellemzett állapot tartozhat. Az ilyen energiaszinteket elfajult szinteknek hívjuk. Mivel minden egyes  $n$  értékhez  $n$  darab  $n_r, n_\varphi$  számpáros tartozik, az  $E_n$  energiaszint  $n$ -szeresen elfajult. Egy adott energiájú elektron mozoghat körpályán vagy  $n - 1$  féle ellipszis pályán (6.5 ábra). Mindig a maximális  $n_\varphi$ -vel jellemzett pálya lesz kör alakú.

Abban az esetben, ha az elektronra a középponti erőn kívül más erő is hat (pl. mágneses mezőben), az energia értéke már az  $n_\varphi$  kvantumszámtól is fog függeni, tehát egy energiaszint több alszintre bomlik fel. Ezt a jelenséget kísérletileg is észlelték (Zeeman-hatás). A felbomlás jellegét és mértékét azonban ez az atommodell csak néhány esetben jósolja meg helyesen (normális Zeeman-hatás).

Sommerfeld a 6.21 és a 6.22 feltételekből kiindulva a relativisztikus hatásokat is figyelembevéve kiszámította az elektron lehetséges energiaértékeit. Azt találta, hogy a relativisztikus korrekciók megszüntetik az egyes energiaszintek elfajultságát, és az elektron energiája az  $n_\varphi$ -től is fog függeni

$$E_{n,n_\varphi} = -\frac{Z^2 e^4 m}{8h^2 \varepsilon_0^2 n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{n_\varphi + 1} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (6.36)$$

A fenti képletben

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137} \quad (6.37)$$

a finomszerkezeti állandó, amely egy dimenzió nélküli univerzális állandó. Az  $\alpha^2$ -el arányos, relativisztikus korrekciós tag miatt, egy  $n$ -el jellemzett energiaszint több,

6.6. ábra: A Franck és Hertz kísérletéhez használt berendezés.

egymáshoz közeli szintre bomlik fel.

A relativisztikus Bohr-Sommerfeld modell így minőségi magyarázatot ad a színképvonalak finomszerkezetére, vagyis arra a kísérletileg észlelt tényre, hogy a Bohr-modellből adódó színképvonalak a valóságban több, egymáshoz közeli vonalból állanak. Jóslata azonban nem egyezik pontosan a kísérleti tapasztalattal.

## 6.4 Franck és Hertz kísérlete

Az atomok gerjesztése kétféle úton történhet: foton elnyelés útján, vagy valamilyen más részecskével (atommal, elektronnal) való ütközés következtében.

Amint azt már láttuk, az atomok elnyelési és kibocsátási spektrumai azt mutatják, hogy egy atom csak jól meghatározott energiaadagokat nyelhet el vagy bocsáthat ki fotonok formájában. A Bohr-modell kidolgozása után felvetődött a kérdés, hogy fennáll-e ez a kvantálás a más részecskékkel való ütközés általi gerjesztésre is. Ennek tisztázása érdekében Franck és Hertz 1914-ben a következő kísérletet végezték el.

A 6.6 ábrán látható csőben az izzókatód elektronokat bocsát ki, melyek a pozitív gyorsító feszültség hatására az anódra kerülnek. A rács és az anód közötti kis fékező feszültségnek az a szerepe, hogy gyorsító feszültség nélkül, vagy a mozgási energiájukat valamilyen okból elveszítve az elektronok ne jussanak el az anódhoz. Ha a csőben légmentes tér van, az elektronokat semmi sem akadályozza mozgásukban, és a feszültség-áramerősség karakterisztika a 6.7 ábrán látható, a diódáéhoz hasonló lesz.

Ha a csövet gázzal töltjük meg, a felgyorsított elektronok ütközve a gáz atomjaival, gerjeszthetik azokat, és így energiát veszítenek. Ha a gáz atomjai tetszőleges energiaértéket nyelhetnének el, akkor az áramerősség szintén monoton módon nőne a feszültséggel, csak kisebb értéke lenne a légmentes csővel kapotthoz viszonyítva.

Franck és Hertz higanygőzzel töltötték meg a csövet. A feszültséget fokozatosan növelve azt észlelték, hogy először 4,1 V-nál, majd mindig pontosan 4,9 V-onként az áramerősség hirtelen lecsökken (6.8 ábra). Ez a tény alátámasztja Bohr azon feltételezését, hogy az atomok energiája csak jól meghatározott diszkrét értékeket vehet fel. Ennek alapján a kísérleti eredmények a következőképpen magyarázhatók.

A higanyatom első gerjesztett állapota 4,9 eV-ra van az alapállapottól. Mivel

6.7. ábra: A légüres cső feszültség-áramerősség karakterisztikája.

6.8. ábra: Az áramerősség a feszültség függvényében Franck és Hertz kísérletében.

közbeneső állapot nem létezik, az atom nem nyelhet el 4,9 eV-nál kisebb energiát. Ezért, amíg az elektronok nem érik el a gyorsítás következtében ezt az energiát, az elektron-atom ütközések mind rugalmasak lesznek. Mivel az atom tömege jóval nagyobb az elektronénál, az elektronok az ütközések következtében nem veszítenek energiát, és az áramerősség folyamatosan növekszik. Ha az elektronok a gyorsítás következtében elérik a 4,9 eV energiát (ami a kezdeti sebesség és az elektródok közötti érintkezési potenciál miatt 4,9 V-nál kisebb feszültségen történik), ezek a higanyatomokkal ütközve gerjeszthetik azokat, evvel elveszítve mozgási energiájukat. Ennek a küszöbértéknek az elérését az áramerősség csökkenése jelzi. Tovább növelve a feszültséget, az áramerősség ismét növekedni kezd, majd az első csökkenéshez viszonyítva 4,9 V után az elektronok ismét elegendő energiára tesznek szert az atomok gerjesztéséhez, tehát az áramerősség ismét lecsökken. Így az egyes minimumok egy elektron egyszeri, kétszeri, háromszori stb. rugalmatlan ütközésénél jelentkeznek.

Ha a csőben az atomok koncentrációja elég nagy, a megfelelő energiára felgyorsított elektron nagyon rövid távolság megtétele után fog rugalmatlanul ütközni és energiáját elveszíteni. Így az atomoknak csak az első gerjesztett állapotát lehet kimutatni, az elektronok nem tudnak felgyorsulni a többi állapotba való gerjesztéshez szükséges energiára. Ha azonban csökkentik a csőben az atomok koncentrációját, az elektronok átlagos úthossza megnő, és evvel a módszerrel a többi gerjesztett állapot is kimutatható.

A Franck-Hertz kísérletnek nagy jelentősége volt az atomfizikában, mert az atomi színképektől független bizonyítékot szolgáltatott a diszkrét energiaszintek létéhez.

## 6.5 Az elektron hullámtermészete

1924-ben de Broglie a Bohr-elmélet könnyebb értelmezése miatt feltételezte, hogy a hagyományos részecskének is, az elektromágneses sugárzáshoz hasonlóan kettős természetük van: részecske és hullám. A hullámra és a részecskére jellemző mennyiségek között ugyanolyan összefüggéseket tételezett fel, mint a foton esetén (de Broglie-hipotézis). Így egy  $p$  impulzusú részecskéhez rendelt hullám hullámhossza

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (6.38)$$

A feltételezés azonnali elméleti sikere a Bohr-modell keretén belül az impulzusmomentumra megfogalmazott kvantumfeltétel értelmezése volt. E szerint a kör alakú pályán mozgó elektron pályája csak akkor lehet stacionárius, ha a hozzá rendelt hullám állóhullám (6.9 ábra). Ennek feltétele, hogy a pálya kerülete a hullámhossz egész számú többszöröse legyen

$$2\pi r = n\lambda. \quad (6.39)$$

Felhasználva a 6.38 feltételezést

$$2\pi r = n \frac{h}{p} \quad (6.40)$$

$$pr = n \frac{h}{2\pi} \quad (6.41)$$

$$L = n\hbar \quad (6.42)$$

6.9. ábra: A stacionárius pályán mozgó elektronhoz rendelt állóhullám.

megkaptuk a 6.11 kvantumfeltételt.

A hipotézisnek ez az elméleti sikere még nem bizonyítja helyességét. Ehhez valamilyen kísérlettel egyértelműen ki kell mutatni az elektron (vagy más részecske) hullámtermészetét. Ehhez (a röntgensugaraknál megállapítottakhoz hasonlóan) valamilyen diffrakciós–interferencia kísérletet kell végezni. A kísérlet megtervezéséhez meg kell becsülnünk az elektronhoz rendelt hullám hullámhosszát. Egy  $T$  mozgási energiájú elektron esetén ez

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}} \quad (6.43)$$

lesz. Ha pl. az elektront 50 V feszültséggel gyorsítjuk, energiája 50 eV lesz, és a fenti képlet alapján a hozzá rendelt hullámhossz  $1,8 \cdot 10^{-10}$  m. Ahhoz, hogy egy ilyen rövid hullámhosszúságú sugárzás hullámtermészetét kimutassuk, ugyanahhoz a módszerhez kell nyúlnunk, amelyet a röntgensugárzás esetében már alkalmaztak: kristályrácsra történő diffrakcióhoz.

Davisson és Germer 1927-ben különböző energiákra gyorsított elektronok szóródását vizsgálták egy nikkelt kristályrácsra (6.10 ábra). Ha a nikkelt melegítés nyomán monokristály állapotba hozták, a szórt elektronnyaláb intenzitásának bizonyos feszültségeken adott irányban éles maximuma volt. A 6.11 ábrán polár koordinátákban ábrázoltuk az észlelt elektronintenzitást a beeső és a visszavert nyaláb közötti  $\phi$  szög függvényében, különböző gyorsító feszültségek esetén.

A kapott diffrakciós ábrák pontos értelmezése bonyolult. Ennek egyik oka az, hogy az elektron a fémbe belépve a felületi potenciál következtében felgyorsul, a másik pedig, hogy a különböző Bragg-síkokon szóródott elektron-hullámok interferálnak egymással. A második jelenség azt eredményezi, hogy sok gyorsító feszültség esetén egyáltalán nem kapunk éles maximumot. Mégis, bizonyos gyorsító feszültségeknél (pl. nikkelt esetében 54 V-nál) egy adott irányban éles maximumot észlelünk, mert egy adott Bragg-síkcsaládról szóródott elektronok dominálnak. Ezekben az esetekben a hullámhossz meghatározását ugyanavval a Bragg-képlettel (5.13) lehet elvégezni, mint a röntgensugarak szóródása esetén. A konkrét példánál maradva  $U = 54$  V gyorsító feszültségénél az éles maximum  $\phi_m = 50^\circ$ -nál adódik. A beeső és a visszavert nyalábnak

6.10. ábra: Davisson és Germer kísérlete.

6.11. ábra: A szórt elektronnyaláb intenzitása a szóródási szög függvényében polár koordinátákban.



a „visszaverő” Bragg-síkkal bezárt szöge  $\theta = (180^\circ - \phi_m)/2$  lesz. A 5.13 képletet alkalmazva (minimális útkülönbség,  $n = 1$  esetén)

$$\lambda = 2d \sin \theta. \quad (6.44)$$

A kristálysíkok közötti  $d$  távolságot röntgendiffrakciós módszerrel meg lehet határozni. Az adott esetben  $d = 0,91 \text{ \AA}$ . Innen kiszámítva az elektronhoz rendelt hullámhosszára  $\lambda = 1,65 \text{ \AA}$  adódik. Ez az érték nagyon jó egyezést mutat a de Broglie képletéből számolt

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}} \quad (6.45)$$

képletből számolttal. Az elektron hullámtermészete így kísérleti bizonyítást is nyert.

De Broglie képlete nem csak elektronra, hanem minden anyagi részecskére is érvényes. Ezt kísérletileg neutronokra, protonokra, sőt, egész atomokra is kimutatták. Természetesen a makroszkopikus testekhez rendelt hullámhossz olyan kicsi, hogy ezek hullámjellegét lehetetlen kimutatni.

Bár az elektron hullámtermészetének feltételezése látszólag alátámasztotta a Bohr-modellt, egyben annak túlhaladását is jelentette. A stacionárius állapotban lévő elektronhoz rendelt állóhullám már azt jelenti, hogy az atomi elektron pályája egy értelmetlen fogalom. Többek között de Broglie feltételezése vezetett el a kvantummechanika kidolgozásához, mely a mikrorészecskék viselkedését új elvek szerint tárgyalja. Ugyanakkor a kvantummechanika szilárd elvi alapot biztosított az atomfizikának, amely a Bohr-modellnél hiányzott.



# 7

## A hidrogénatom kvantummechanikai leírása

A kvantummechanikát 1925-ben egymástól függetlenül alkotta meg Heisenberg és Schrödinger. Ez az új elmélet lehetővé teszi a mikrorészecskék viselkedésének koherens leírását.

### 7.1 Az elektron mozgása gömbszimmetrikus erőterben. Az impulzusmomentum sajátértékei.

A kvantummechanika alapegyenlete a Schrödinger-egyenlet. Ha egy elektron (vagy bármilyen más részecske) mozgását egy rögzített konzervatív mezőben szeretnénk vizsgálni, akkor a Schrödinger-egyenletet erre az egy részecskére kell felírunk. Ha két test viszonylagos mozgását tekintjük (pl. az elektronét és a protonét a hidrogénatomban), akkor ez a klasszikus mechanikából ismert módszerrel redukálható egy részecskének a mozgására, ahol a képletbe a tömeg helyébe a kétrészecske-rendszer redukált tömegét kell írunk. A továbbiakban a Schrödinger-egyenletben szereplő  $m$  tömeg az elektron-atommag rendszer redukált tömegét jelenti.

Ha az elektron stacionárius állapotait keressük, akkor a stacionárius Schrödinger-egyenletet írjuk fel

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (7.1)$$

ahol  $\psi$  a részecske hullámfüggvényének csak a térbeli koordinátáktól függő része,  $E$  a részecske energiája az adott állapotban,  $\hat{H}$  pedig a részecske Hamilton-operátora. A Hamilton-operátor a mozgási energia és a potenciális energia operátorainak összege

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}), \quad (7.2)$$

ahol  $\Delta$  a Laplace-operátor. Gömbszimmetrikus erőterben a potenciális energia csak a centrumtól mért távolságtól függ, tehát  $V(\vec{r}) = V(r)$ . Az egyenletet átrendezzük

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\psi = 0. \quad (7.3)$$

Gömbi koordinátákban dolgozunk, mert így gömbszimmetrikus erőter esetén a Schrödinger-egyenlet szeparálható három, egyváltozós differenciálegyenletre.

A Laplace-operátort gömbi koordinátákban kifejezve a Schrödinger-egyenlet alakja

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0 \quad (7.4)$$

lesz. Mivel ez a három változós differenciálegyenlet szeparálható, a megoldást a

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (7.5)$$

alakban keressük. Behelyettesítve ezt a szorzatot a Schrödinger-egyenletbe, szeparálhatjuk először a  $\varphi$ -től, majd a  $\theta$ -tól függő részét az egyenletnek, és a következő három egyváltozós differenciálegyenlethez jutunk

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi = 0 \quad (7.6)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 \quad (7.7)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (7.8)$$

A fenti kifejezésekben az  $m_l^2$  és az  $l(l+1)$  egyelőre tetszőleges állandók.

A részletes számítás azt mutatja, hogy a fenti egyenleteknek egyértékű és a teljes értelmezési tartományban véges megoldásai a fenti állandóknak és az energiának csak bizonyos jól meghatározott értékeire lesznek. Így jutunk el a különböző kvantálási feltételekhez.

A  $\varphi$ -től függő 7.6 egyenlet könnyen megoldható

$$\Phi(\varphi) = A_m e^{\pm i m_l \varphi} \quad (7.9)$$

Ahhoz, hogy a függvény a tér bármely pontjában egyértékű legyen, vagyis  $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$ , az  $m_l$  állandó csak egész értékeket vehet fel

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (7.10)$$

Ezt az egész számot, amely egyik jellemzője a megoldásként kapott hullámfüggvénynek, mágneses kvantumszámnak nevezzük.

A 7.7 egyenletnek a megoldásai az általánosított Legendre-polinomok

$$\Theta(\theta) = B_{lm} P_l^{m_l}(\cos \theta), \quad (7.11)$$

ahol  $B_{lm}$  egy normálási állandó. Ezek a megoldások csak akkor léteznek, ha  $l$  egész szám, és  $l \geq |m_l|$ . Az  $l$ -et atomok esetén mellékvantumszámnak nevezzük, általános esetben orbitális kvantumszámnak.

Amint a 7.6 és a 7.7 egyenletekből kitűnik, a hullámfüggvény orbitális része, a  $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  nem függ a  $V(r)$  potenciál konkrét alakjától. Ebből következik, hogy bármely

gömbszimmetrikus potenciál esetén a hullámfüggvény orbitális része mindig ugyanolyan jellegű.

A hullámfüggvény orbitális részének a leírására bevezették gömbfüggvényeket, melyek mindkét szögtől függenek

$$A_m e^{\pm i m_l \varphi} B_{lm} P_l^{m_l}(\cos \theta) = Y_l^{m_l}(\theta, \varphi). \quad (7.12)$$

A gömbfüggvények ortogonális függvényrendszert képeznek, és úgy értelmezik őket, hogy 1-re legyenek normáltak

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m_l*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m_l'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'}. \quad (7.13)$$

A gömbfüggvények ugyanakkor az impulzusmomentum-négyzet ( $\hat{L}^2$ ) és az impulzusmomentum  $Oz$  irányú komponense ( $\hat{L}_z$ ) operátoroknak is sajátfüggvényei. Ez egyenes következménye annak, hogy a  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  és az  $\hat{L}_z$  operátorok felcserélhetők, és ezért közös sajátfüggvény-rendszerük van.

A továbbiakban az impulzusmomentum-operátorok sajátértékeit határozzuk meg. Az impulzusmomentum-négyzet operátor alakja gömbi koordinátákban

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (7.14)$$

Felírjuk az impulzusmomentum sajátérték-egyenletét

$$\hat{L}^2 \psi(r, \theta, \varphi) = L^2 \psi(r, \theta, \varphi). \quad (7.15)$$

A 7.7 egyenletet beszorozva  $(-\hbar^2)R(r)\Phi(\varphi)$ -vel, majd felhasználva a 7.6 és a 7.14 összefüggéseket, azt kapjuk, hogy

$$\hat{L}^2 \psi(r, \theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 \psi(r, \theta, \varphi), \quad (7.16)$$

ahonnan következik, hogy az impulzusmomentum négyzetének sajátértéke az orbitális kvantumszámmal fejezhető ki

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad (7.17)$$

míg a sajátfüggvények a gömbfüggvények és egy tetszőleges radiális hullámfüggvény szorzataként írhatók fel

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_l^{m_l}(\theta, \varphi). \quad (7.18)$$

Ezek alapján a hidrogénatomban lévő elektron impulzusnyomatéka a következő kvantálási szabálynak tesz eleget

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad (7.19)$$

amely nem egyezik a Bohr-modell kvantumfeltételével. Például  $l = 0$  esetben az elektron impulzusnyomatéka nulla, és ez az állapot nem képzelhető el úgy, hogy az elektron kering a mag körül.

Az elektron 7.18 hullámfüggvény által leírt állapotát orbitálnak is nevezzük. A mellékkvantumszámok határozzák meg az atomi orbitál típusát. Az  $l = 0, 1, 2, 3, 4$  stb. értékek esetén az orbitálok jelölése  $s, p, d, f, g$  és így tovább.

Az impulzusmomentum  $Oz$  tengelyre eső vetületének operátora az

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (7.20)$$

alakban írható fel. A sajátérték-egyenlet

$$\hat{L}_z \psi(r, \theta, \varphi) = L_z \psi(r, \theta, \varphi) \quad (7.21)$$

könnyen megoldható. A függvény egyértékűségét biztosító sajátértékek

$$L_z = m_l \hbar, \quad (7.22)$$

ahol  $m_l$  egy egész szám, és megegyezik a már bevezetett mágneses kvantumszámmal. Az impulzusmomentum  $Oz$  irányú kvantálásának fizikai értelme az, hogy az impulzusmomentum irány szerint is kvantált, tehát egy kitüntetett iránnyal csak jól meghatározott szögeket zárhat be. Adott  $l$  esetén, mivel  $|m_l| \leq l$ , a mágneses kvantumszám  $2l + 1$  értéket vehet fel,  $-l$ -től  $+l$ -ig, így egy kitüntetett irányhoz viszonyítva az impulzusmomentum  $2l + 1$  irányba állhat be. Kitüntetett irányt pl. külső mágneses tér jelenthet, ezért a mágneses kvantumszám elnevezés. Kitüntetett irány hiányában az impulzusmomentum irány szerinti kvantálása nem mutatható ki, mert semmilyen megfigyelhető fizikai mennyiség nem függ az impulzusmomentum irányától. A jelenség tárgyalására a következő fejezetekben még visszatérünk.

Az  $\hat{L}_z$  operátor sajátfüggvényei, amint azt már említettük, megegyeznek a  $\hat{H}$  és az  $\hat{L}^2$  operátorok sajátfüggvényeivel. Ezek  $\varphi$ -tól függő része  $e^{im_l \varphi}$ , amely megegyezik a gömbfüggvények  $\varphi$ -tól függő részével.

Ezen alfejezet befejezéseként megadjuk az első néhány gömbfüggvény konkrét alakját, melyek gyakran szükségesek a gyakorlati alkalmazásokban.

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; & Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_1^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}; & Y_2^0 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ Y_2^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}; & Y_2^{\pm 2} &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm i2\varphi} \end{aligned}$$

## 7.2 A hidrogénatom radiális Schrödinger-egyenlete. Az energia sajátértékei és a sajátfüggvények

A hidrogénatomban az elektron a proton elektrosztatikus terében mozog, ezért a potenciális energia

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (7.23)$$

Ha figyelembe vesszük a mag mozgását is, akkor az elektron és a proton relatív mozgására vonatkozó 7.8 radiális egyenletben  $m$  a két részecske redukált tömegét jelenti. A radiális egyenletet a következő alakba írjuk át

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R = 0. \quad (7.24)$$

Negatív energia, vagyis kötött állapotok esetén ennek a differenciálegyenletnek csak jól meghatározott energiaértékekre van korlátos megoldása. Ezek az energiaértékek egy egész számtól függenek, mely az  $n > l$  értékeket veheti fel, és főkvantumszámnak hívjuk. A lehetséges energiaszintekre ugyanazokat az értékeket kapjuk, mint a Bohr-modell keretén belül

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (7.25)$$

A hidrogénatom energiaszintjei általában elfajultak, tehát egy energia-sajátértékhez több sajátfüggvény (amelyeket az  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  kvantumszámokkal jellemezhetünk) tartozik. Először, mivel a radiális egyenlet nem függ a mágneses kvantumszámtól, egy adott  $n$  és  $l$  érték esetén  $2l + 1$  ugyanolyan energiájú kvantumállapotunk lesz. Ez a  $(2l + 1)$ -szeres elfajulás bármely gömbszimmetrikus erőtér esetén fennáll. Másodsor, a Coulomb-potenciál jellegéből adódóan, az energia-sajátértékek nem függenek a mellékvantumszámtól sem. Adott  $n$  esetén a mellékvantumszám 0 és  $n - 1$  között változhat. Ezek alapján kiszámíthatjuk egy adott főkvantumszámmal jellemzett energiaszint elfajultságának mértékét

$$g = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2, \quad (7.26)$$

vagyis egy adott energiájú elektron  $n^2$  kvantumállapotban lehet.

A radiális hullámfüggvények, amelyek az  $n$  és az  $l$  kvantumszámoktól függenek, az  $L$  Laguerre-polinomok segítségével fejezhetők ki

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-1}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right). \quad (7.27)$$

A fenti kifejezésben

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} \quad (7.28)$$

a már ismert Bohr-sugár, míg  $N_{nl}$  egy normálási tényező. A radiális hullámfüggvény normálását az alábbi kifejezés adja

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1. \quad (7.29)$$

Példaként megadjuk a hidrogénatom néhány radiális hullámfüggvényét

$$R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (7.30)$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}a_0^{3/2}} \left( 1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (7.31)$$

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}} r e^{-\frac{r}{2a_0}}. \quad (7.32)$$

A 7.1 ábrán a ezeket a hullámfüggvényeket ábrázoltuk a radiális koordináta függvényében. Amint az ábrán is látható, egyes hullámfüggvényeknek csomópontjaik, vagyis zérushelyeik is vannak. A csomópontok száma a radiális hullámfüggvény egyik jellemzője, amelyet a radiális kvantumszám ad meg

$$n_r = n - l - 1 \quad \text{és} \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (7.33)$$

7.1. ábra: A hidrogénatom radiális hullámfüggvényei.

### 7.3 Az elektron megtalálhatósági valószínűsége és az orbitálok

Az elektron hullámfüggvénye a hidrogénatomban az előbbieket alapján a következőképpen írható

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\varphi}. \quad (7.34)$$

A megtalálhatósági valószínűségsűrűség a tér egy adott pontjában a hullámfüggvény moduluszának négyzete

$$P(r, \theta, \varphi) = |\psi|^2 = \frac{1}{2\pi}R_{nl}(r)^2\Theta_{lm}^2(\theta). \quad (7.35)$$



Amint látható, ez a valószínűségi sűrűség nem függ az azimutális szögtől, a  $\varphi$ -tól. Ez azt jelenti, hogy egy kitüntetett irány létezése esetén a megtalálhatósági valószínűségi sűrűség erre az irányra nézve hengerszimmetrikus.

A 7.2 ábrán a hidrogénatom alap és különböző gerjesztett állapotaiban ábrázoltuk az „elektronfelhők” metszeit egy, a függőleges  $Oz$  tengelyt tartalmazó síkkal. Ahol a „felhő” sűrűbb (sötétebb), ott az elektron tartózkodási valószínűsége is nagyobb. Láthatjuk, hogy mivel az  $s$  típusú orbitálok esetében a hullámfüggvény nem függ a  $\theta$  poláris szögtől, az elektronfelhők gömbszimmetriát mutatnak.  $p$ ,  $d$  és  $f$  orbitálok esetén a megtalálhatósági valószínűségi sűrűség  $\theta$ -tól való függését az  $|Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)|^2$  adja meg.

Érdekes megfigyelni, hogy az alapállapot ( $1s$  állapot) esetében a valószínűségi sűrűség az atommag helyén maximális. Ezt könnyű belátni, mivel

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (7.36)$$

$$|\psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}, \quad (7.37)$$

tehát a  $|\psi_{100}|^2$  az  $r = 0$ -ban a legnagyobb.

Mivel gömbi koordinátarendszerben a csak a radiális koordináta szerint differenciális térfogatelem,  $dV = 4\pi r^2 dr$ , nő a sugárral, ez nem azt jelenti, hogy az elektron legvalószínűbb távolsága a magtól 0. Ha a legvalószínűbb sugarat akarjuk kiszámítani, vagyis azt a radiális koordinátát, melynek szomszédságában az elektron legnagyobb valószínűséggel tartózkodik, akkor a

$$P_r = |\psi_{100}|^2 \frac{dV}{dr} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} 4\pi r^2 \quad (7.38)$$

kifejezés maximumát kell keresnünk. Egyszerű deriválással megállapítható, hogy a hidrogén alapállapotában a legvalószínűbb sugár  $a_0$ , vagyis megegyezik a Bohr-sugárral.

A kémiai kötések létrejöttének szemléltetéséhez és a hullámfüggvények szimmetriájának tanulmányozásához sok esetben elegendő a hullámfüggvény orbitális részével foglalkoznunk. A hullámfüggvény orbitális részét polár koordinátákban iránydiagramok segítségével szokták ábrázolni, ami azt jelenti, hogy egy adott  $\theta$ ,  $\varphi$  szögekkel jellemzett irányba felmérjük a  $\theta$ ,  $\varphi$  helyen az orbitális hullámfüggvény modulusát. Így az orbitálok szemléletes, térbeli ábráját kapjuk.

Ezeknek az orbitáloknak a metszetei láthatók a 7.3 ábrán.

Az  $s$  orbitál gömbszimmetrikus. A három  $p$  orbitál közül az  $m_l = 0$  esetet közvetlenül ábrázoltuk, mert ez a hullámfüggvény valós. Mivel az orbitális hullámfüggvénynek az  $Oz$  tengely irányában van maximális értéke, ezért ezt az orbitált  $p_z$ -vel jelöljük. A hullámfüggvény előjelét is feltüntettük.

Az  $Y_1^{-1}(\theta, \varphi)$  és az  $Y_1^1(\theta, \varphi)$  komplex orbitális hullámfüggvényekből valós, szemléletesen ábrázolható orbitálokat állítunk elő. Ezeket  $p_x$ -el illetve  $p_y$ -al jelöljük, attól függően, hogy melyik tengely mentén van a maximumuk.

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} - Y_1^1) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi \quad (7.39)$$

7.2. ábra: Az elektron térbeli megtalálhatósági valószínűségi sűrűsége a hidrogénatom

különböző állapotában. A sötétebb satírozás nagyobb valószínűsűsűrűséget jelent.

7.3. ábra: Az  $s$ ,  $p$  és a  $d$  orbitálok iránydiagramjai.

$$p_y = -\frac{1}{\sqrt{2}i}(Y_1^{-1} + Y_1^1) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \varphi. \quad (7.40)$$

A  $d$  orbitálok is hasonlóképpen ábrázoltuk. Az  $m_l = 0$  esetben a hullámfüggvény valós, ezért közvetlenül ábrázolhattuk. Ez a  $d_{3z^2-r^2}$  orbitál. A jelölés logikája az  $Y_2^0$  gömbfüggvény arányossága  $3 \cos^2 \theta - 1 = (3z^2 - r^2)/r^2$ -el. A rajzon látható negatív gyűrű körülöleli a pozitív előjelű részt.

Az  $m_l = \pm 1$  esetben a  $p_x$  és a  $p_y$  orbitálokhoz hasonlóan szintén valós lineáris kombinációkat állítunk elő

$$d_{xz} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^{-1} - Y_2^1) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \quad (7.41)$$

$$d_{yz} = -\frac{1}{\sqrt{2}i}(Y_2^{-1} + Y_2^1) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi. \quad (7.42)$$

7.4. ábra: Körpályán mozgó töltött részecske impulzusnyomatéka és mágneses nyomatéka.

$m_l = \pm 2$  esetében a valós orbitálok a következők lesznek

$$d_{x^2-y^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^2 + Y_2^{-2}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi) \quad (7.43)$$

$$d_{xy} = \frac{1}{\sqrt{2}i}(Y_2^2 - Y_2^{-2}) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi. \quad (7.44)$$

A fenti orbitális hullámfüggvények többféle térbeli szimmetriával rendelkeznek. Az origóra való inverziót tekintve ezek párosak vagy páratlanok attól függően, hogy a  $\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$  vagy  $\psi(-\vec{r}) = -\psi(\vec{r})$ . Megfigyelhető, hogy  $l = 0$  és  $l = 2$  esetén az orbitálok párosak, míg  $l = 1$  esetén páratlanok. Ez a tulajdonság általánosan is bebizonyítható a gömbfüggvények képletének felhasználásával, vagyis páros orbitális kvantumszám esetén páros hullámfüggvényt, páratlan  $l$  esetén páratlan hullámfüggvényt kapunk.

## 7.4 Az elektron orbitális mozgásából származó mágneses nyomatéka. A normális Zeeman-hatás

Egy mozgó töltött részecske impulzusnyomatéka és mágneses nyomatéka között klasszikusan is levezethető összefüggés létezik. Tételezzük fel, hogy egy  $M$  tömegű,  $q$  töltésű test  $r$  sugarú körpályán egyenletesen kering (7.4 ábra). A rendszer mágneses nyomatéka a mozgó töltésnek megfelelő elektromos áramerősség és a körbeírt terület szorzata

$$\mu = IS = \frac{q}{T} \pi r^2 v = \frac{qr}{2} v = \frac{q}{2M} Mvr = \frac{q}{2M} L, \quad (7.45)$$

ahol  $T$  a keringés periódusa,  $v$  pedig a sebessége. A  $\mu$  mágneses nyomaték és az  $L$  impulzusnyomaték közötti összefüggés vektoriálisan is felírható

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2M} \vec{L}. \quad (7.46)$$

Ez a klasszikusan levezetett összefüggés bizonyos korlátok között az atomi elektronokra is alkalmazható.  $m$ -el jelölve az elektron–mag rendszer redukált tömegét és figyelem-

7.5. ábra: A mágneses nyomaték és a mágneses indukció vektorai.

bevéve, hogy az elektron töltése  $-e$ , azt írhatjuk, hogy

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}. \quad (7.47)$$

Az  $e/2m$  arányossági tényezőt giromágneses hányadosnak nevezzük.

Ha mágneses nyomatékkal rendelkező atom mágneses mezőbe kerül, energiája fog függeni a mágneses nyomaték irányától. A  $\vec{\mu}$  nyomatékú mágneses dipólus kölcsönhatási energiája a mágneses mezővel

$$W_m = -\vec{\mu}\vec{B} = -\mu B \cos \theta, \quad (7.48)$$

ahol  $\vec{B}$  a mágneses tér indukciója,  $\theta$  a  $\vec{B}$  és  $\vec{\mu}$  által közrezárt szög (7.5 ábra). Ez a kölcsönhatási energia befolyásolja az elektron teljes energiáját ami különböző (pl. spektroszkópiái) módszerekkel kimutatható. Így az energia függeni fog a mágneses nyomaték és az impulzusnyomaték irányától.

Amint azt már megjegyeztük, kitüntetett irány hiányában az impulzusnyomaték irány szerinti kvantáltsága nem mutatható ki kísérletileg. A külső mágneses tér iránya azonban már kitüntetett irányt jelent. Egyezményesen ezt a kitüntetett irányt szokták az  $Oz$  tengelynek tekinteni. Az impulzusnyomaték evvel a tengellyel a 7.22 kvantálási feltétel értelmében csak jól meghatározott szögeket zárhat be.

Érdekes megjegyezni, hogy míg az impulzusmomentum  $L_z$  komponensének jól meghatározott értékei ( $m_l\hbar$ ) vannak, az  $L_x$  és  $L_y$  meghatározatlanok maradnak. Ez abból a tényből következik, hogy az  $\hat{L}_z$  és az  $\hat{L}_x$  vagy az  $\hat{L}_y$  operátorok nem felcserélhetők. Vagy másképp magyarázva, ha az  $\vec{L}$  iránya pontosan meghatározott lenne, akkor az elektronnak egy, erre a vektorra merőleges síkban kéne lennie, ami azt jelenti, hogy az a helykoordináta, melynek egységvektora az  $\vec{L}$  irányba mutat, pontosan meghatározott. A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés következtében az  $\vec{L}$ -el egy egyenesbe eső impulzuskomponens bizonytalanságának végtelennek kéne lennie, ami adott, véges mozgási energiájú részecske esetén lehetetlen. Tehát az  $L_x$  és  $L_y$  komponensek nem lehetnek meghatározottak.

Az elektron impulzusnyomatékának viselkedése szemléletesen írható le az atom vektormodelljének keretén belül. A vektormodell egy félklasszikus modell, amely az elektron impulzusnyomatékának és mágneses nyomatékának tárgyalásához nem ezen

7.6. ábra: Az impulzusmomentum lehetséges irányai  $l = 2$  esetén.

mennyiségek kvantummechanikai operátorát használja, hanem a klasszikus vektorokat. Ugyanakkor a vektorok nagyságának és irányának meghatározásához figyelembe veszi a kvantálási szabályokat.

Ebben a modellben az elektron mágneses nyomatéka és impulzusnyomatéka jól meghatározott szöget zár be a mágneses erővonalakkal, miközben az impulzusmomentum (mágneses momentum) vektor a tér iránya körül precessziós mozgást végez. Így, a kvantummechanikával összhangban, az  $L_z$ -nek meghatározott értéke lesz, míg a másik két impulzusnyomaték-komponensnek nem. Időben átlagolva az  $L_x$  és  $L_y$  értékeit nullát kapunk.

A 7.6 ábrán az impulzusmomentum különböző lehetséges helyzeteit és precessziós mozgását ábrázoltuk  $l = 2$  esetén. Ekkor az impulzusnyomaték modulusza  $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$ , és az  $L_z$  öt értéket vehet fel az  $\vec{L}$  irányainak megfelelően.

Az impulzusnyomaték és a mágneses nyomaték közötti 7.47 összefüggésből kifolyólag a mágneses nyomaték nagysága és iránya is kvantált. A mágneses nyomaték modulusza

$$\mu = \frac{e}{2m}L = \frac{e\hbar}{2m}\sqrt{l(l+1)} \quad (7.49)$$

lesz, míg ennek a nyomatéknak az  $Oz$  irányú vetülete

$$\mu_z = -\frac{e}{2m}L_z = -\frac{e\hbar}{2m}m_l = -\mu_B m_l \quad (7.50)$$

alakban írható fel, ahol  $\mu_B$ , a Bohr-féle magneton, egy univerzális állandó, és értéke

$$\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 \quad (7.51)$$

A 7.48 kifejezés alapján a mágneses térrel való kölcsönhatási energia

$$W_m = -\vec{\mu}\vec{B} = -\mu_z B = \mu_B B m_l \quad (7.52)$$

alakban írható fel, és a mágneses kvantumszám értékétől függ. Ez a kölcsönhatás megszünteti egy energiaszintnek az  $m_l$  szerinti elfajultságát, minden egyes energiaszint  $2l + 1$  alszintre bomlik fel. Az energiszintek mágneses mezőben való felhasadását Zeeman-hatásnak nevezzük.

A fenti, félklasszikus levezetéssel nyert eredmény jó közelítéssel megegyezik a kvantummechanikai levezetéssel kapott eredménnyel. Mégis, a teljesség kedvéért, és a különbségek megvilágítása végett vázoljuk a kvantummechanikai módszert is.

A  $V$  skalárpotenciálban és az  $\vec{A}$  vektorpotenciálban mozgó elektron Hamilton-operátora a következőképpen írható fel

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} + e\vec{A})^2 + V(\vec{r}). \quad (7.53)$$

A mágneses indukció és a vektorpotenciál közötti általános összefüggés  $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$ . Bebizonyítható, hogy homogén mező esetén

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}). \quad (7.54)$$

Elvégezve a Hamilton-operátor első tagjában a négyzetreemelést azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{p}} + e\vec{A})^2 &= \hat{\mathbf{p}}^2 + e(\vec{A}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\vec{A}) + e^2\vec{A}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 + 2e\vec{A}\hat{\mathbf{p}} + e^2\vec{A}^2 = \\ &= \hat{\mathbf{p}}^2 + e(\vec{B} \times \vec{r})\hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{4}(\vec{B} \times \vec{r})^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 + e\vec{B}(\vec{r} \times \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{4}B^2r_{\perp}^2, \end{aligned} \quad (7.55)$$

ahol felhasználtuk a

$$\hat{\mathbf{p}}\vec{A} = -i\hbar\nabla\vec{A} + \vec{A}\hat{\mathbf{p}} = \vec{A}\hat{\mathbf{p}} \quad (7.56)$$

$$\nabla\vec{A} = 0 \quad (7.57)$$

összefüggéseket.

A harmadik tag, ahol a  $B$  a négyzeten szerepel, az  $r^2$  kicsinysége miatt nagyon erős mágneses terek esetén is elhanyagolható a második tag mellett. Ez csak akkor játszik lényeges szerepet, ha az atom saját mágneses nyomatéka nulla, mert ekkor a második tagban  $\vec{r} \times \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{L}}$  operátor is nullát eredményez. A  $B^2$ -el arányos tag az atom diamágneses tulajdonságaiért felel, evvel a jelenséggel azonban a továbbiakban nem foglalkozunk.

A fentiek alapján az elektron Hamilton-operátora a következőképpen írható

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{e}{2m}\vec{B}\hat{\mathbf{L}} + V(\vec{r}) = \hat{H}^0 + \frac{e}{2m}B\hat{L}_z, \quad (7.58)$$

ahol a  $\vec{B}$   $Oz$  irányú.

A fenti képletben a mágneses indukciót tartalmazó tagot perturbációnak tekintjük, és az energiakorrekciót a perturbálatlan energiaszintekhez viszonyítva perturbációs számítással határozzuk meg.

Amint már láttuk, a a perturbálatlan energiaszint legalább  $2l + 1$ -szeresen elfajult. Általános esetben az elfajult szintekre a perturbációs számítás elég bonyolult, de ebben az esetben igen egyszerűen kapjuk meg az eredményt, mert a  $\hat{H}^0$  és az  $\hat{L}_z$  operátoroknak



7.7. ábra: A normális Zeeman-felhasadás.

közös sajátfüggvény-rendszerük van. Jelöljük a perturbálatlan sajátfüggvényeket  $\psi_0^{m_l}$ -el. Az energiakorrekciót elsőrendű perturbációs közelítésben az

$$E_{m_l}^{(1)} = \frac{e}{2m} B \langle \psi_0^{m_l} | \hat{L}_z | \psi_0^{m_l} \rangle = \frac{e}{2m} B \hbar m_l \quad (7.59)$$

képlet adja. Amint látjuk, ebben a közelítésben a kvantummechanikai számítások ugyanazt az eredményt szolgáltatják, mint a klasszikus módszer (7.52 képlet).

A 7.7 ábra a Zeeman-felhasadást mutatja két különböző energiaszint esetén. A két szint közötti átmenet mágneses mező hiányában egy  $\nu_0$  frekvenciájú színeképvonalat eredményez. Mivel az átmenetekre érvényes a  $\Delta m_l = 0, \pm 1$  kiválasztási szabály, a színeképvonal mágneses mezőben három vonalra hasad fel, amelyek frekvenciái

$$\nu_1 = \nu_0 - \frac{e}{2m} B \frac{\hbar}{h} = \nu_0 - \frac{e}{4\pi m} B \quad (7.60)$$

$$\nu_2 = \nu_0 \quad (7.61)$$

$$\nu_3 = \nu_0 + \frac{e}{2m} B \frac{\hbar}{h} = \nu_0 + \frac{e}{4\pi m} B. \quad (7.62)$$

A gyakorlat azonban azt mutatja, hogy az így módon leírt Zeeman-hatás (amelyet normális Zeeman-hatásnak nevezünk) csak néhány atom esetében észlelhető (pl. Ca, Hg). Más atomok színeképe mágneses mezőben egészen másképp néz ki (7.8 ábra). Mivel ezeket a színeképeket a fent vázolt modell alapján nem lehet megmagyarázni, a jelenséget anomális Zeeman-hatásnak nevezik.

Az eddig leírt kvantummechanikai modellnek az anomális Zeeman-hatás sikertelen leírásán kívül más hiányossága is van. Megfigyelték azt, hogy a legtöbb színeképvonal

7.8. ábra: Néhány példa az anomális Zeeman-felhasadásra.

nagy felbontású spektroszkóppal figyelve több, egymáshoz közeli színeképvonalból áll, vagyis finomszerkezetet mutat. Pl. hidrogén esetén a Balmer sorozat  $H_\alpha$  vonala ( $E_3 \rightarrow E_2$  átmenet) első közelítésben két, egymástól  $0,14 \text{ \AA}$ -mel elválasztott hullámhosszúságú vonalból áll. Az anomális Zeeman-hatás és a színeképvonalak finomszerkezetének magyarázata az elmélet tökéletesítését igényli.

## 7.5 Az elektron spinje

Annak érdekében, hogy az anomális Zeeman-hatást és a színeképvonalak finomszerkezetét megmagyarázzák, 1925-ben Goudsmit és Uhlenbeck avval a feltételezéssel éltek, hogy az elektronnak egy saját, intrinszek impulzusmomentuma is van, amely független az orbitális mozgástól. Mivel annak idején ezt az elektron saját tengely körüli forgásának tulajdonították, ezt az saját impulzusnyomatékot spinnek (perdületnek) nevezték el.

A továbbiakban a spin vektort  $\vec{S}$ -el, ennek  $Oz$  tengelyre eső vetületét  $S_z$ -vel jelöljük. A spinhez tartozó mágneses nyomatékot, mely az elektron intrinszek mágneses nyomatéka,  $\mu_s$ -el jelöljük, és spin-mágneses nyomatéknak nevezzük. Ennek az  $Oz$  irányú komponense a  $\mu_{sz}$ .

Az elektron spinjére közvetlen kísérleti bizonyítékot szolgáltatott a már 1921-ben Stern és Gerlach által elvégzett kísérlet. Ezt ezüstatomokkal végezték el, amelynek a külső héján egy elektron található, az is az  $s$  állapotban, tehát az atom orbitális impulzus és mágneses nyomatéka nulla. Az ezüstatom mágneses nyomatékát így teljes egészében az elektron spin-mágneses nyomatéka adja.

Amint az a 7.9 ábrán látható, a kemencéből kilépő ezüstatomokat először kollimálják, majd inhomogén mágneses mezőbe vezetik. Az inhomogén mágneses mezőben a mágneses dipólusra

$$F_z = \mu_{sz} \frac{\partial B}{\partial z} \quad (7.63)$$

erő hat, ha az  $Oz$  tengelyt a mágneses erővonalak irányában vettük fel. A klasszikus fizika szerint a mágneses dipólus tetszőleges irányába állhat be, így a  $\mu_{sz}$  folytonosan változhat. A kísérlet azonban azt mutatta, hogy az ezüstatomokból álló nyaláb az inhomogén mágneses mezőn való áthaladás után egyértelműen két nyalábra bomlik. Ez

7.9. ábra: A Stern-Gerlach kísérlet.

azt jelenti, hogy a  $\mu_{sz}$ -nek két lehetséges értéke van, vagyis a mágneses kvantumszám, amely a spin mágneses nyomaték  $z$  komponensét meghatározza, két értéket vehet fel.

Másrészt, ha a spint jellemző kvantumszámot (spinkvantumszám)  $s$ -el jelöljük, akkor (az orbitális kvantumszámmal analóg módon) a mágneses spinkvantumszám ( $m_s$ )  $2s + 1$  értéket vehet fel. Az elektron esetében tehát

$$2s + 1 = 2 \Rightarrow s = \frac{1}{2} \quad (7.64)$$

és a mágneses spinkvantumszám lehetséges értékei

$$m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (7.65)$$

Az elektron spinkvantumszámának értékét tehát egyszerűen abból a tényből határoztuk meg, hogy az ezüstatomokból álló nyaláb inhomogén mágneses mezőben két nyalábra bomlott fel.

A spin értéke így

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad (7.66)$$

$$S_z = m_s\hbar = \pm \frac{1}{2}\hbar \quad (7.67)$$

lesz. Az, hogy a spinre is ugyanazok a képletek érvényesek, mint az orbitális impulzusnyomatéokra, az impulzusmomentum általános elméletéből következik. A 7.10 ábrán a

7.10. ábra: A spin impulzusnyomaték lehetséges irányai.

spin vektor két lehetséges iránya és vetülete látható. A vektormodell alapján ezek a vektorok is precessziós mozgást végeznek a kitüntetett  $Oz$  tengely körül.

A spin-mágneses nyomaték mennyiségi meghatározása arra az eredményre vezetett, hogy a giromágneses arány a spin esetében 2-szer nagyobb, mint az orbitális mágneses nyomaték esetében. Ennek alapján azt írhatjuk, hogy

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m}\vec{S}, \quad (7.68)$$

illetve

$$\mu_{sz} = -\frac{e}{m}S_z = -\frac{e\hbar}{m}m_s = \pm\frac{e\hbar}{2m} = \pm\mu_B. \quad (7.69)$$

A spin impulzusnyomaték és a spin-mágneses nyomaték fenti tulajdonságai egzakt módon a Dirac által 1928-ban megalkotott relativisztikus kvantummechanika keretében tárgyalhatók.

## 7.6 A spin-pálya kölcsönhatás félklasszikus modellje és a teljes impulzusmomentum

Az atomok energiaszintjeinek finomszerkezeti felhasadása az elektron saját, és a pályamenti mozgásából származó mágneses nyomatékainak kölcsönhatásából származtatható. Ezt a kölcsönhatást spin-pálya kölcsönhatásnak nevezzük.

Az alábbiakban egy félklasszikus modell alapján mutatjuk be a spin-pálya kölcsönhatást, mely minőségileg helyes eredményt szolgáltat. Mennyiségileg pontos leírás csak a relativisztikus kvantummechanika keretén belül lehetséges.

Félklasszikus modellünkben tekintjük úgy, hogy az elektron körpályán kering az atommag körül. Ha most ezt a mozgást az elektron saját rendszerében nézzük, akkor a  $Ze$  töltésű atommag mozog az elektronhoz viszonyítva, és ennek a mozgásnak következtében az elektron egy  $\vec{B}$  indukciójú mágneses mezőt „érez”. Az elektron spin-mágneses nyomatékának kölcsönhatási energiája evvel az orbitális mozgás által generált mágneses mezővel

$$W_{LS} = -\vec{\mu}_s \vec{B} = \frac{e}{m} \vec{S} \vec{B}. \quad (7.70)$$

A mágneses indukció nagyságát a Biot-Savart törvényből határozzuk meg

$$B = \frac{\mu_0 Z e v}{4\pi r^2}, \quad (7.71)$$

ahol  $\mu_0$  a légüres tér mágneses permeabilitása,  $v$  a mag sebessége az elektronhoz viszonyítva,  $r$  az elektronpálya sugara. Az elektron orbitális impulzusnyomatéka az  $L = -mvr$  alakban írható, ahol a negatív előjel azért szerepel, mert  $v$  a mag sebessége, amely ellentétes irányba mutat, mint az elektron maghoz viszonyított sebessége. Innen

$$B = -\frac{\mu_0 Z e L}{4\pi m r^3} = -\frac{L}{mc^2} \frac{1}{r} \frac{Ze}{4\pi \epsilon_0 r^2}, \quad (7.72)$$

ahol  $c$  a fénysebesség,  $\epsilon_0$  pedig a légüres tér elektromos permittivitása. Bevezetve a

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (7.73)$$

elektrosztatikus potenciált, a mágneses indukcióra azt kapjuk hogy

$$B = \frac{L}{mc^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}. \quad (7.74)$$

Ezt a kifejezést behelyettesítve a 7.70 egyenletbe, megkapjuk a spin-pálya kölcsönhatás energiáját. A relativisztikus kvantummechanikai számítások azonban ehhez az eredményhez viszonyítva 2-szer kisebb értéket szolgáltatnak, így a helyes végeredmény

$$W_{LS} = \frac{e}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{S} \vec{L}. \quad (7.75)$$

Látható, hogy egy adott elektronpálya esetén a spin-pálya kölcsönhatási energia az  $\vec{S} \vec{L}$  skaláris szorzat értékétől, vagyis a két vektor által közrezárt szögtől függ. Annak

érdekében, hogy megvizsgáljuk, hogy ez a szorzat adott  $S$  és  $L$  esetén milyen értékeket vehet fel, tanulmányozzuk a továbbiakban az elektron teljes impulzusnyomatékának a lehetséges értékeit.

A teljes impulzusnyomaték az orbitális nyomaték és a spin vektoriális összegeként írható fel

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (7.76)$$

A teljes impulzusnyomaték nagyságára és  $Oz$  tengelyre való vetületére a már ismert kvantálási szabályok érvényesek

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad (7.77)$$

ahol  $j$  a teljes impulzusmomentumot jellemző kvantumszám, illetve

$$J_z = m_j \hbar, \quad (7.78)$$

ahol az  $m_j$  mágneses kvantumszám  $-j$  és  $+j$  között egyesével változhat,  $2j+1$  lehetséges értéket véve fel.

A 7.76 vektoregyenletet levetítjük az  $Oz$  tengelyre

$$J_z = L_z + S_z, \quad (7.79)$$

majd felhasználva mindegyik komponensre a kvantálási feltételt, a mágneses kvantumszámok közötti összefüggéshez jutunk

$$m_j = m_l + m_s. \quad (7.80)$$

A továbbiakban megvizsgáljuk, hogy adott  $l$  és  $s$  esetén a  $j$  kvantumszám milyen értékeket vehet fel, vagyis az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  egymással milyen szögeket zárhatnak be.

A  $j$  maximális értéke az  $m_j$  maximumával lesz egyenlő, amelyre írható, hogy

$$j_{\max} = \max\{m_l\} + \max\{m_s\} = l + s, \quad (7.81)$$

ugyanakkor a minimális érték az  $l$  és  $s$  kvantumszámok különbségének modulusza lesz

$$j_{\min} = |\max\{m_l\} - \max\{m_s\}| = |l - s|. \quad (7.82)$$

Összefoglalva

$$|l - s| \leq j \leq l + s, \quad (7.83)$$

ahol  $j$  a minimális és maximális érték között egyesével változhat. A fenti egyenlőtlen-ségből az is belátható, hogy mivel  $l$  egész szám, és egy elektron esetén  $s = 1/2$ , a  $j$  értéke feles szám lesz, éspedig  $j = l \pm 1/2$  (ha  $l = 0$ , csak a  $+$  jel lehetséges). Több elektronból álló rendszer esetén, amikor az  $s$  egész szám is lehet, természetesen a teljes impulzusnyomatékot jellemző kvantumszám is lehet egész. Adott  $l$  és  $s$  esetén a  $j$  kvantumszám  $2s + 1$  értéket vehet fel, ha  $l \geq s$ , illetve  $2l + 1$  értéket, ha  $s \geq l$ .

A 7.83 összefüggés egzakt módon az impulzusnyomatékok összeadásának kvantummechanikai elméletéből következik, de nagyon jól illusztrálható a vektormodell

7.11. ábra: A spin és pályanyomatékok csatolása  $l = 1$  és  $s = 1/2$  esetén.

segítségével is. A 7.76 egyenlőség alapján a három vektor egy háromszöget kell hogy alkosson (7.11 ábra). A háromszög oldalaira érvényesnek kell lennie az

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (7.84)$$

egyenlőtlenségnek, ahonnan figyelembevéve, hogy a kvantumszámok csak egész és feles értékeket vehetnek fel, következik a 7.83 egyenlőtlenség. Ezért a 7.83 összefüggést háromszög-egyenlőtlenségnek is hívjuk.

Külső erőtér hiányában az elektron teljes impulzusnyomatéka megmaradó mennyiség. Ugyanakkor a spin-pálya kölcsönhatás következtében az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  nem maradnak meg külön-külön. Ezért a vektormodell alapján úgy tekinthetjük, hogy az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  összehangolt precessziós mozgást végez a  $\vec{J}$  körül (7.12 ábra).

Térjünk most vissza a spin-pálya kölcsönhatás energiájának 7.75 kifejezésére, és vizsgáljuk ennek csak az  $\vec{L}$  és  $\vec{S}$  viszonylagos helyzetétől való függését. Írjuk fel ezt a kifejezést egyszerűsítve

$$W_{LS} = A \frac{\vec{S}\vec{L}}{\hbar^2}, \quad (7.85)$$

ahol  $A$  egy adott,  $n$ ,  $l$  és  $s$  kvantumszámokkal jellemzett elektronpálya esetén állandó. A skaláris szorzat függ a két vektor által közrezárt szögtől ( $\vec{S}\vec{L} = SL \cos \alpha$ ), amelyet az impulzumomentumok által alkotott háromszögből ki tudunk fejezni a  $J$  függvényében.

$$L^2 + S^2 + 2SL \cos \alpha = J^2, \quad (7.86)$$

ahonnan

$$SL \cos \alpha = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) = \frac{1}{2}\hbar^2[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]. \quad (7.87)$$

A spin-pálya kölcsönhatási energia ezek alapján adott  $n$ ,  $l$  és  $s$  esetén csak a teljes impulzumomentum  $j$  kvantumszámától függ

$$W_{LS} = \frac{A}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)], \quad (7.88)$$

7.12. ábra: Az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  precessziós mozgása a megmaradó  $\vec{J}$  körül.

és egy energiaszint annyi alszintre hasad fel a spin-pálya kölcsönhatás következtében, ahány értéket a  $j$  felvehet. Ha a  $j$  két értéket vehet fel, mint pl. a hidrogénatom  $l \neq 0$  gerjesztett szintjei esetén, dublettről beszélünk. Általános esetben a finomszerkezet mutató energiaszinteket multiplettnek nevezzük.

Két szomszédos,  $j$ -vel illetve  $j - 1$ -el jellemzett finomszerkezeti energiaszint közötti különbség

$$\Delta E_{j,j-1} = \frac{1}{2}Aj(j+1) - \frac{1}{2}A(j-1)j = Aj \quad (7.89)$$

lesz. Ez a Landé-féle intervallumszabály. Az energiakülönbség a két szomszédos finomszerkezeti szint között  $4,5 \cdot 10^{-5}$  eV a hidrogén  $2p$  szintje esetén. A finomszerkezeti felhasadás nő a nagyobb rendszámú atomok esetén, pl. a  $Na$   $3p$  szintje  $\Delta E = 2,1 \cdot 10^{-3}$  eV-al hasad fel, ami a kibocsátott fényben  $6 \text{ \AA}$  hullámhossz-különbségnek felel meg a  $3p \rightarrow 3s$  átmenet esetén. Ez a két egymáshoz közeli, sárga színképvonal igen jellemző a nátrium színképére.

Abban az esetben, amikor az atom külső héján egy elektron található, vagy a külső elektronhéj felénél kevésbé betöltött,  $A > 0$ . Ekkor normális multiplettről beszélünk. Ellenkező esetben, ha a héj felénél jobban betöltött,  $A < 0$ , és a multiplett fordított lesz.

Amint láttuk, egy atom elektronjának (vagy elektronrendszerének) impulzusmomentum-állapota, melytől az energiája is függ, három kvantumszámmal fejezhető ki, az  $l$ , az  $s$  és a  $j$ -vel. Ezekhez még hozzávesszük az  $n$  főkvantumszámot, amely a külső elektronhéjat jellemzi. A továbbiakban olyan egyezményes jelölést (term-jelölést) vezetünk be, amelyből ezek a kvantumszámok leolvashatók, és amely így egyértelműen jellemzi az elektronrendszer állapotát.

A term-jelölés alapja az  $l$  kvantumszámot kifejező nagy betű, mely az elektronrendszer teljes orbitális nyomatékát jellemzi. Ez analóg az orbitál-jelöléssel, vagyis  $l = 0, 1, 2, 3, 4 \dots$  esetén a  $S, P, D, F, G$  stb. Ehhez a betűhöz bal felső indexnek a  $2s + 1$



multiplicitást írjuk, amely kifejezi, hogy szinglettről, dublettről vagy tripletről stb. van szó. Jobb alsó indexnek a teljes impulzusmomentum  $j$  kvantumszáma kerül, és az egész jelölés elé esetleg beírjuk az  $n$  főkvantumszámot

$$n^{2s+1}X_j. \quad (7.90)$$

A fentiek alapján például egy  $s = 1/2$ ,  $l = 1$ ,  $j = 3/2$ - el jellemzett impulzusmomentum-állapotot  ${}^2P_{3/2}$ -el jelölünk, vagy a  $Na$  atom alapállapota  $3^2S_{1/2}$ .

Itt jegyezzük meg, hogy nagyon nagy felbontású spektroszkóp egy finomszerkezeti vonalnak további struktúráját mutatja ki. A finomszerkezeti vonalak további felhasadását hiperfinom-szerkezetnek nevezzük. A hiperfinom szerkezet magyarázata az, hogy az atommagnak is van mágneses nyomatéka, bár három nagyságrenddel kisebb, mint az elektroné. Az elektron teljes mágneses nyomatéka a mag mágneses nyomatékához viszonyítva különböző irányokba állhat be, különböző kölcsönhatási energiákat eredményezve. Ennek, a mag és az elektron mágneses nyomatékai közötti kölcsönhatásnak következtében jelenik meg az energiaszintek hiperfinom-szerkezete. A tipikus energiakülönbség a hiperfinom-szerkezeti vonalak között  $10^{-6}$  eV, amely a színképben  $10^{-2}$  Å hullámhossz-különbségnek felel meg.

## 7.7 A hidrogénatom relativisztikus és kvantumelektrodinamikai leírásának következményei

Ebben a fejezetben, anélkül hogy elmélyednénk a hidrogénatom relativisztikus vagy kvantumelektrodinamikai tárgyalásában, ezeknek a leírásmódoknak néhány jellemző következményére, illetve ezeknek a kísérleti megerősítésére hívjuk fel a figyelmet.

Láttuk a 6.3 fejezetben, hogy már a Bohr-Sommerfeld modell keretén belül felmerült, hogy a színképvonalak finomszerkezeti felhasadását relativisztikus hatásokkal magyarázzák. A következő próbálkozás a Klein-Gordon egyenlet segítségével történt, amely a Schrödinger-egyenlet relativisztikus megfelelője, de nem veszi figyelembe az elektron spinjét. A stacionárius Klein-Gordon egyenlet a hidrogénatomra a következőképpen írható fel

$$\nabla^2\psi(\vec{r}) + \frac{1}{c^2\hbar^2} \left[ \left( E + m_0c^2 + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^2 - m_0^2c^4 \right] \psi(\vec{r}) = 0, \quad (7.91)$$

ahol  $m_0$  az elektron nyugalmi tömege. Ez az egyenlet is, akárcsak a Schrödinger-egyenlet, szeparálható orbitális és radiális részre, ahol az orbitális rész megoldásai a jól ismert gömbfüggvények. A radiális egyenletnek csak akkor van elfogadható megoldása, ha az energiának jól meghatározott értékei vannak, amelyek az  $n_r$  radiális kvantumszámtól és az  $l$  orbitális kvantumszámtól függenek. Az energia sajátértékei a következő képlettel adhatók meg

$$E_{n_r, l} = m_0c^2 \left[ 1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left( n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - Z^2\alpha^2} \right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} - m_0c^2, \quad (7.92)$$

ahol  $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0 c\hbar)$  a finomszerkezeti állandó. Ha sorbafejtjük a fenti kifejezést  $Z^2\alpha^2$  szerint csak az első két tagot megtartva, és  $n_r + l + 1$  helyébe az  $n$  főkvantumszámot írjuk, azt kapjuk, hogy

$$E_{n,l} = -\frac{RhcZ^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (7.93)$$

ahol  $R$  a Rydberg-állandó. Így a Klein-Gordon egyenlet alapján a hidrogénatom energiaszintjei a mellékvantumszámtól is függenek. Ez az  $l$  szerinti felhasadás pl.  $n = 2$  esetén, a Balmer-sorozat dublettjei között

$$\Delta\nu = \frac{8 R c \alpha^2}{3 \cdot 16} \quad (7.94)$$

frekvenciakülönbséget jósol. A megfigyelt felhasadás méréke azonban ennél az értéknél szinte háromszor kisebb.

Az előző fejezet fényében világos, hogy a hiba abban van, hogy a Klein-Gordon egyenlet nem veszi figyelembe az elektron spinjét. A spint is figyelembevevő relativisztikus hullámegyenlet a Dirac-egyenlet. E szerint a relativisztikus elektronhoz rendelt hullámfüggvénynek négy komponense van, az alábbiakban szereplő  $\Psi$  egy négy elemből álló oszlop mátrix alakjában írható fel. A Dirac-egyenlet alakja

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_D \Psi, \quad (7.95)$$

ahol  $\hat{H}_D$  az elektron Hamilton-operátora. Ez szabad részecske esetén

$$\hat{H}_D = \hat{\alpha} \hat{\mathbf{p}} c + \hat{\beta} m_0 c^2, \quad (7.96)$$

ahol  $\hat{\alpha} = (\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z)$  és  $\hat{\beta}$  hermiti operátorok, melyek csak a spinváltozókra hatnak,  $\hat{\mathbf{p}}$  pedig az impulzus operátora. Elektromos és mágneses mezőben a Hamilton operátor a

$$\hat{H}_D = eV + \hat{\alpha}(\hat{\mathbf{p}} - e\vec{A})c + \hat{\beta} m_0 c^2, \quad (7.97)$$

alakú lesz, ahol  $V$  az elektrosztatikus potenciál míg  $\vec{A}$  a mágneses vektorpotenciál.

A 7.95 Dirac-egyenletet a hidrogénszerű ionokra megoldva, a lehetséges energiaértékekre az

$$E_{n,j} = m_0 c^2 \left[ 1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n - \epsilon_j)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} - m_0 c^2 \quad (7.98)$$

kifejezés adódik, ahol

$$\epsilon_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2} \quad (7.99)$$

és  $\alpha$  a finomszerkezeti állandó. Fontos megfigyelni, hogy az energia ebben a modellben nem függ az orbitális kvantumszámtól, hanem csak a teljes impulzusnyomatékot jellemző  $j$  kvantumszámtól. Ha a fenti kifejezést a  $Z^2\alpha^2$  szerint sorbafejtjük, és csak másodrendig írjuk ki a tagokat, az

$$E_{n,j} = -\frac{RhcZ^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (7.100)$$

7.13. ábra: A hidrogénatom energiaszintjei a Dirac-elmélet alapján.

egyszerűbb kifejezéshez jutunk.

A fenti megoldás csak abban az esetben létezik, ha a  $Z$  rendszám kisebb egy adott kritikus értéknél, amelyre az energia elérné a  $-m_0c^2$  értéket. (pl.  $j = 1/2$  esetén  $Z < 137$ ). Ennél nagyobb töltésű mag esetén az elektrosztatikus mező elektron-pozitron párokat keltene, tehát az ilyen nagy rendszámú atom nem lehet stabil.

A (7.100) szerint, ha az elektron orbitális kvantumszáma,  $l \geq 1$ , minden egyes  $n, l$ -el jellemzett energiaszint két alszintre bomlik fel. Mivel a hidrogénatomban a nemrelativisztikus kvantumelmélet szerint az energiaszintek  $l$  szerint elfajultak, egy energiaszint három vagy több alszintet is tartalmazhat, attól függően, hogy adott  $n$  esetén a  $j$  hány értéket vehet fel. Ugyanakkor a különböző mellékkvantumszámmal de azonos  $j$ -vel jellemzett szintek a Dirac-elmélet szerint a hidrogénatomban pontosan egybeesnek, tehát az elfajultság nem szűnik meg teljesen.

A 7.13 ábrán a hidrogénatom első három energiaszintjének finomszerkezetét tüntetjük fel, ahogy az Dirac elméletéből következik. Amint látjuk, a  $2s_{1/2}$  és a  $2p_{1/2}$  szintek pontosan egybeesnek, míg a  $2p_{3/2}$  szint magasabb energiájú lesz. Az  $n = 2$  energiaszint a 7.100 képlet alapján a következő mértékben hasad fel

$$\frac{E(2s_{1/2})}{h} = \frac{E(2p_{1/2})}{h} = \frac{Rc}{4} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{4} \left( 2 - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (7.101)$$

$$\frac{E(2p_{3/2})}{h} = \frac{Rc}{4} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{4} \left( 1 - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (7.102)$$

$$\Delta\nu = \frac{E(2p_{3/2})}{h} - \frac{E(2s_{1/2})}{h} = Rc \frac{\alpha^2}{16} = 1,095 \cdot 10^4 \text{MHz}, \quad (7.103)$$

tehát a  $H_\alpha$  színeképvonal ( $n = 3 \rightarrow n = 2$  átmenet) két fő finomszerkezeti vonala közötti frekvenciakülönbség  $\Delta\nu$  lesz. Ez az érték, amint látjuk, kisebb a Klein-Gordon egyenlet által jósoltnál, és nagy pontossággal megegyezik a kísérleti tapasztalattal.

Annak következtében, hogy az  $n = 3$  szint is felbomlik, a  $H_\alpha$  színeképvonal több finomszerkezeti vonalból áll, azonban az  $n = 3$  szint felhasadása kisebb mértékű. Mivel az optikai átmenetekre érvényes a  $\Delta j = 0, \pm 1$  kiválasztási szabály, a Dirac emélete szerint a hidrogén Balmer-sorozatának  $\alpha$  vonala 5 finomszerkezeti vonalból áll. Ezeket kísérletileg is kimutatták.

7.14. ábra: A Lamb-eltolódás kimutatására szolgáló kísérleti berendezés. 1–wolfram kemence; 2–elektronnyaláb; 3–radiofrekvenciás elektromos mező; 4–céltárgy; 5–galvanométer.

A jó kísérleti egyezés ellenére is felmerült a kétség, hogy a Dirac-elmélet nem írja le pontosan a hidrogénatomot, és a  $2s_{1/2}$  és a  $2p_{1/2}$  energiaszintek nem esnek teljesen egybe. Ezt a feltételezett különbséget azonban optikai módszerekkel nem lehet kimutani, mivel a  $\Delta l = \pm 1$  kiválasztási szabály miatt nincs olyan állapot, amelyből optikai átmenet történhet úgy a  $2s_{1/2}$  mint a  $2p_{1/2}$  állapotba. A  $2s_{1/2}$  állapot metastabil állapot, és a közvetlen átmenet az  $1s_{1/2}$  alapállapotba csak nagyon kis valószínűséggel, két foton útján, vagy elektronnal való ütközéssel valósulhat meg. Lehetséges viszont először a  $2p_{1/2}$  állapotba való átmenet, ahonnan aztán már optikailag megengedett az alapállapot elérése.

Lamb és Rutherford 1947-ben ezt a feltételezett  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  átmenetet mutatták ki. Mivel a két szint közötti feltételezett különbség igen kicsi, a kibocsátott sugárzás frekvenciája a rádiófrekvenciák tartományába esik. Ezért ennek az átmenetnek a kimutatása rádióspektroszkópiás módszert igényel.

Lamb és Rutherford a 7.14 ábrán látható kísérleti berendezést használták. A kemencéből  $1s_{1/2}$  állapotban lévő hidrogénatomok lépnek ki. A keresztirányú elektronnyaláb gerjeszti az atomokat, egy részüket a  $2s_{1/2}$  állapotba. A gerjesztett atomok a céltárgynak átadják energiájukat, elektronokat szabadítva ki a fémből. Ezt az elektronáramot a galvanométer kimutatja. Ha viszont a céltárgyba alapállapotban lévő atomok ütköznek, ezek energiája nem elegendő ahhoz, hogy elektronokat szabadítsanak ki a fémből.

A rádiófrekvenciás elektromágneses rezgéssel indukálni lehet a  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  átmenetet. Az átmenet akkor lesz a legvalószínűbb, ha az indukáló rezgés frekvenciája megfelel a két szint közötti átmenet frekvenciájának,  $\nu = \Delta E/h$ . A  $2p_{1/2}$  állapot átlagos élettartama igen rövid, az atomok alapállapotba mennek át, még mielőtt elérnék a céltárgyat. Az alapállapotban a céltárgyba csapódó atomok pedig már nem készítetik kilépésre az elektronokat. Így a rádiófrekvenciás rezgés bekapcsolásának csökkentenie kell a mért áramerősséget, és ennek akkor lesz minimuma, amikor a rezgés frekvenciája megegyezik a  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  átmenet frekvenciájával.

Ugyanakkor a rádiófrekvenciás rezgés a  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$  átmenetet is indukálhatja. Ily módon nagy pontossággal mérhető az egyes állapotok közötti energiakülönbségek. A kísérletek eredményét a 7.15a ábrán tüntettük fel, összehasonlítva a Dirac-elmélet jóslatával (7.15b ábra). Amint látható, a valóságban a  $2s_{1/2}$  állapot nagyobb energiájú,

7.15. ábra: A hidrogénatom  $n = 2$  energiaszintjének szerkezete kísérletileg (a) és a Dirac-elmélet szerint (b). A rajzon a szintek közötti frekvenciakülönbséget tüntettük fel MHz-ben.

mint a  $2p_{1/2}$ , a közöttük létrejövő optikai átmenet frekvenciája 1058 MHz, ami  $\lambda = 28$  cm hullámhossznak felel meg.

Ezt az eltolódást a két szint között Lamb-eltolódásnak nevezzük. A Lamb-eltolódás elméleti magyarázata a kvantumelektrodinamikai hatások figyelembevételével történhet. Az erre vonatkozó elméleti számítást 1949-ben végezték el. Ez a Lamb-eltolódás energiájára

$$\Delta E = 0,41m_0c^2\alpha^5 \quad (7.104)$$

értéket jósol, ami nagyon jól egyezik a kísérleti értékkel. A kvantumelektrodinamikai hatások a magasabb energiaszintek  $l$  szerinti elfajultságát is megszüntetik.



# 8

## A többelektronos atom

Amint az előző fejezetben láttuk, a hidrogénatom elméleti tárgyalása igen nagy pontossággal lehetséges. Jóval bonyolultabb a több elektront tartalmazó atomok leírása. Egyrészt a többtest-problémát még klasszikusan sem lehet egzakt módon megoldani, másrészt pedig az elektron-spinek következtében más típusú elektron–elektron kölcsönhatások is megjelennek.

### 8.1 A Pauli-féle kizárási elv

A hidrogénatom nemrelativisztikus kvantummechanikai leírása nyomán azt gondolhatnánk, hogy egy többelektronos atom alapállapotában minden elektron a legalacsonyabb energiájú állapotban található. A tapasztalat azonban azt mutatja, hogy ez nem így van, egy adott energiaszinten csak meghatározott számú elektron foglalhat helyet.

A többelektronos atomok spektrumát tanulmányozva 1925-ben Pauli megfogalmazta a kizárási elvet. E szerint egy atomban nem létezhet két elektron ugyanabban a kvantumállapotban. Mivel egy elektron állapotát az atomban négy kvantumszámmal jellemezhetjük  $(n, l, m_l, m_s)$ , a Pauli-féle kizárási elv úgy is megfogalmazható, hogy ugyanabban az atomban található két elektron esetén a jellemző kvantumszámok közül legalább az egyiknek különböznie kell.

Annak érdekében, hogy a Pauli-féle kizárási elv mélyebb okát megvilágítsuk, tekintsünk egy  $n$  elektront tartalmazó rendszert. Ha elhanyagoljuk az elektronok közötti kölcsönhatásokat (független-elektronos közelítés), a rendszer hullámfüggvénye az egyes elektronok hullámfüggvényének szorzataként írható fel

$$\Psi(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_n) = \psi_a(\vec{q}_1)\psi_b(\vec{q}_2) \cdots \psi_\nu(\vec{q}_n), \quad (8.1)$$

ahol  $\vec{q}_i$  az  $i$  indexű elektront jellemző koordináták összességét jelenti, amely a spin-állapotot leíró koordinátát is tartalmazza. Vizsgáljuk az elektront leíró hullámfüggvény szimmetriatulajdonságait a részecskék felcserélésére nézve. Az egyszerűség kedvéért vegyünk csak egy két-elektron rendszert, ahol az egyik elektron az  $a$  állapotban, míg a másik a  $b$  állapotban található, és egyszerűsítsük a koordináták jelölését ( $\vec{q}_i$  helyébe  $i$ -t írunk)

$$\Psi(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2). \quad (8.2)$$

Azonban a két elektron azonos részecske, amelyek a kvantummechanikában megkülönböztethetetlenek. Ezért az elektronok megtalálhatósági valószínűsége nem változhat, ha a hullámfüggvényben az 1. részecske koordinátáit felcseréljük a 2. részecske koordinátaival

$$|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2. \quad (8.3)$$

A fenti egyenlőség megköveteli, hogy a hullámfüggvény szimmetrikus vagy antiszimmetrikus legyen a két részecske felcserélésére nézve

$$\Psi(2, 1) = \Psi(1, 2) \quad (8.4)$$

vagy

$$\Psi(2, 1) = -\Psi(1, 2). \quad (8.5)$$

A 8.2 szorzat-függvény se nem szimmetrikus (ha  $a \neq b$ ) se nem antiszimmetrikus, ezért a hullámfüggvényt szimmetrizálni kell. Legyen

$$\Psi_I = \psi_a(1)\psi_b(2) \quad (8.6)$$

$$\Psi_{II} = \psi_a(2)\psi_b(1). \quad (8.7)$$

E két szorzat lineáris kombinációjával lehet szimmetrikus és antiszimmetrikus hullámfüggvényeket előállítani

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)] \quad (8.8)$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)], \quad (8.9)$$

ahol az  $1/\sqrt{2}$  faktor a hullámfüggvény normálását biztosítja.

Ha feltételezzük, hogy a két részecske ugyanabban a kvantumállapotban van ( $a \equiv b$ ), akkor

$$\Psi_S = \psi_a(1)\psi_a(2) \quad (8.10)$$

$$\Psi_A = 0, \quad (8.11)$$

tehát az antiszimmetrikus hullámfüggvény nem létezhet két, ugyanabban az állapotban található részecske esetén. Ez azt jelenti, hogy az antiszimmetrikus hullámfüggvénnyel rendelkező részecske-rendszerek esetén két részecske nem lehet ugyanabban a kvantumállapotban, tehát ezekre érvényes a Pauli-féle kizárási elv. Ugyanakkor a szimmetrikus hullámfüggvénnyel rendelkező részecske-rendszerek esetén akárhány részecske lehet ugyanabban az állapotban.

A kvantummechanikában bebizonyítják, hogy az azonos részecskéket tartalmazó rendszer Hamilton-operátora felcserélhető a részecskék permutációját megvalósító operátorral. Ennek egyenes következménye az, hogy egy részecske-rendszer szimmetriája megmaradó mennyiség, tehát a rendszer minden állapota ugyanolyan szimmetriájú lesz (szimmetrikus vagy antiszimmetrikus). Így a rendszer szimmetriája az őt alkotó részecskék belső tulajdonságától függ.



Azokat a részecskéket, amelyekből álló rendszer hullámfüggvénye antiszimmetrikus, fermionoknak nevezzük. Ilyenek az elektronok, és minden más olyan részecske, amelynek spinje feles értékű (protonok, neutronok, neutrínók, feles spinű atommagok stb.). Azokat a részecskéket, melyek szimmetrikus hullámfüggvénnyel leírható rendszert alkotnak, bozonoknak nevezzük. A bozonok spinje egész szám, ilyenek a fotonok, mezonok, egész spinű atommagok stb.

A Pauli-féle kizárási elv tehát minden fermionból álló rendszerre érvényes. Ezek hullámfüggvényét, így az elektronokból álló rendszer hullámfüggvényét is, mindig antiszimmetrikus alakban kell felírunk, tehát két részecske-koordináta kicserélése mindig a hullámfüggvény előjelének megváltozását kell hogy eredményezze. Egyszerű módja az antiszimmetrikus hullámfüggvény felírásának (tetszőleges számú,  $n$  részecskét tartalmazó rendszer esetén) a Slater-determináns

$$\Psi_A(1, 2, \dots, n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) & \cdots & \psi_\nu(1) \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) & \cdots & \psi_\nu(2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_a(n) & \psi_b(n) & \cdots & \psi_\nu(n) \end{vmatrix}, \quad (8.12)$$

ahol az  $a, b, \dots, \nu$  állapotok száma megegyezik az elektronok számával. Ez a felírási módja a hullámfüggvénynek tartalmazza a Pauli-féle kizárási elvet: ha két állapot megegyezik, vagyis a determináns két oszlopa azonos, akkor a hullámfüggvény identikusan nulla lesz, tehát ilyen rendszer nem létezhet.

## 8.2 Elektron-konfigurációk

A többielektronos atom struktúráját az alábbi alapvető szabályok határozzák meg:

- Egy részecskerendszer akkor stabil, ha a teljes energiája minimális (energiaminimum elve).
- Egy adott kvantumállapotban nem lehet több egy elektronnál (Pauli-féle kizárási elv).

Így az atomban az energiszintek a növekvő energia sorrendjében töltődnek fel. Egy adott kvantumállapot energiájának kiszámításához több közelítő módszer létezik.

A mag–elektron kölcsönhatáson kívül figyelembe kell vennünk az elektron–elektron kölcsönhatásokat is. Egy elektron kölcsönhatása az összes többivel elég jól leírható a többi által keltett átlagolt elektromos potenciál (árnyékolási potenciál) segítségével. Ezekre a közelítő módszerekre a következő fejezetekben visszatérünk. Tekintsük most ismertnek a kvantumállapotok energiáit, és koncentráljunk az energiaszintek elektronokkal való feltöltődésének sorrendjére.

Az azonos főkvantumszámmal ( $n$ ) jellemezhető elektronok körülbelül ugyanolyan átlagos távolságra találhatók a magtól, ezért energiájuk is hozzávetőlegesen megegyezik. Az azonos főkvantumszámú elektronok alkotják az elektrönhéjat. A héjakat

nagy betűkkel szoktuk jelölni

$$\begin{array}{cccccccc} n & = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots \\ \text{héj} & & K & L & M & N & O & \dots \end{array}$$

Egy többelektronos atom esetén az elektron energiája az árnyékolási potenciál következtében a mellékkvantumszámtól ( $l$ ) is függ. Kis  $l$  esetén az elektron átlagosan közelebb található az atommaghoz mint nagyobb orbitális nyomaték esetén. Ezért egy adott héjon belül az elektron energiája nő az  $l$  növekedésével.

Az azonos  $n, l$  számpárossal jellemezhető elektronállapotok alkotják az alhéjat. Az alhéj jelölése megegyezik az őt alkotó orbitálok jelölésével ( $s, p, d, f$ ), amely elé beírjuk a főkvantumszámot (pl.  $1s$  vagy  $2p$ ).

Egy adott alhéjon belül az elektronok energiája csak kis mértékben függ az  $m_l$  és az  $m_s$  kvantumszámok értékétől. Ezért első közelítésben egy adott alhéjon található elektronok energiája azonosnak tekinthető.

Egy alhéjon a Pauli-féle kizárási elv értelmében leg több  $2(2l+1)$  elektron lehet, mert a mágneses kvantumszámnak mind a  $2l+1$  értékére az  $m_s$  mágneses spinkvantumszám két értéket vehet fel. Így a különböző orbitálokban található elektronok maximális száma a következő táblázattal foglalható össze

| orbitál | max $e^-$ |
|---------|-----------|
| $s$     | 2         |
| $p$     | 6         |
| $d$     | 10        |
| $f$     | 14.       |

Egy adott héjon maximálisan

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2 \quad (8.13)$$

elektron található, tehát a telített héjak

|     |               |    |
|-----|---------------|----|
| $K$ | $\rightarrow$ | 2  |
| $L$ | $\rightarrow$ | 8  |
| $M$ | $\rightarrow$ | 18 |
| $N$ | $\rightarrow$ | 32 |

elektront tartalmaznak.

A 8.1 ábrán a különböző alhéjakban található elektronok kötési energiáját ábrázoltuk a rendszám függvényében. A diagramról fentről lefelé (a növekvő energia, csökkenő kötési energia irányában) haladva könnyen leolvasható bármely atom esetén az alhéjak feltöltődési sorrendje. Ismerve az egyes alhéjakban található elektronok maximális számát, egy atom alapállapotú elektronkonfigurációja könnyen meghatározható. Elektronkonfiguráció alatt egy több elektronból álló rendszeren belül az egyes elektronok állapotának (hullámfüggvényének) a rögzítését értjük. Egy rendszer csak a Hartree-Fock közelítésben (lásd a következő fejezeteket) jellemezhető egyetlen konfiguráció segítségével, de ez egy nagyon jó közelítés.

8.1. ábra: A különböző alhéjakon található elektronok kötési energiája (1 Ry = 13,6 eV).

Egy adott konfiguráció felírása esetén az alhéj jele mellé jobb felső indexnek felírjuk az illető alhéj betöltési számát, vagyis hogy hány elektron található az alhéjon. Telített alhéj esetén ez a már kiszámított maximális elektron-számmal egyenlő. Alapállapotban minden belső héj és alhéj telített, az energiaminimum elvének értelmében.

Ily módon például a nitrogén atom ( $Z = 7$ ) alapállapotú konfigurációja

$$1s^2 2s^2 2p^3$$

lesz, míg egy nagyobb rendszámú elem konfigurációja a következőképpen kezdődik

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 \dots$$

Amint a 8.1 ábrán látható, a  $3d$  és a  $4s$  szintek sorrendje függ a rendszámtól (a görbék keresztezik egymást). Ezért a  $Cr$  ( $Z = 24$ ) és a  $Cu$  ( $Z = 29$ ) esetén a külső alhéjak konfigurációi  $4s^1 3d^5$  illetve  $4s^1 3d^{10}$ , tehát a  $4s$  alhéj nincs teljesen betöltve.

Az alhéjak egymáshoz viszonyított energiáit energiadiagramon is szokták ábrázolni. Egy tipikus nehezebb atom elektronállapotainak energiadiagramja a 8.2 ábrán látható.

8.2. ábra: Egy tipikus nehezebb atom alhéjainak energiadiagramja.

Az egyes alhéjakon belül a feltöltődés sorrendjét a Hund-szabály alapján lehet megállapítani. Ez kimondja, hogy ha lehetséges, egy alhéjon belül az elektronok spinjei párhuzamosan állnak be. Más szóval, az  $m_s$  kvantuszámok, amíg ez lehetséges, mind azonos előjelűek lesznek, úgy, hogy az elektronrendszer teljes spinje maximális legyen.

Ennek a szabálynak az okát két elektron esetén világítjuk meg. Egy két-elektron rendszer hullámfüggvénye mindig felírható egy, csak a térbeli koordinátáktól ( $\vec{r}_i$ ) függő, és egy csak a spintől függő függvény szorzataként

$$\Psi(1, 2) = u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)s(\sigma_1, \sigma_2), \quad (8.14)$$

ahol  $\sigma_i$  a spinkoordinátákat jelöli. Ha a két elektron spinje ugyanolyan irányítású, akkor a teljes spin maximális ( $S = 1$ ), és a spintől függő hullámfüggvény szimmetrikus lesz, mert ha a két részecske koordinátáit felcseréljük, ez a függvény nem vált előjelet. Ebből következik, hogy a térbeli koordinátáktól függő hullámfüggvény ebben az esetben antiszimmetrikus kell hogy legyen. Ha pedig egy antiszimmetrikus hullámfüggvénybe a két elektronnak ugyanazt a koordinátát írjuk be (ami azt jelenti, hogy a két elektron a térben ugyanott tartózkodik), akkor a hullámfüggvény, és ebből következően a tartózkodási valószínűség, nulla lesz. Ezért antiszimmetrikus térbeli hullámfüggvény esetén az elektronok egymáshoz viszonyított átlagos távolsága nagyobb, mint a szimmetrikus hullámfüggvény esetén, ami alacsonyabb energiájú állapotot eredményez.

A fenti gondolatmenet általánosítható több elektron esetére is: minél nagyobb a rendszer teljes spinje, a térbeli hullámfüggvények úgy változnak, hogy az elektronok egymáshoz viszonyított átlagos távolsága nagyobb legyen, tehát annál alacsonyabb lesz a rendszer teljes energiája.

A spineknek a Hund-szabály alapján történő párhuzamos beállása magyarázza a vas, a kobalt és a nikkellal ferromágneses tulajdonságait. Másrészt, ha egy alhéj teljesen

betöltött, akkor ugyanannyi elektronunk lesz  $m_s = +1/2$ -el mint  $m_s = -1/2$ -el, tehát egy betöltött alhéj esetén az elektronrendszer teljes spinje nulla lesz.

### 8.3 Az elektron impulzusmomentumainak csatolása

A többelektronos atom teljes impulzusnyomatéka az egyes elektronok spin-és pályanyomatékaiból tevődik össze. Az impulzusmomentumok összetevődésének vagy csatolásának módja az egyes impulzusmomentumok közötti kölcsönhatás nagyságától függ. A megfelelő impulzusmomentum-csatolásokkal elkészített hullámfüggvényekkel pontosabban, egyszerűbben végezhetünk számításokat.

Az egyes elektronok orbitális-és spinnyomatékait  $L_i$ -vel illetve  $S_i$ -vel jelöljük. Az elektronrendszer teljes orbitális impulzusnyomatéka  $L$ , a teljes spinje  $S$ . Az egyes elektronok teljes impulzusnyomatékát  $J_i$ -vel, míg a rendszer teljes impulzusnyomatékát  $J$ -vel jelöljük. Szigorúan véve, az elektronok közötti különböző kölcsönhatások következtében egyedül a  $J$  megmaradó mennyiség, és csak ez jellemezhető egyértelműen egy kvantumszámmal (a  $j$  jó kvantumszám). Ugyanakkor, ha a kölcsönhatások elhanyagolhatóan kicsik, a többi, fent felsorolt impulzusnyomaték értékéről is van értelme beszélni.

A különböző elektronok pályamomentumai közötti kölcsönhatás elektrosztatikus típusú.  $L$  különböző értékeinek az egyes elektron-orbitálok különböző térbeli orientációja felel meg, amely az elektronok közötti átlagos távolságot is befolyásolja. A spinek közötti kölcsönhatás, ha indirekt módon is, de szintén elektrosztatikusnak tekinthető. Amint azt a Hund-szabály megokolásánál kifejtettük, a rendszer teljes spinjének az  $S$  értéke szintén befolyásolja az elektronok közötti átlagos távolságot, tehát az elektrosztatikus energiát.

Másrészt, egy adott elektron pályamomentuma és spinje közötti kölcsönhatás (a spin-pálya kölcsönhatás) a mágneses nyomatékok közötti kölcsönhatásra vezethető vissza, ami egy relativisztikus hatás.

Könnyű atomok esetén a spin-pálya kölcsönhatás mindig kisebb az elektrosztatikus (spin-spin vagy pálya-pálya) kölcsönhatásoknál. Az elektronrendszer impulzusmomentum-állapotának leírásakor ezért első közelítésben elhanyagoljuk a spin-pálya kölcsönhatást, és így a rendszer teljes pályamomentuma ( $L$ ) és spinje ( $S$ ) külön-külön is megmaradnak. Az ilyen típusú összekapcsolódását az impulzusmomentumoknak Russel-Saunders (vagy  $LS$ ) csatolásnak nevezzük.

Az  $LS$  csatolás esetében így meghatározhatjuk az elektronrendszer teljes pályamomentumát. Ez az egyes elektronok pályamomentumának vektoriális összege lesz

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i. \quad (8.15)$$

A teljes pályanyomatékot jelölő kvantumszám legyen  $l$ . A kvantálási szabály értelmében

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar. \quad (8.16)$$

Az elektronok adott pályanyomatékai esetén az  $l$  az impulzusnyomatékok összegzési szabálya által meghatározott értékeket vehet fel. Ha az egyes elektronok orbitális

kvantumszámát  $l_i$ -vel jelöljük, akkor az  $l$  minimuma az  $l_i$ -k tetszőleges előjellel vett algebrai összege moduluszának minimális értéke lesz

$$l_{\min} = \min \left| \sum_i \pm l_i \right|, \quad (8.17)$$

maximális értéke pedig egyszerűen az egyéni orbitális kvantumszámok összege

$$l_{\max} = \sum_i l_i. \quad (8.18)$$

Ezen határok között az  $l$  minden egész értéket felvehet. A fenti határok abból következnek, hogy a (8.15) alapján a pályanyomatékoknak egy sokszöget kell alkotniuk.

Az  $LS$  csatolás esetén az elektronrendszer teljes spinjének is van értelme. Az  $S$ -et az egyes elektronok spinjének vektoriális összegeként kapjuk

$$\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i. \quad (8.19)$$

A teljes spint jellemző kvantumszámot  $s$ -el jelöljük, míg az egyes elektronok spinjeit  $s_i$ -vel, ahol természetesen  $s_i = 1/2$ . A teljes spin kvantálási feltétele

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar. \quad (8.20)$$

Az  $s$  minimális értéke

$$s_{\min} = \min \left| \sum_{i=1}^n \pm s_i \right|, \quad (8.21)$$

amely páros számú elektronra  $s_{\min} = 0$ , míg páratlan számú elektronra  $s_{\min} = 1/2$ . A maximális érték

$$s_{\max} = \sum_{i=1}^n s_i = \frac{n}{2} \quad (8.22)$$

lesz. Ezen határokon belül az  $s$  értéke egyesével változhat, tehát páros számú elektron esetén egész, ellenkező esetben feles értékeket vehet fel.

A 8.3 ábrán példaképpen két adott pályamomentumú elektron impulzusnyomatékainak lehetséges csatolásait mutatjuk be, a vektormodell alapján.

Egy adott impulzusmomentumú elektronokat tartalmazó elektronrendszer esetén, amint azt a Hund-szabály tárgyalásánál megállapítottuk, annak az állapotnak lesz minimális az energiája, amelynek a spinje maximális. Ugyanakkor ha  $s$  adott, akkor a különböző  $l$ -ekkel jellemzett állapotok közül annak lesz legkisebb az energiája, amelyre a teljes orbitális impulzusmomentum maximális. Ez utóbbi szabályt úgy lehet szemléletesé tenni, ha elképzeljük, hogy ha  $L$  maximális, akkor minden elektron orbitális nyomatéka közel ugyanabba az irányba mutat, ami a félklasszikus kép alapján ugyanabba az irányba „keringő” elektronoknak felel meg. Ez pedig azt jelenti, hogy az elektronok átlagosan távolabb vannak egymástól, mint más esetben.

Az atom elektronrendszerének teljes impulzusnyomatékát  $LS$  csatolás esetén a teljes pályanyomaték és a teljes spinnyomaték összegeként kapjuk

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (8.23)$$

8.3. ábra: Két elektron impulzusmomentumainak lehetséges összekapcsolódásai  $LS$  csatolás esetén, ha  $l_1 = 1$ ,  $l_2 = 2$  és természetesen  $s_1 = s_2 = 1/2$ .

A teljes impulzusnyomatékot jellemző  $j$  kvantumszám lehetséges értékeire ebben az esetben is érvényes az egy elektronra felállított 7.83 összefüggés, csak itt természetesen az  $s$  különbözhet  $1/2$ -től. Így a  $j$  értéke egész lesz, ha  $s$  egész szám (páros elektron esetén), és feles, ha  $s$  feles szám (páratlan elektron esetén).

Ha most figyelembe vesszük az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  közötti spin-pálya kölcsönhatást, az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  már nem lesznek egzakt módon megmaradó mennyiségek, hanem lassan precesszálni fognak a  $\vec{J}$  körül, amint azt a 7.12 ábrán már bemutattuk. Adott  $s$  és  $l$ -el jellemzett kvantumállapotok energiája enyhén fog függeni a  $j$  értékétől, amint az a 7.88 képletből kiolvasható. Ha az elektronehéj felénél kevésbé betöltött, akkor  $A > 0$ , és akkor kapunk minimális energiát, ha  $j$  minimális, vagyis  $j = |l - s|$  (normális multipllett esete). Ha az elektronehéj több mint felénél betöltött, akkor  $A < 0$ , és minimális energiája a maximális  $j$ -vel jellemzett állapotnak lesz, vagyis  $j = l + s$  (fordított multipllett esete).

Nehezebb atomoknál a relativisztikus hatások mind jelentősebbek lesznek, és nehéz atomoknál a spin-pálya kölcsönhatás nagyobb lesz, mint a spin-spin vagy a pálya-pálya kölcsönhatás. Ebben az esetben nincs értelme az atom teljes pályamomentumáról vagy teljes spinjéről beszélni, ezek nem megmaradó mennyiségek. Az erős spin-pálya kölcsönhatás következtében minden elektron jellemezhető a teljes impulzusmomentumával

$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i, \quad (8.24)$$

amint az a 7.6 fejezetben leírtuk. Az egyes elektronok közötti elektrosztatikus kölcsönhatás a  $J_i$ -k kölcsönhatásában nyilvánul meg. A rendszer teljes impulzusmomentuma

$$\vec{J} = \sum_i \vec{J}_i \quad (8.25)$$

lesz. Az ilyen típusú csatolását az elektronok impulzusmomentumainak  $jj$  csatolásnak nevezzük. A vektormodell szerint az elektrosztatikus kölcsönhatások következtében a  $\vec{J}_i$  vektorok precessziós mozgást végeznek a  $\vec{J}$  körül.

A  $jj$  csatolás a legnehezebb atomoknál sem valósul meg tiszta formában, mert az elektrosztatikus kölcsönhatások nem lesznek elhanyagolhatóak a spin-pálya kölcsönha-

8.4. ábra: A  $\vec{J}$  precessziós mozgása gyenge mágneses mezőben.

táshoz viszonyítva. Ezért ezen elektronrendszerek állapotai csak a mindkét típusú kölcsönhatást figyelembevevő vegyes csatolás segítségével írhatók le.

## 8.4 Az atom gyenge mágneses térben. Az anomális Zeeman-hatás

A 7.4 fejezetben megállapítottuk, hogy a legtöbb atom színeképvonalai mágneses mezőben nem a normális Zeeman-hatás szerint hasadnak fel. Ebben a fejezetben a vektormodell segítségével a Zeeman-hatás általános leírását adjuk meg, amely az anomális Zeeman hatásra is magyarázatot ad.

Feltételezzük, hogy a külső mágneses mező elég gyenge ahhoz, hogy ne befolyásolja az elektronok impulzusmomentumainak csatolását. Ez azt jelenti, hogy  $LS$  csatolás esetén, az atom mágneses nyomatékának a külső mágneses mezővel való kölcsönhatása kisebb a spin-pálya kölcsönhatásnál, vagyis

$$|\vec{B}\vec{\mu}_J| < \left| A \frac{\vec{L}\vec{S}}{\hbar^2} \right|. \quad (8.26)$$

Ebben az esetben az atom teljes impulzusnyomatéka ( $J$ ) egy értelmezett mennyiség marad, és a  $\vec{J}$  lassan fog precesszálni a  $\vec{B}$  körül, míg az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  gyorsabb precessziós mozgást fognak végezni a  $\vec{J}$  körül (8.4 ábra).

Az anomális Zeeman-hatás leírásához az atom teljes mágneses nyomatékának a külső mágneses mezővel való kölcsönhatási energiáját kell meghatároznunk. A 8.5 ábrán feltüntettük az elektronrendszer impulzus-és mágneses nyomatékait, amelyek a pályamenti mozgásból, illetve a spinből származnak. A teljes impulzusnyomatékot és



8.5. ábra: Az elektronrendszer impulzus-és mágneses nyomatékai.

a teljes mágneses nyomatékot a következő vektoriális összegek adják

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (8.27)$$

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S. \quad (8.28)$$

Az orbitális mágneses nyomatékról és a spin-mágneses nyomatékról tudjuk, hogy

$$\mu_L = \frac{e}{2m} L = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad (8.29)$$

$$\mu_S = \frac{e}{m} S = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)}. \quad (8.30)$$

Mivel az arányossági tényező az impulzusnyomaték és a mágneses nyomaték között különbözik az orbitális mozgás, és a spin esetén, a  $\vec{\mu}$  iránya nem fog megegyezni a  $\vec{J}$  irányával. Így az  $\vec{L}$ -el és az  $\vec{S}$ -el együtt a  $\vec{\mu}$  is precessziós mozgást fog végezni a  $\vec{J}$  körül. Mivel ez a precesszió jóval gyorsabb, mint a  $\vec{J}$  vektornak a  $\vec{B}$  körüli mozgása, a  $\vec{\mu}$  mágneses nyomaték nem tekinthető megmaradó mennyiségnek, vagyis nem lehet jellemző, ha a külső mágneses mezővel való kölcsönhatást vizsgáljuk. Megmarad viszont a  $\vec{J}$ -vel együtt a mágneses nyomatéknak a teljes impulzusnyomaték irányára eső vetülete ( $\mu_J$ ). Így a mágneses mezővel való kölcsönhatási energia ettől a mennyiségtől függ,  $-\vec{B}\vec{\mu}_J$  lesz, amint azt a (8.26)-ben már megelölegeztük.

Ennek kiszámításához határozzuk meg először, a 8.5 ábra alapján, a  $\vec{\mu}_S$  és a  $\vec{\mu}_L$  nyomatékok  $\vec{J}$  irányába eső összetevőjét

$$\mu_{SJ} = \mu_S \cos \alpha \quad (8.31)$$

$$\mu_{LJ} = \mu_L \cos \beta, \quad (8.32)$$

ahonnan

$$\mu_J = \mu_{SJ} + \mu_{LJ} = \mu_S \cos \alpha + \mu_L \cos \beta. \quad (8.33)$$

Felhasználva a mágneses nyomatékok 8.29 és 8.30 kifejezéseit, valamint az impulzusnyomaték-háromszögben a koszinusz-tételt

$$\cos \alpha = \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2JS} = \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2\sqrt{j(j+1)s(s+1)}} \quad (8.34)$$

$$\cos \beta = \frac{J^2 + L^2 - S^2}{2JL} = \frac{j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{j(j+1)l(l+1)}}, \quad (8.35)$$

azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \mu_J &= 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2\sqrt{j(j+1)s(s+1)}} \\ &\quad + \mu_B \sqrt{l(l+1)} \frac{j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{j(j+1)l(l+1)}} \\ &= \mu_B \sqrt{j(j+1)} \left[ 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right]. \end{aligned} \quad (8.36)$$

A fenti kifejezés a következő, a 7.47 és a 7.68 képletekkel analóg formába írható

$$\vec{\mu}_J = -\frac{e}{2m}g_J\vec{J}, \quad (8.37)$$

ahol

$$g_J = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (8.38)$$

a Landé-faktor. Könnyen ellenőrizhetőek a már ismert sajátos esetek

$$\begin{aligned} \text{ha } s = 0 &\Rightarrow j = l \Rightarrow g_J = 1, \text{ és} \\ \text{ha } l = 0 &\Rightarrow j = s \Rightarrow g_J = 2. \end{aligned}$$

Ha az atomot gyenge,  $Oz$  irányú mágneses mezőbe helyezzük, akkor a mágneses nyomaték  $Oz$  irányú vetületének lehetséges értékei

$$\mu_{Jz} = -\frac{e}{2m}g_JJ_z = -g_J\mu_B m_j \quad (8.39)$$

lesznek, ahonnan a mágneses mezővel való kölcsönhatás energiája

$$W_B = -\vec{B}\vec{\mu}_J = -B\mu_{Jz} = Bg_J\mu_B m_j. \quad (8.40)$$

Mivel a teljes impulzusmomentumhoz tartozó  $m_j$  mágneses kvantumszám  $2j+1$  értéket vehet fel  $-j$ -től  $j$ -ig, mágneses mezőben az atom energiaszintjei  $2j+1$  szintre hasadnak fel. A felhasadás mértéke  $Bg_J\mu_B$  lesz, amely a  $g_J$ -n keresztül függ a felhasadó szint jellemző kvantumszámaitól. Ezért az anomális Zeemann-hatás esetén egy atom különböző energiaszintjei különböző mértékben hasadhatnak fel, sok esetben bonyolult optikai spektrumot eredményezve. Esetünkben, amikor a 8.26 feltétel teljesül, a külső mágneses mező okozta felhasadás mértéke kisebb, mint a finomszerkezeti szintek közötti távolság.

## 8.5 Az atom erős mágneses térben. A Paschen-Back hatás

Erős mágneses térben a mágneses momentumok kölcsönhatási energiája a mágneses mezővel nagyobb, mint a spin-pálya kölcsönhatás. Ebben az esetben a külső mágneses mező felszakítja az  $\vec{S}$  és az  $\vec{L}$  közötti csatolást. Ezért az atom teljes impulzusnyomatéka értelmetlen mennyiség lesz, a pályanyomaték és a spin külön-külön lép kölcsönhatásba a mágneses mezővel. A vektormodell szerint a  $\vec{L}$  és a  $\vec{S}$  egymástól függetlenül precesszálnak a  $\vec{B}$  körül (8.6 ábra).

Az elektronrendszer mágneses nyomatékának kölcsönhatási energiája a mágneses mezővel az orbitális momentumtól és a spintől függő tagok összege lesz

$$W_m = -\vec{B}\vec{\mu}_S - \vec{B}\vec{\mu}_L = B\mu_B m_l + B\mu_B 2m_s = B\mu_B(m_l + 2m_s). \quad (8.41)$$

Az adott  $l$  és  $s$  kvantumszámokkal jellemzett energiaszint felhasadásakor a felhasadás mértéke (a szomszédos, különböző  $m_l + 2m_s$  összeggel jellemzett szintek közötti energiakülönbség)

$$\Delta E = B\mu_B \quad (8.42)$$

8.6. ábra: Az  $\vec{L}$  és az  $\vec{S}$  precessziós mozgása erős mágneses mezőben.

lesz, ugyanolyan alakú, mint a normális Zeeman-hatás esetén. Ezt a jelenséget Paschen-Back hatásnak nevezzük.

A spin-pálya kölcsönhatás minden egyes  $l, s, m_l + 2m_s$ -el jellemzett energiaszint esetén perturbációként kezelhető. Mivel az  $\vec{L}$  és a  $\vec{S}$  mennyiségeknek csak az  $Oz$  irányú (mágneses erővonalakkal párhuzamos) komponense marad meg, az erre merőleges komponensek átlagértéke nulla lesz, és a spin-pálya kölcsönhatás energiája a

$$W_{LS} = A \frac{L_z S_z}{\hbar^2} = A m_s m_l \quad (8.43)$$

lesz.

Nagyon erős mágneses térben a mágneses mezővel való kölcsönhatási energia nagyobb lehet a spin-spin és a pálya-pálya kölcsönhatásoknál is. Ebben az esetben már csak az egyes elektronok spinjének és orbitális impulzuszómomentumának van értelme, ezek mind egymástól függetlenül fognak precesszálni a  $\vec{B}$  körül. A teljes kölcsönhatási energia ekkor az egyes elektronok mágneses mezővel való kölcsönhatási energiájának az összege lesz

$$W_m = B\mu_B \left( \sum_i m_{li} + 2 \sum_i m_{si} \right). \quad (8.44)$$

## 8.6 Az atom elektromos mezőben. A Stark-hatás

Homogén elektrosztatikus mezőben az elektromos dipólusnak a mezővel való kölcsönhatási energiája

$$W_E = -\vec{d}\vec{E} \quad (8.45)$$

alakba írható. Az atomok  $\vec{d}$  elektromos dipólus-nyomatéka általában nulla, de a külső tér nullától különböző dipólus-nyomatékot indukál. Egy elektronrendszer dipólus-

nyomatéka az elektronok  $\vec{r}_i$  helyzetvektoraitól függ

$$\vec{d} = -e \sum_i \vec{r}_i, \quad (8.46)$$

és az  $Oz$  irányú  $\vec{E}$  térerősséggel jellemzett elektromos mezővel a kölcsönhatási energia

$$W_E = e\vec{E} \sum_i \vec{r}_i = eE \sum_i z_i \quad (8.47)$$

lesz, ahol  $z_i$  az  $i$ -ik elektrton  $z$  koordinátája.

Írjuk fel a fenti kölcsönhatásnak megfelelő kvantummechanikai operátort

$$\hat{V}_E = eE \sum_i \hat{z}_i, \quad (8.48)$$

ahol ezt a kölcsönhatást perturbációnak tekintjük egy adott atomi energiaszint esetén. Az  $n$  és  $l$  kvantumszámokkal jellemzett energiaszint perturbálatlan állapotait jelöljük  $\psi_{nlm}^0$ -val. A szint energiájának elsőrendű perturbációs korrekciója

$$W_E^{(1)} = \langle \psi_{nlm}^0 | \hat{V}_E | \psi_{nlm}^0 \rangle = eE \sum_i \langle \psi_{nlm}^0 | \hat{z}_i | \psi_{nlm}^0 \rangle \quad (8.49)$$

lesz. Általában egy adott energiszint jól meghatározott  $l$  orbitális kvantumszámmal jellemezhető, ezért a  $\psi_{nlm}^0$  hullámfüggvény meghatározott párosságú (páros, ha  $l$  páros, és páratlan, ha  $l$  páratlan). Mivel  $z_i$  páratlan függvény, a (8.49)-ben szereplő integrál, amelyet az egész térre ki kell terjeszteni, nullát eredményez. Ez azt jelenti, hogy az atomoknál általában nem észlelünk lineáris Stark-hatást, vagyis az  $E$ -vel arányos korrekciója az energiának nulla.

Kivételesen a hidrogénatom, ahol az energiaszintek  $l$  szerint is elfajultak, és egy adott energiaszinthez rendelt hullámfüggvény a különböző mellékkvantumszám-értékekkel rendelkezhet. Így ennek az energiaállapotnak nem lesz meghatározott párossága, és alkalmazva a perturbációs módszert ezekre az elfajult szintekre, az elsőrendű perturbációs korrekció nullától különböző lesz. Tehát a hidrogénatom energiaszintjei elektromos mezőben az  $E$ -vel arányos mértékben hasadnak fel. Ezt a jelenséget lineáris Stark-hatásnak nevezzük.

A többelektronos atomok esetében a külső elektromos mezővel való kölcsönhatás csak másodrendű perturbációs közelítésben eredményezi az  $m_j$  szerint elfajult energiaszintek felhasadását. Bebizonyítható, hogy a másodrendű korrekció

$$W_E^{(2)} = -(P + Qm_j^2)E^2 \quad (8.50)$$

alakban írható fel. Az energiaszintek eltolódása és a felhasadás mértéke az elektromos térerősség négyzetével arányos. Ez a jelenség a Stark-hatás, vagy a négyzetes Stark-hatás. Az elektromos mezővel való kölcsönhatás nem szünteti meg teljesen a szintek elfajulását, mert a korrekció  $m_j^2$ -től függ, így a  $+m_j$ -vel és a  $-m_j$ -vel jellemzett állapotoknak ugyanaz lesz az energiája.

A 8.7 ábrán a Stark-hatást szemléltetjük a nátrium atom  $n = 3$  energiaszintjei esetén. Amint látjuk, a  $j = 1/2$  szintek nem hasadnak fel, de eltolódnak, és a  $j = 3/2$  szint két alszintre hasad fel.

A Stark-hatást általában bonyolultabb értelmezni, mint a Zeeman-hatást, ezért az atomi spektrumok kiértékelésénél ritkán használják.

8.7. ábra: A Stark-hatás a  $Na$  atom estén.

8.8. ábra: A héliumatom két elektronjának a maghoz viszonyított  $\vec{r}_1$  és  $\vec{r}_2$  helyzetvektorai, valamint a viszonylagos helyzetüket megadó  $\vec{r}_{12}$ .

## 8.7 A perturbációs és variációs módszer alkalmazása a hélium alapállapotára

A következő fejezetekben azt fogjuk tanulmányozni, hogy a spin-pálya kölcsönhatás elhanyagolásával (nemrelativisztikus közelítésben) hogyan határozhatók meg a többelektronos atomok energiaszintjei és hullámfüggvényei. Tanulmányozásunkat kezdjük a héliumatommal, amelyen két, gyakran használt közelítő módszert mutatunk be.

Modellünkben a  $He$  atommagot mozdulatlannak tekintjük, és a rendszer Hamilton-operátorának a felírásakor csak a két elektron mozgását vesszük figyelembe. A Hamilton-operátor a 8.8 ábrán látható jelölésekkel a következőképpen írható fel

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (8.51)$$

ahol figyelembevettük az elektron-mag és az elektron-elektron kölcsönhatásokat.

A képletek egyszerűsítése végett, vezessük be az atomfizikában gyakran használt **atomi egységeket**. Az atomi mértékrendszerben a következő univerzális állandók

értékét konvencionálisan 1-nek vesszük

$$\hbar = 1; m = 1; e = 1; 4\pi\epsilon_0 = 1, \quad (8.52)$$

ahol  $m$  az elektron tömege. Ezekben az egységekben a hidrogénatomban a Bohr-pálya sugara (6.14) alapján  $a_0 = 1$ , a hidrogén alapállapotú energiája (6.16) szerint  $E_1 = -1/2$ . Az energia mértékegysége atomi egységekben a *hartree*,  $1 \text{ hartree} = 27,2 \text{ eV}$ . A Bohr-pályán keringő elektron sebessége szintén egységnyi adódik, a fénysebesség atomi egységekben 137. A 8. fejezet hátralevő részében ezeket az egységeket fogjuk használni.

Ezek után írjuk fel a 8.51 Hamilton-operátort atomi egységekben

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (8.53)$$

A héliumatomra felírt Schrödinger-egyenlet

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (8.54)$$

az  $r_{12}$ -től való függés miatt nem oldható meg pontosan.

Az egyik közelítő módszer, amit a megoldásban használhatunk, a perturbációs módszer. A perturbálatlan Hamilton-operátor a két elektronnak az atommag körüli független mozgását írja le

$$\hat{H}^0 = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2}, \quad (8.55)$$

míg az elektron-elektron kölcsönhatást perturbációnak tekintjük

$$\hat{V} = \frac{1}{r_{12}}. \quad (8.56)$$

A  $\hat{H}^0$  operátor sajátfüggvényei egyelektron-hullámfüggvények antiszimmetrizált szorzataként írhatók fel

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(\vec{r}_1)\alpha(\sigma_1)\phi_b(\vec{r}_2)\beta(\sigma_2) - \phi_a(\vec{r}_2)\alpha(\sigma_2)\phi_b(\vec{r}_1)\beta(\sigma_1)], \quad (8.57)$$

ahol  $\vec{r}_i$ -vel a térbeli koordinátákat, míg  $\sigma_i$ -vel a spinkoordinátákat jelöltük az  $i$  elektron esetén. Az egyik elektron az  $a$  térbeli és az  $\alpha$  spin-állapotban található, míg a másik a  $b, \beta$  állapotban.

Foglalkozzunk a továbbiakban csak a legalacsonyabb energiájú állapottal. A héliumatom alapállapotában a két elektron térbeli hullámfüggvénye megegyezik ( $a = b = 1s$ ), míg a spinállapotoknak a Pauli-féle kizárási elv értelmében különbözniük kell. Ebben az esetben a kételektron-rendszer térbeli és spin-hullámfüggvénye szeparálható

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \phi_{1s}(\vec{r}_1)\phi_{1s}(\vec{r}_2)\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)]. \quad (8.58)$$

Mivel közelítésünkben a héliumatom Hamilton-operátora független a spintől, a továbbiakban a hullámfüggvény spintől függő, antiszimmetrikus részével nem foglalkozunk.

A térbeli koordinátáktól függő perturbálatlan hullámfüggvény egyszerűen a két, egy-elektron hullámfüggvény szorzata lesz

$$\Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{1s}(\vec{r}_1)\phi_{1s}(\vec{r}_2). \quad (8.59)$$

Mivel a perturbálatlan Hamilton-operátor felírható két, egy-elektron operátor összegeként

$$\hat{H}^0 = \hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0, \quad (8.60)$$

a

$$\hat{H}^0\Psi^0 = E_0\Psi^0 \quad (8.61)$$

Schrödinger-egyenlet szeparálható két, egy elektronra felírt Schrödinger-egyenletre

$$\hat{H}_i^0\phi_{1s}(\vec{r}_i) = E_i\phi_{1s}(\vec{r}_i); \quad i = 1, 2 \quad (8.62)$$

vagy részletesebben kiírva

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i}\right)\phi_{1s}(\vec{r}_i) = E_i\phi_{1s}(\vec{r}_i); \quad i = 1, 2. \quad (8.63)$$

A fenti egyenlet a hidrogénszerű ionra felírt Schrödinger-egyenlet, amelynek sajátértékeit és sajátfüggvényeit jól ismerjük (7.2 fejezet). Az alapállapotra

$$E_i = -\frac{Z^2}{2} \quad (8.64)$$

$$\phi_{1s}(\vec{r}_i) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}}e^{-Zr_i}. \quad (8.65)$$

Így a héliumatom alapállapotának energiája nulladrendű közelítésben

$$E_0 = E_1 + E_2 = -Z^2. \quad (8.66)$$

lesz.

Számítsuk ki az alapállapot energiájának elsőrendű perturbációs korrekcióját

$$E^{(1)} = \langle \Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \iint \phi_{1s}^*(\vec{r}_1)\phi_{1s}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{1s}(\vec{r}_1)\phi_{1s}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (8.67)$$

A fenti hatszoros integrál a hullámfüggvények 8.65 alakját felhasználva analitikusan kiszámítható. A korrekció értéke

$$E^{(1)} = \frac{5}{8}Z. \quad (8.68)$$

A héliumatom alapállapotának energiája ebben a közelítésben

$$E = -Z^2 + \frac{5}{8}Z = -2,750 \text{ hartree} = -74,83 \text{ eV} \quad (8.69)$$

lesz. A kísérleti érték ennél kisebb,

$$E_k = -2,9033 \text{ hartree} = -79,00 \text{ eV}. \quad (8.70)$$



A számításokat elvégezték magasabb rendű perturbációs korrekciókat is figyelembe véve. Másodrendű közelítésben az energia  $-2,91$  hartree-nak adódott, míg 13-ik közelítésben az eredmény  $-2,90372433$  hartree. Ez az eredmény már csak azért különbözik a kísérleti értéktől, mert ebben a modellben nem vették figyelembe a mag mozgását és a relativisztikus hatásokat.

A perturbációs módszeren kívül a másik gyakran használt közelítő módszer az energiaszintek és a hullámfüggvények meghatározására a variációs módszer. A variációs módszer esetén egy adott alakú próbafüggvényt vezetünk be a hullámfüggvény közelítésére. Ezeket a paramétereket a variációs elv alapján, az atom alapállapot energiájának minimalizálásával határozhatjuk meg.

Tekintsünk példaként egy egyszerű, egy paramétertől ( $\alpha$ ) függő, szorzat alakban felírt próbafüggvényt

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \alpha) = \phi(r_1, \alpha)\phi(r_2, \alpha), \quad (8.71)$$

ahol az egyelektron-próbafüggvényeknek hidrogénszerű alakjuk van. Variációs paraméternek azt a töltést tekintjük amelynek terében az elektronok mozognak

$$\phi(r_i, \alpha) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_i}. \quad (8.72)$$

Az állapot energiája az

$$E(\alpha) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (8.73)$$

alakba írható, amelynek a minimumát keressük az  $\alpha$  függvényében.

A fenti mátrixelem kiszámításához felhasználjuk, hogy a  $\phi(r_i, \alpha)$  függvény egy  $\alpha$  magtöltéssel rendelkező hidrogénszerű ionra felírt Hamilton-operátor sajátfüggvénye  $-\alpha^2/2$  sajátértékkel

$$\left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{\alpha}{r_i} \right) \phi(r_i, \alpha) = -\frac{\alpha^2}{2} \phi(r_i, \alpha). \quad (8.74)$$

A héliumatom 8.53 Hamilton-operátorát oly módon írjuk fel, hogy a fenti előnyös tulajdonságot fel tudjuk használni

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{\alpha}{r_1} - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\alpha - 2}{r_1} + \frac{\alpha - 2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (8.75)$$

Felhasználva a 8.74 sajátérték-egyenletet és a hullámfüggvények normálását, a mátrixelemre azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= -\frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^2}{2} + \iint \left( \frac{\alpha^3}{\pi} \right)^2 e^{-2\alpha(r_1+r_2)} \left( \frac{\alpha - 2}{r_1} + \frac{\alpha - 2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ &= -\alpha^2 + 2(\alpha - 2) \frac{\alpha^3}{\pi} \int \frac{e^{-2\alpha r}}{r} d\vec{r} + \frac{5}{8} \alpha \\ &= -\alpha^2 + 2(\alpha - 2)\alpha + \frac{5}{8} \alpha \\ &= \alpha^2 - \frac{27}{8} \alpha. \end{aligned} \quad (8.76)$$

Az utolsó,  $r_{12}$ -től függő integrál ugyanolyan típusú volt, mint a (8.67).

A fenti számításból megkapott energia kifejezésének a minimumát deriválással határozzuk meg

$$\frac{dE}{d\alpha} = 2\alpha - \frac{27}{8} = 0, \quad (8.77)$$

ahonnan

$$\alpha = \frac{27}{16}; E = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 = -2,8477 \text{ hartree} \quad (8.78)$$

Látjuk, hogy a kapott energiaérték a hélium alapállapotára közelebb van a kísérleti értékhez, mint az elsőrendű perturbációs közelítés eredménye. Az  $\alpha$  paramétert úgy értelmezhetjük, mint azt az effektív töltést, amelyet az elektron mozgása során „érez”. Amint látható, az  $\alpha$  értéke kisebb mint 2, mert a másik elektron a mag töltését részben leárnyékolja.

Más alakú, több variációs paramétert tartalmazó próbafüggvény használatával a kapott eredmény pontosítható. Ha megtartjuk a próbafüggvény 8.71 szorzat alakját, de az energiát az egyelektron-hullámfüggvények teljes osztályán minimalizáljuk, az energiában eljutunk a Hartree-Fock határhoz. A Hartree-Fock módszert, amely a fenti minimalizálást megvalósítja, a következő fejezetekben fogjuk tanulmányozni. A Hartree-Fock határ értéke

$$E_{HF} = -2,8617 \text{ hartree.} \quad (8.79)$$

Ha ennél jobb közelítést szeretnénk elérni, a próbafüggvénynek tartalmaznia kell az elektronok egymáshoz viszonyított helyzetét megadó  $r_{12}$  koordinátát. Az ilyen típusú hullámfüggvényeket Hylleras-típusúaknak nevezzük. A legteljesebb variációs számítást a Hylleras-típusú hullámfüggvénnyel 1078 paraméter bevezetésével végezték, és az eredmény,  $E = -2,90372437$ , gyakorlatilag egybeesett a legjobb perturbációs számítás eredményével.

Több elektront tartalmazó atom esetén azonban a magasabbrendű perturbációs számítások, vagy a Hylleras-típusú hullámfüggvények használata gyakorlatilag lehetetlenné válnak.

## 8.8 A Hartree-Fock módszer alkalmazása a héliumatomra

A Hartree-Fock módszer lényege, hogy a többelektronos rendszer hullámfüggvényét egyelektron hullámfüggvények szorzatával, vagy, a Pauli-elvet is figyelembevéve, az ezekből összeállított Slater-determinánssal közelíti. Az egy elektron térbeli koordinátájától függő hullámfüggvényeket orbitáloknak is nevezik. Az elektronok mozgását ebben a közelítésben a többi elektron által keltett, átlagolt elektromos mezőben írjuk le.

A héliumatom alapállapota esetén, amint azt az előző fejezetben láttuk, a hullámfüggvény térbeli koordinátáktól függő része egyszerű szorzat alakjába írható

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2). \quad (8.80)$$

Az 1-es elektron, az atommagon kívül, kölcsönhatásban van a másik elektron által keltett,  $\rho(\vec{r}_2)$  töltéssűrűséggel jellemzett elektronfelhővel, melyet a Hartree-Fock közelítésben rögzítettnek tekintünk. A 2-es elektron által keltett effektív potenciál az

$$U_1^{\text{eff}}(\vec{r}_1) = \int \frac{\rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_2 = \int \phi^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (8.81)$$

módon írható fel. Mivel a 2-es elektron térbeli megtalálhatósági valószínűsége gömb-szimmetrikus, az  $U_1$  potenciál is gömbszimmetrikus lesz. Az 1-es elektron Hamilton-operátora, a másik elektron által létrehozott potenciált rögzítettnek tekintve így

$$\hat{H}_1^{\text{eff}} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} + U_1^{\text{eff}}(r_1) \quad (8.82)$$

lesz. A Schrödinger-egyenlet

$$\hat{H}_1^{\text{eff}}\phi(\vec{r}_1) = \epsilon_1\phi(\vec{r}_1) \quad (8.83)$$

így egy részecskének gömbszimmetrikus erőtében való mozgására vonatkozik. Ebben az esetben a hullámfüggvény felírható a radiális és az orbitális hullámfüggvények szorzataként, ahol az orbitális részt a gömbfüggvények adják meg

$$\phi(\vec{r}_1) = R(r_1)Y_l^{m_l}(\theta_1, \varphi_1). \quad (8.84)$$

A radiális egyenlet a (7.8) ismert alakba írható

$$\left[ -\frac{1}{2r_1^2} \frac{d}{dr_1} \left( r_1^2 \frac{d}{dr_1} \right) - \frac{Z}{r_1} + \frac{l(l+1)}{2r_1^2} + U_1^{\text{eff}}(r_1) \right] R(r_1) = \epsilon_1 R(r_1). \quad (8.85)$$

A fenti egyenlet, azonban a látszat ellenére, nem egyszerű differenciálegyenlet. Ugyanis az  $U_1^{\text{eff}}$  potenciál tartalmazza a keresett  $\phi$  (és az  $R$ ) függvényt. Az ilyen típusú egyenleteket az önkonzisztens tér módszerével oldjuk meg. Ez azt jelenti, hogy első közelítésben az  $U_1^{\text{eff}}$  kiszámításához egy tetszőleges próbafüggvényt (pl. egy hidrogénszerű ion  $1s$  hullámfüggvényét) használjuk, megoldjuk a differenciálegyenletet, és így az  $R$ -re egy jobb közelítést kapunk. Az eljárást addig folytatjuk, amíg a hullámfüggvény korrekciója elhanyagolható lesz, tehát a differenciálegyenlet megoldása konzisztens lesz a  $U_1^{\text{eff}}$ -ben szereplő hullámfüggvénnyel. Az így kapott hullámfüggvényeket Hartree-Fock orbitáloknak nevezzük.

A 8.83 egy elektronra felírt Schrödinger-egyenlet, amit Hartree-Fock egyenletnek is nevezünk, a variációs elv alapján is levezethető. A rendszer energiája Hartree-Fock közelítésben

$$\begin{aligned} E &= \frac{\langle \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2) | -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} | \phi(\vec{r}_2)\phi(\vec{r}_1) \rangle}{\langle \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2) | \phi(\vec{r}_2)\phi(\vec{r}_1) \rangle} \\ &= \frac{2 \langle \phi | -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \frac{\langle \phi\phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi\phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle^2}, \end{aligned} \quad (8.86)$$

lesz, ahol elhagytuk az elektronokra vonatkozó indexeket. A nevezőben a hullámfüggvény normája jelenik meg, amit a  $\phi$  függvény meghatározása előtt nem rögzíthetünk.

Ahhoz, hogy az energiának a  $\phi$  függvények teljes osztályára nézve minimuma legyen, teljesülnie kell a variációs feltételnek

$$\frac{\partial E}{\partial \langle \phi | \phi \rangle} = 0. \quad (8.87)$$

A variációt elvégezve azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right) |\phi \rangle \langle \phi | \phi \rangle - |\phi \rangle \langle \phi | \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right) |\phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle^2} \\ & + \frac{2 \langle \phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi \rangle |\phi \rangle \langle \phi | \phi \rangle^2 - 2 \langle \phi | \phi \rangle |\phi \rangle \langle \phi \phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle^4} = 0. \end{aligned} \quad (8.88)$$

Most már figyelembevehetjük, hogy a  $\phi$  függvények normáltak

$$\langle \phi | \phi \rangle = 1, \quad (8.89)$$

és ezután a következő egyenlethez jutunk

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} + \left\langle \phi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi \right\rangle \right) |\phi \rangle \\ & - \left\langle \phi \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right| \phi \right\rangle |\phi \rangle - \left\langle \phi \phi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi \phi \right\rangle |\phi \rangle = 0. \end{aligned} \quad (8.90)$$

Észrevesszük, hogy a

$$\left\langle \phi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi \right\rangle = \int \phi^*(\vec{r}) \frac{1}{r_{12}} \phi(\vec{r}) d\vec{r} = U^{\text{eff}}(\vec{r}) \quad (8.91)$$

mátrixelem a 8.81 egyenlettel értelmezett effektív potenciál, és így a fenti egyenlet a 8.83 egyenlettel ekvivalens lesz

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} + U^{\text{eff}}(\vec{r}) \right] |\phi \rangle = \left( \left\langle \phi \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right| \phi \right\rangle + \left\langle \phi \phi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi \phi \right\rangle \right) |\phi \rangle. \quad (8.92)$$

A fenti egyenletben  $\vec{r}$  akár  $\vec{r}_1$ -el, akár  $\vec{r}_2$ -vel is helyettesíthető. Az elektron energiája, amit orbitál-energiának nevezünk, két tag összege lesz

$$\epsilon = I + J_{12}. \quad (8.93)$$

Az első tag egy elektron mozgási, és a maggal való kölcsönhatási energiáját tartalmazza, más szóval ez a hidrogénszerű ionban egyedül mozgó elektron energiája

$$I = \left\langle \phi \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right| \phi \right\rangle = \int \phi^*(\vec{r}) \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right) \phi(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (8.94)$$

A második tag a két elektron Coulomb kölcsönhatásának energiáját adja, ez az úgynevezett Coulomb-integrál

$$J_{12} = \left\langle \phi \phi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi \phi \right\rangle = \iint \phi^*(\vec{r}_1) \phi^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi(\vec{r}_1) \phi(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (8.95)$$

Az  $\epsilon$  orbitál-energia egy elektronnak az atomon belüli (negatív) energiáját adja, jó közelítésben. Ahhoz, hogy az atomot ionizáljuk, legalább akkora energiát kell átadnunk az elektronnak, hogy az energiája nullára nőjön, tehát szabaddá váljon. Az ionizációs energia ezért

$$E_{\text{ION}} = -\epsilon \quad (8.96)$$

lesz. Ez a Koopman-tétel.

A héliumatom teljes energiáját a 8.86 kifejezés adja, ahol figyelembevéve a normálást és az új jelöléseket

$$E = 2I + J_{12} \quad (8.97)$$

lesz. Érdemes megjegyezni, hogy a két elektron orbitál-energiáinak összege nem lesz egyenlő a kételektron-rendszer energiájával, mert az összegben kétszer vennénk figyelembe az elektronok kölcsönhatási energiáját

$$\epsilon_1 + \epsilon_2 = I_1 + J_{12} + I_2 + J_{12} = 2I + 2J_{12} = E + J_{12}. \quad (8.98)$$

## 8.9 A Hartree-Fock módszer alkalmazása többelektronos atomok esetén

Ha az atom több mint két elektront tartalmaz, hullámfüggvénye már nem írható fel egy, csak a térbeli koordinátáktól függő, és egy, csak a spintől függő függvény szorzataként. Ezért a 8.12 Slater-determinánst kell használnunk. Másrészt, csak zárt héjú atomokkal foglalkozunk, amelyeknek teljes spinje nulla. A nyílt héjú atomok esetén a hullámfüggvény több Slater-determináns lineáris kombinációja lesz, a spin különböző orientációinak és a  $J$ , a teljes impulzusmomentum különböző értékeinek megfelelően.

Tekintsünk egy atomot, amelyben  $2N$  elektron  $N$  orbitált tölt be. Minden orbitálon két elektron található, a spin két különböző orientációjának megfelelően. A két lehetséges spin-állapotot jelöljük  $\alpha$ -val és  $\beta$ -val, míg a térbeli koordinátáktól függő orbitálokat  $\phi_i$ -vel, ahol  $i = \overline{1, N}$ . Az elektronrendszer hullámfüggvénye így a következő Slater-determinánssal fejezhető ki

$$\Psi(1, 2, \dots, 2N) = \frac{1}{\sqrt{(2N)!}} \times \begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_1(1)\beta(1) & \cdots & \phi_N(1)\alpha(1) & \phi_N(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_1(2)\beta(2) & \cdots & \phi_N(2)\alpha(2) & \phi_N(2)\beta(2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \phi_1(2N)\alpha(2N) & \phi_1(2N)\beta(2N) & \cdots & \phi_N(2N)\alpha(2N) & \phi_N(2N)\beta(2N) \end{vmatrix} \quad (8.99)$$

Az elektronrendszer energiáját az

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (8.100)$$

mátrixelem adja, amely egy  $3 \times 2N$ -szeres integrált jelent a térbeli koordináták szerint, és  $2N$ -szerest a spin-koordináták szerint. A rendszer Hamilton-operátora

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2N} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{2N} \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{2N} \sum_{j>i}^{2N} \frac{1}{r_{ij}}. \quad (8.101)$$

Az energia kiszámításához a Slater-determinánst kifejtjük az egyik, a  $i$ -ik sor szerint. A  $\phi_j(i)$ ,  $j = \overline{1, N}$  függvények a

$$\hat{H}_i^0 = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \quad (8.102)$$

operátor sajátfüggvényei. Ha csak ennek az operátornak a mátrixelemét számítjuk, az

$$\langle \Psi | \hat{H}_i^0 | \Psi \rangle = \frac{1}{2N} 2 \sum_{j=1}^N I_j \quad (8.103)$$

lesz, ahol

$$I_j = \langle \phi_j | \hat{H}_i^0 | \phi_j \rangle = \int \phi_j^*(\vec{r}_i) \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) \phi_j(\vec{r}_i) d\vec{r}_i. \quad (8.104)$$

Az  $1/(2N)$ -es faktor a hullámfüggvény normálási tényezőjéből, a 2-es faktor a két különböző spinállapot figyelembevételéből adódik, ahol felhasználtuk úgy az orbitálok mint a spinfüggvények ortonormáltságát.

Figyelembe véve most már a 8.101 Hamilton-operátort alkotó többi  $\hat{H}_i^0$ ,  $i = \overline{1, 2N}$  operátort, valamint az elektron-elektron kölcsönhatásokat is, a rendszer teljes energiája a következő alakba írható

$$E = 2 \sum_{j=1}^N I_j + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (2J_{ij} - K_{ij}). \quad (8.105)$$

Itt

$$J_{ij} = \iint \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_i(\vec{r}_1) \phi_j(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (8.106)$$

a már ismert Coulomb-integrál, míg

$$K_{ij} = \iint \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_j(\vec{r}_1) \phi_i(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (8.107)$$

a kicserélődési integrál. A hélium esetében ez a két kifejezés egyenlő volt egymással, mert csak egy orbitálunk volt.

Hasonlóképpen, ahogyan a hélium esetében is megmutattuk, az elektron-orbitálokra felírt Hartree-Fock egyenletek az energiára felírt variációs elvből vezethetők le

$$\frac{\partial E}{\partial \phi_i} = 0; \quad i = \overline{1, N} \quad (8.108)$$

ahol el kell tekintenünk a  $\phi_i$  hullámfüggvények normáltságától. A variációs elv alkalmazása a következő Hartree-Fock egyenletekhez vezet

$$\hat{F}_i \phi_i = \epsilon_i \phi_i; \quad i = \overline{1, N}. \quad (8.109)$$

Az  $\hat{F}_i$  Hartree-Fock operátor az

$$\hat{F}_i = \hat{H}_i^0 + \sum_{j=1}^N (2\hat{J}_{ij} - \hat{K}_{ij}) \quad (8.110)$$

alakba írható, ahol

$$\hat{J}_{ij} \phi_i(\vec{r}_1) = \phi_i(\vec{r}_1) \int \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_j(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (8.111)$$

$$\hat{K}_{ij} \phi_i(\vec{r}_1) = \phi_j(\vec{r}_1) \int \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_i(\vec{r}_2) d\vec{r}_2. \quad (8.112)$$

A 8.109 egyenletrendszer  $N$  darab csatolt differenciálegyenletből áll. Megoldani szintén az önkonzisztens tér módszerével szokták, vagyis addig folytatják a  $\phi_i$ -k iteratív kiszámítását, amíg konzisztens lesz a Coulomb és a kicserélődési integrálokkal. Így megkapjuk a különböző orbitálokban található elektronok hullámfüggvényeit és az  $\epsilon_i$  orbitál-energiát. Az orbitál energiája

$$\epsilon_i = I_i + \sum_{j=1}^N (2J_{ij} - K_{ij}) \quad (8.113)$$

lesz, és Koopman közelítésében az  $i$  orbitálról való ionizáció energiája

$$E_{\text{ION}}^i = -\epsilon_i. \quad (8.114)$$

Az elektronok orbitál-energiáinak összege ebben az esetben sem lesz egyenlő a teljes energiával.

Ha a 8.108 egyenletrendszer pontosan megoldjuk, az atom  $E$  energiájára a Hartree-Fock határt ( $E_{\text{HF}}$ ) kapjuk. Mivel a  $2N$  elektrontól álló rendszer hullámfüggvényét a 8.99 Slater-determinánsal közelítettük, ez az energia nagyobb lesz a valódi, kísérletileg meghatározott  $E_{\text{exp}}$  energiánál. A kettő közötti különbséget korrelációs energiának nevezzük

$$E_{\text{kor}} = E_{\text{exp}} - E_{\text{HF}}, \quad (8.115)$$

és azt az elektronok közötti kölcsönhatást, amelyet nem foglal magába az  $U_{\text{eff}}$  átlagolt potenciál, korrelációnak.

Ha egy atom leírásakor a korrelációt is figyelembe akarjuk venni, akkor a Slater-determinánsnál bonyolultabb alakú hullámfüggvényekkel kell dolgoznunk.



# 9

## Atomi spektrumok

A legtöbb információt az atomok szerkezetéről az atomok jellemző spektrumából vagy színképéből nyerhetünk. Ebben a fejezetben az atomok optikai átmeneteit fogjuk tanulmányozni, vagyis azokat az elektronátmeneteket, amelyek foton kibocsátással vagy elnyeléssel járnak.

### 9.1 Foton elnyelés és kibocsátás

Bohr második posztulátuma megadja az optikai átmenetek alkalmával kibocsátott vagy elnyelt elektromágneses sugárzás frekvenciáját

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h}. \quad (9.1)$$

Ez a feltétel az átmenet kvantummechanikai tanulmányozásával is levezethető.

Felírjuk az atom elektronrendszerére az időtől függő Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi. \quad (9.2)$$

Ennek az egyenletnek a stacionárius (állandó energiájú) állapotot leíró megoldásaiban különválaszthatjuk a csak az időtől függő, periodikus részt

$$\Psi_n = \psi_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}, \quad (9.3)$$

ahol  $\psi_n$  csak a térbeli koordinátáktól függő, az  $n$  állapotot jellemző hullámfüggvény. Egy ilyen stacionárius állapotban egy elektron valamely ( $q$ -val jelölt) koordinátájának átlagértéke időben állandó

$$\langle q \rangle = \int \Psi_n^* q \Psi_n d\tau = \int \psi_n^* q \psi_n d\tau, \quad (9.4)$$

mert a hullámfüggvény időtől függő része eltűnik ( $\tau$  az elektronrendszer koordinátáinak összességét jelöli). Ez azt jelenti, hogy az „elektronfelhő” középpontja nem mozdul el, és az atom stacionárius állapotban nem sugároz.

Ha az elektron két stacionárius állapot között megy át ( $n \rightarrow m$ ), akkor a rendszer hullámfüggvényét a két stacionárius állapotra jellemző hullámfüggvény lineáris kombinációjaként írjuk fel

$$\Psi = a\Psi_n + b\Psi_m. \quad (9.5)$$

Az átmenet előtt  $a = 1$  és  $b = 0$ , míg az átmenet után az együtthatók  $a = 0$  és  $b = 1$  lesznek. Az  $a$  és  $b$  ebből következően függenek az időtől, de feltételezzük, hogy ezek viszonylag lassan változnak. Az átmenet alatt az elektron koordinátájának átlagértéke

$$\langle q \rangle = \int (a^*\Psi_n^* + b^*\Psi_m^*)q(a\Psi_n + b\Psi_m)d\tau \quad (9.6)$$

lesz. Behelyettesítve az időtől is függő hullámfüggvények 9.3 alakját, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &= |a|^2 \int \psi_n^* q \psi_n d\tau + |b|^2 \int \psi_m^* q \psi_m d\tau \\ &+ b^* a \int \psi_m^* e^{i\frac{E_m}{\hbar}t} q e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n d\tau + a^* b \int \psi_n^* e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} q e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} \psi_m d\tau \\ &= |a|^2 \langle q \rangle_n + |b|^2 \langle q \rangle_m \\ &+ b^* a \int \psi_m^* q \psi_n d\tau e^{i\frac{E_m - E_n}{\hbar}t} + a^* b \int \psi_n^* q \psi_m d\tau e^{-i\frac{E_m - E_n}{\hbar}t}, \end{aligned} \quad (9.7)$$

ahol  $\langle q \rangle_n$  és  $\langle q \rangle_m$  a koordináta átlagértékét jelölik a stacionárius  $n$  illetve  $m$  állapotban. Bevezetjük a

$$b^* a \int \psi_m^* q \psi_n d\tau = M e^{i\varphi} \quad (9.8)$$

jelölést, és evvel a  $\langle q \rangle$  átlagérték egyszerűbb alakba írható

$$\langle q \rangle = |a|^2 \langle q \rangle_n + |b|^2 \langle q \rangle_m + 2M \cos\left(\frac{E_m - E_n}{\hbar}t + \varphi\right). \quad (9.9)$$

Ha a fenti kifejezésben csak az első két tag lenne, az elektron koordinátája az  $a$  és  $b$  együtthatók által meghatározott módon, lassan átmenne  $\langle q \rangle_n$ -ből  $\langle q \rangle_m$ -be. Azonban a harmadik tag az átmenet alatt (amikor úgy  $a$  mint  $b$  különböznek nullától), egy gyors,

$$\omega = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad (9.10)$$

körfrekvenciájú rezgést hoz be. Mivel az elektron koordinátájának átlagértéke ennek megfelelően az átmenet alatt  $\nu = (E_m - E_n)/h$  frekvenciával rezeg, az atom ilyen frekvenciájú sugárzást bocsát ki vagy nyel el. Visszakaptuk tehát a 9.1 Bohr-féle frekvenciafeltételt.

Míg egy jellemző optikai átmenet egyik stacionárius állapotból a másikba  $10^{-8}$  s ideig tart, addig a kibocsátott (vagy elnyelt) sugárzás frekvenciája látható fény esetén  $10^{15}$  Hz nagyságrendű. Okkal mondhattuk tehát, hogy az  $a$  és  $b$  időben lassan változó függvények.

## 9.2 Kiválasztási szabályok

Az előbbi fejezetben bebizonyítottuk, hogy ha egy atom az egyik stacionárius állapotból a másikba megy át, az átmenet alatt egy elektron valamely koordinátájának az átlagértéke nagy frekvenciájú rezgőmozgást végez, ami elektromágneses sugárzás kibocsátásával vagy elnyelésével jár. Ez a tétel azonban csak akkor érvényes, ha 9.9 kifejezésben a koszinusz függvény együtthatója nem nulla, vagyis a (9.8)-ben szereplő mátrixelem különbözik zérótól. Ha

$$q_{mn} = \int \psi_m^* q \psi_n d\tau = 0, \quad (9.11)$$

az atom az adott átmenet során nem bocsát ki vagy nyel el elektromágneses sugárzást. Az ilyen átmenetek csak más részecskékkel való kölcsönhatás útján lehetségesek, és optikailag tiltott átmeneteknek nevezzük őket. Ha

$$q_{mn} = \int \psi_m^* q \psi_n d\tau \neq 0, \quad (9.12)$$

az átmenetet optikailag megengedettnek nevezzük.

Az, hogy a 9.11 mátrixelem értéke nulla vagy nem, az atom kezdeti és végső stacionárius hullámfüggvényének szimmetriatulajdonságaitól függ. Általános szabályokat fogalmazhatunk meg, amelyek megszabják, hogy az optikai átmenetek milyen állapotok között lehetségesek. Ezek a kiválasztási szabályok.

Egy ilyen kiválasztási szabály levezetésének érdekében tekintsünk egy olyan atomot, amelynek a külső héján csak egy elektron van, és vizsgáljuk csak ennek az egy elektronnak a lehetséges optikai átmeneteit (egy-elektron átmenetek). Úgy tekintjük, hogy az atom belső, zárt héjain az elektronok hullámfüggvénye az átmenet során nem változik. A külső elektron állapotát leíró, térbeli koordinátáktól függő hullámfüggvényt az  $n, l, m_l$  kvantumszámokkal jellemezhetjük.

Tekintsük a

$$\psi_{nlm_l} \rightarrow \psi_{n'l'm'_l} \quad (9.13)$$

átmenetet. Vizsgáljuk meg az  $x$  koordináta (9.11)-hez hasonló mátrixelemét az adott átmenet esetén

$$x_{\psi\psi'} = \int \psi_{nlm_l}^* x \psi_{n'l'm'_l} d\vec{r}. \quad (9.14)$$

Gömbi koordinátákban dolgozunk, és különválasztjuk a hullámfüggvény radiális, a  $\theta$  és a  $\varphi$  szögtől függő részét

$$\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) \Theta_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\varphi), \quad (9.15)$$

azaz az  $Y_l^{m_l}$  gömbfüggvényt a  $\theta$ -tól és a  $\varphi$ -tól függő rész szorzatára bontva írjuk fel. Felhasználjuk, hogy

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad (9.16)$$

$$d\vec{r} = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi, \quad (9.17)$$

és így a mátrixelemet három integrál szorzataként írhatjuk fel

$$x_{\psi\psi'} = \int_0^\infty r^3 R_{nl}^* R_{n'l'} dr \int_0^\pi \sin^2 \theta \Theta_{lm_l}^* \Theta_{l'm'_l} d\theta \int_0^{2\pi} \cos \varphi \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi. \quad (9.18)$$

Foglalkozunk csak a  $\varphi$  szerinti integrállal. Tudjuk, hogy ha  $\Phi$  normált függvény, akkor

$$\Phi_{m'_l} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im'_l\varphi} \quad (9.19)$$

$$\Phi_{m_l}^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im_l\varphi}, \quad (9.20)$$

és felhasználjuk a

$$\cos \varphi = \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \quad (9.21)$$

összefüggést. Az integrál így a következőképpen alakul

$$\int_0^{2\pi} \cos \varphi \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} [e^{-i(m_l - m'_l - 1)\varphi} + e^{-i(m_l - m'_l + 1)\varphi}] d\varphi. \quad (9.22)$$

Az  $m_l - m'_l \pm 1 = k$  mindig egész szám. Az  $\exp(-ik\varphi)$  függvény integrálja 0-tól  $2\pi$ -ig pedig minden egész  $k$ -ra nullát eredményez, kivéve ha  $k = 0$ . Ezért kijelenthetjük, hogy az  $x_{\psi\psi'}$  mátrixelem csak azokra a mágneses kvantumszámokra különbözik nullától, amelyekre

$$m_l - m'_l \pm 1 = 0, \quad (9.23)$$

vagyis a mágneses kvantumszám csak az

$$m'_l - m_l = \Delta m_l = \pm 1 \quad (9.24)$$

értékkel változhat. Az elektron tehát csak ezekben az esetekben rezeghet az  $x$  irányban, ami erre az irányra merőleges fénykibocsátást tesz lehetővé.

Az  $y$  koordináta mátrixelemét kiszámítva ugyanezt a feltételt kapjuk, tehát az  $y_{\psi\psi'}$  mátrixelem csak  $\Delta m_l = \pm 1$  esetén különbözhet nullától. A  $z$  koordináta mátrixelemére ( $z = r \cos \theta$ ) pedig a következő kifejezést kapjuk

$$\begin{aligned} z_{\psi\psi'} &= \int \psi_{nlm_l}^* z \psi_{n'l'm'_l} d\vec{r} \\ &= \int_0^\infty r^3 R_{nl}^* R_{n'l'} dr \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta \Theta_{lm_l}^* \Theta_{l'm'_l} d\theta \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi. \end{aligned} \quad (9.25)$$

A  $\varphi$ -től függő integrál

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'_l - m_l)\varphi} d\varphi \quad (9.26)$$

csak akkor lesz nullától különböző, ha a mágneses kvantumszám változása

$$\Delta m_l = 0. \quad (9.27)$$

Tehát az elektron csak akkor rezeghet az  $Oz$  kitüntetett tengely irányában, erre merőleges irányú sugárzást bocsátva ki, ha az átmenetkor a mágneses kvantumszám nem változik.

Összefoglalva, egy adott  $\psi_{nlm_l} \rightarrow \psi_{n'l'm'_l}$  optikai átmenet csak akkor lehetséges, ha a mágneses kvantumszám változása

$$\Delta m_l = 0, \pm 1, \quad (9.28)$$

amint azt a normális Zeeman-hatás tárgyalásakor már említettük. Mágneses mezőben a  $\Delta m_l = 0$ -nak megfelelő színeképvonal a mágneses erővonalak, tehát az  $Oz$  tengely irányában nem észlelhető, míg a  $\Delta m_l = \pm 1$ -nek megfelelő színeképvonalak minden irányból való vizsgálatnál megjelennek.

Megvizsgálva a 9.18 és a 9.25 integrálok  $\theta$ -tól függő részét, és tudva, hogy  $\Theta_{lm_l} = P_l^{m_l}(\cos \theta)$ , az általánosított Legendre-polinomok tulajdonságainak felhasználásával bebizonyítható, hogy a mátrixelemek csak abban az esetben különbözhetnek nullától, ha a mellékkvantumszám változása

$$\Delta l = \pm 1. \quad (9.29)$$

A radiális koordináta szerinti integrál nem vezet semmilyen kiválasztási szabályhoz, az  $n$  főkvantumszám egy optikai átmenetkor bármekkora értékkel változhat.

Ha figyelembe vesszük a spin-pálya kölcsönhatást is, a számítások azt mutatják, hogy optikai átmenet csak azon finomszerkezeti szintek között lehetséges, amelyeknél a teljes impulzusmomentumot jellemző kvantumszám legtöbb egységnyivel változik

$$\Delta j = 0, \pm 1. \quad (9.30)$$

Két-vagy többelektronos átmenetekre a következő kiválasztási szabályok adódnak

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad (9.31)$$

$$\Delta m_j = 0, \pm 1. \quad (9.32)$$

$LS$  csatolás esetén, amikor a pályanyomaték és a spin külön kezelhető, ezeket kiegészíthetjük a

$$\Delta l = 0, \pm 1 \quad (9.33)$$

$$\Delta s = 0 \quad (9.34)$$

feltételekkel.

### 9.3 Egy-elektron átmenetek

Amint azt már említettük, az atomi elektronok állapotáról, a lehetséges energiaszintekről a legpontosabb információkat az atomok által kibocsátott vagy elnyelt elektromágneses sugárzás spektrumából nyerjük. A 7. fejezetben sokat hivatkoztunk a hidrogén spektrumára. Ábrázoljuk most már a hidrogénatom különböző állapotai közötti lehetséges átmeneteket a kiválasztási szabályok ismeretében.

A 9.1 diagramon a hidrogénatom kvantumállapotainak energiáit ábrázoltuk. Az energia nullszintjét az atom alapállapotában vettük fel. Ha elhanyagoljuk a spin-pálya

9.1. ábra: A hidrogénatom energiadiagramja és az egyes kvantumállapotok közötti lehetséges átmenetek.

kölcsönhatást, az állapot energiája csak a főkvantumszámtól függ. Az átmenetek berajzolásakor figyelembe vettük, hogy  $\Delta l = \pm 1$ , de mivel az energiaszintek  $l$  szerint elfajultak, ennek a hidrogénnek a 6.1 általánosított Balmer-képlet által leírt spektrumában nincs jelentősége.

A spin-pálya kölcsönhatást, amely megszünteti a  $j$  szerinti elfajulást, és az  $l$  szerinti elfajulást is megszüntető kvantumelektrodinamikai hatásokat csak az  $n = 2$  és az  $n = 3$  szintekre szemléltettük. A kinagyítva berajzolt átmenetek a Balmer-sorozat  $H_\alpha$  vonalának a finomszerkezetét adják. Figyelembe véve, hogy  $\Delta l = \pm 1$  és  $\Delta j = 0, \pm 1$ , a  $H_\alpha$  vonal hét finomszerkezeti vonalból áll. Ezeket kísérletileg is sikerült kimutatni.

Hasonló módon adhatók meg a lehetséges optikai átmenetek az alkálifémek esetén is, amelyeknek a külső héján egy elektron található. Fontos különbség az energiaspektrumban viszont, hogy a belső, zárt héjakon lévő elektronok elektrosztatikus hatása megszünteti az energiaszinteknek a mellékkvantumszám szerinti elfajulását.

A 9.2 ábrán a nátriumatom energiaszintjeinek diagramját rajzoltuk fel. Összehasonlításképpen jobb oldalon a hidrogén atom energiaszintjeit is feltüntettük. Jól látható, hogy az azonos főkvantumszámmal jellemzett állapotok energiája nő az  $l$  növekedésével. Ismert átmenet a nátriumban a  $3p \rightarrow 3s$ , amely élénk sárga színű színeképvonalat eredményez. Ha figyelembe vesszük a  $3p$  szintnek (az ábrán nem feltüntetett) finomszerkezeti felhasadását a magasabb energiájú  $3^2P_{3/2}$ , és az alacsonyabb energiájú  $3^2P_{1/2}$

9.2. ábra: A nátriumatom energiadiagramja és az egyes kvantumállapotok közötti lehetséges átmenetek.

szintekre, két, egymástól  $\Delta\lambda = 6 \text{ \AA}$  hullámhosszkülönbséggel elválasztott színeképvonalat kapunk, amelyek már egy egyszerű spektroszkóppal is jól megfigyelhetők. Nagyobb rendszámú alkálifémeknél ez a finomszerkezeti felhasadás jóval nagyobb mértékű.

## 9.4 Két-elektron átmenetek

Ha az atom külső héján két elektron található, ezek kölcsönhatása lényegesen befolyásolja az egyes energiaszintek közötti átmeneteket. Akkor is, ha csak az egyik elektront gerjesztjük, az árnyékolási potenciál lényeges változása miatt a másik állapota is megváltozik.

Ha a két elektron impulzusmomentumai az  $LS$  csatolás szerint kapcsolódnak össze, akkor, amint azt a 9.2 fejezetben említettük, a két-elektron rendszert jellemző kvan-

9.3. ábra: A héliumatom energiadiagramja és a lehetséges optikai átmenetek.

tumszámokra a következő kiválasztási szabályok érvényesek

$$\Delta l = 0, \pm 1 \quad (9.35)$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad (9.36)$$

$$\Delta s = 0, \quad (9.37)$$

de a  $j = 0 \rightarrow j = 0$  átmenet nem lehetséges. Fontos megjegyezni, hogy optikai átmenet során a rendszer spin-állapota nem változhat. Ha az átmenetben csak egy elektron vesz részt (egyszeres, és nem kétszeres gerjesztésről van szó), akkor a mellékkvantumszámra vonatkozó kiválasztási szabály szigorúbb

$$\Delta l = \pm 1. \quad (9.38)$$

A 9.3 ábrán a legegyszerűbb kételektronos atom, a hélium energiadiagramját tüntettük fel. A gerjesztett állapotok mind egy-elektron gerjesztést jelentenek, tehát a másik



elektron az  $1s$  alapállapotban marad. A kétszeresen gerjesztett állapotoknak az (ábrán nem feltüntetett) energiája az egyszeres ionizációs energiánál nagyobb.

A szinglett állapotok ( $s = 0$ ) és a tripllett állapotok ( $s = 1$ ) között nem lehetséges az optikai átmenet. A  $He$  atom alapállapota ( $1^1S_0$ ) kötelezően szinglett állapot, mert mindkét elektron az  $1s$  orbitálon van, és a Pauli-féle kizárási elv értelmében az egyik elektron az  $m_s = +1/2$ , míg a másik az  $m_s = -1/2$  állapotban kell hogy legyen. Ha a héliumatomot valamilyen módon (pl. töltött részecskével való ütközéssel) egy tripllett állapotba gerjesztjük, akkor a tripllett állapotból nem fog optikai átmenettel szinglett alapállapotba átmenni. Ezért a héliumnak legalacsonyabb energiájú,  $2^3S_1$  tripllett állapota hosszú életű, metastabil állapot. Innen az alapállapotba csak egy nagyon kevésbé valószínű két fotonos kölcsönhatás, vagy más részecskével való ütközés útján lehetséges az átmenet.

Mivel a hélium esetén két teljesen különböző spektrumot észleltek, a hélium két állapotának külön nevet is adtak. A szinglett állapotban lévő héliumot parahéliumnak, míg a tripllett állapotban lévő ortohéliumnak nevezzük.

Az ábrán is látható, amit a Hund-szabály megfogalmazásakor megjegyeztünk, hogy a tripllett állapotok alacsonyabb energiájúak az ugyanolyan térbeli hullámfüggvénnyel jellemzett szinglett állapotoknál. A tripllett–szinglett átmeneteken kívül a  $2^1S_0 \rightarrow 1^1S_0$  átmenet is tiltott. Ezért a  $2^1S_0$  állapot is metastabil, de rövidebb élettartamú, mint a  $2^3S_1$ .

Szintén két elektron van a külső héján a  $Z = 80$  rendszámú higanyatomnak. A 9.4 ábrán a tripllett szintek finomszerkezeti felhasadását is feltüntettük, ami az ilyen nagy rendszámú atomoknál már jelentős. A lényeges különbség a hélium színekéhez viszonyítva az, hogy az erős spin-pálya kölcsönhatás miatt az elektron momentumai között már nem tisztán  $LS$  csatolás valósul meg, hanem az  $LS$  és a  $jj$  csatolás keveréke. Ezért a  $\Delta s = 0$  kiválasztási szabály már nem érvényes, és lehetséges a tripllett és a szinglett állapotok közötti átmenet. Jellemző színeképvonala a higanynak a  $6^3P_1 \rightarrow 6^1S_0$  átmenetnek megfelelő, mely az ibolyántúli tartományban található.

## 9.5 Röntgenspektrumok

Az atomok külső héján lévő elektronok átmenetei esetén az energiaszintek közötti távolság néhány elektronvoltnál nem nagyobb (maximum 24,6 eV a hélium esetén). Ezen átmenetek során kibocsátott fény a látható vagy a közeli ibolyántúli tartományba esik.

Más a helyzet akkor, ha az átmenet az atom egyik belső elektronhéjára történik. Ezekon jóval nagyobb az elektron kötési energiája, így az energiszintek közötti különbség több ezer elektronvolt is lehet. Ilyen optikai átmenetek esetén az atom röntgensugárzást bocsát ki. Ez a 5.3 fejezetben már említett karakterisztikus röntgensugárzás.

A viszonylag könnyű,  $Z = 11$  rendszámú  $Na$  atom esetén az egyes elektronhéjakról

9.4. ábra: A higanyatom energiadiagramja és a lehetséges optikai átmenetek.

történő ionizáció energiája a következőképpen alakul

$$\begin{aligned} 3s &\rightarrow 5,13 \text{ eV} \\ 2p &\rightarrow 31 \text{ eV} \\ 2s &\rightarrow 63 \text{ eV} \\ 1s &\rightarrow 1041 \text{ eV.} \end{aligned}$$

A nagyobb rendszámú elemeknél még nagyobb kötési energiákat kapunk, az  $1s$  szint energiája hozzávetőlegesen  $Z^2$ -el arányos.

A röntgensőben felgyorsított elektronok az antikatód atomjainak a belső héjairól elektronokat ütnek ki. Az így keletkezett szabad állapotokat az atom külső héjain található elektronok foglalják el, miközben a fölösleges energiát fotonok (röntgensugárzás) formájában bocsáthatják ki. Az alapállapotot az atom általában több, egymás utáni átmenet útján éri el.

Egy nehéz atom elektronhéjainak energiáit a 9.5 ábrán szemléltettük. Eltekintettünk az energiának a mellékvantumszámtól és a spin-pálya kölcsönhatástól való függésétől. A legalacsonyabb energiájú,  $K$  héjra való átmenetek alkotják a röntgenspektrum  $K$  sorozatát, az  $L$  héjra való átmenetek az  $L$  sorozatot, és így tovább. Egy adott  $n$  főkvantumszámmal jellemzett héj energiáját durván a Bohr-modellből adódó képlet

9.5. ábra: Lehetséges röntgenátmenetek egy nehéz atomban.

alapján lehet megadni

$$E_n = -\frac{Z_{\text{eff}}^2 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2}. \quad (9.39)$$

$Z_{\text{eff}}$  az elektron által „érezett” effektív töltés, amely figyelembeveszi a belső elektronok töltés-árnyékoló hatását. Az effektív töltés a következőképpen írható fel

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma, \quad (9.40)$$

ahol  $\sigma$  az árnyékolási tényező. Ennek értéke a  $K$  sorozat esetén  $\sigma = 1$  (csak az  $1s$  elektron árnyékol), az  $L$  sorozat esetén  $\sigma = 7,5$  (2 db.  $1s$  elektron teljes, és 7 db.  $2s + 2p$  elektron részleges árnyékolását kell figyelembevenni).

Egy adott  $n \rightarrow m$  átmenetkor kibocsátott sugárzás hullámszámát a Bohr-féle

frekvenciafeltételből határozhatjuk meg

$$\tilde{\nu} = \frac{E_n - E_m}{hc} = R(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (9.41)$$

Amint látjuk, a fenti megfontolás alapján megkaptuk a kísérletileg felállított Moseley-törvényt (5.39–5.40 képletek).

Figyelembevétel a héjakon található elektronok energiájának az  $l$  mellékkvantum-számtól és (a spin-pálya kölcsönhatás következtében) a  $j$  teljes impulzusmomentumtól való függését, minden fő energiaszint  $2n - 1$  szintre hasad fel. Felhasználva a  $\Delta l = \pm 1$  és a  $\Delta j = 0, \pm 1$  kiválasztási szabályokat, meghatározhatjuk a lehetséges átmeneteket. Így például a  $K$  sorozat színekvonalai mind két finomszerkezeti vonalból állnak. Ezek jelölése  $K_{\alpha 1}$ ,  $K_{\alpha 2}$ ,  $K_{\beta 1}$ ,  $K_{\beta 2}$  és így tovább.

# Univerzális fizikai állandók

| Mennyiség                                     | Jelölés, egyenlet                                     | Számérték   |
|---|---|---|
| fénysebesség                                  | $c$   | 299 792 458 m/s   |
| Planck-állandó                                | $h$   | $6,626\ 075\ 5(40)\cdot 10^{-34}$ Js  |
| redukált Planck-állandó                       | $\hbar \equiv h/2\pi$                                 | $1,054\ 572\ 66(63)\cdot 10^{-34}$ Js   |
| elemi töltés                                  | $e$   | $1,602\ 177\ 33(49)\cdot 10^{-19}$ C  |
| elektron tömege                               | $m_e$   | $0,510\ 999\ 06(15)$ MeV/ $c^2$<br>$= 9,109\ 389\ 7(54)\cdot 10^{-31}$ kg                     |
| proton tömege                                 | $m_p$   | $938,272\ 31(28)$ MeV/ $c^2$<br>$= 1,672\ 623\ 1(10)\cdot 10^{-27}$ kg                        |
| atomtömeg egység                              | $1\ \text{u} \equiv 1\ \text{amu} = m_{C^{12}}/12$    | $931,494\ 32(28)$ MeV/ $c^2$<br>$= 1,660\ 540\ 2(10)\cdot 10^{-27}$ kg                        |
| légyüres tér permittivitása                   | $\epsilon_0$  | $8,854\ 187\ 817\ \dots \cdot 10^{-12}$ F/m   |
| légyüres tér permeabilitása                   | $\mu_0 = 1/(\epsilon_0 c^2)$                          | $4\pi 10^{-7}$ N/A <sup>2</sup><br>$= 12,566\ 370\ 614\ \dots \cdot 10^{-7}$ N/A <sup>2</sup> |
| finomszerkezeti állandó                       | $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$                | 1/137,035 989 5(61)   |
| elektron elektromágneses sugara               | $r_e = e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2)$                  | $2,817\ 940\ 92(38)\cdot 10^{-15}$ m  |
| Compton-hullámhossz                           | $\Lambda/(2\pi) = \hbar/(m_e c)$                      | $3,861\ 593\ 23(35)\cdot 10^{-13}$ m  |
| Rydberg-állandó ( $m_{\text{mag}} = \infty$ ) | $R_\infty = m_e e^4/(8\epsilon_0^2 \hbar^3 c)$        | $10\ 973\ 731,572(4)$ m <sup>-1</sup>   |
| Bohr-sugár ( $m_{\text{mag}} = \infty$ )      | $a_\infty = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2/(m_e e^2)$         | $0,529\ 177\ 249(24)\cdot 10^{-10}$ m   |
| Rydberg-energia                               | $hcR_\infty = m_e e^4/(32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2)$ | $13,605\ 698\ 1(40)$ eV   |
| Bohr-magneton                                 | $\mu_B = e\hbar/(2m_e)$                               | $5,788\ 382\ 63(52)\cdot 10^{-11}$ MeV/T  |
| Avogadro-féle szám                            | $N_A$   | $6,022\ 136\ 7(36)\cdot 10^{26}$ kmol <sup>-1</sup>   |
| Boltzmann-állandó                             | $k$   | $1,380\ 658(12)\cdot 10^{-23}$ J/K<br>$= 8,617\ 385(73)\cdot 10^{-5}$ eV/K                    |
| Wien-féle eltolódási állandó                  | $b = \lambda_{\text{max}} T$                          | $2,897\ 756(24)\cdot 10^{-3}$ m K   |
| Stefan-Boltzmann állandó                      | $\sigma = \pi^2 k^4/(60\hbar^3 c^2)$                  | $5,670\ 51(19)\cdot 10^{-8}$ W/(m <sup>2</sup> K <sup>4</sup> )                               |
| gravitációs állandó                           | $G_N$   | $6,672\ 59(85)\cdot 10^{-11}$ m <sup>3</sup> /(kg s <sup>2</sup> )                            |

# Név-és tárgymutató

- abszolút fekete test 41
- alhéj 108
- antiszimmetrikus hullámfüggvény 106
- Arisztotelész 8
- Aston-féle tömegspektrográf 24
- atomi egységek 120
- atomtömegegység 21
- Avogadro törvénye 9
- Avogadro-szám 9
  
- állandó súlyviszonyok törvénye 8
- árnyékolási potenciál 107
  
- Bainbridge-féle tömegspektrográf 24
- Bainbridge-Jordan-féle tömegspektrográf 25
- Balmer 61
- Balmer-sorozat 62
- Barkla kísérlete 51
- Bernoulli 8
- Bohr, Niels 62
- Bohr-féle atommodell 62
- Bohr-féle frekvenciafeltétel 63, 131
- Bohr-féle kvantumfeltétel 64
- Bohr-magneton 90
- Bohr posztulátumai 62
- Bohr-Sommerfeld modell 67
  - relativisztikus 69
- Bohr-sugár 65, 81
- bolygómodell 32
  - hiányosságai 38
- Born 28
- bozonok 107
- Brackett-sorozat 62
- Bragg 52
- Bragg-féle összefüggés 53
- Bragg-síkok 53, 73
  
- Compton 56
  
- Compton-hatás 56
- Compton-hullámhossz 58
- csősugárzás 22
  
- Dalton 8
- Davisson és Germer kísérlete 73
- de Broglie 72
- de Broglie-hipotézis 72
- Dempster-féle tömegspektrométer 25
- Démokritosz 7
- Dirac 94
- Dirac-egyenlet 100
- dublett módszer 26
  
- egy-elektron átmenetek 133, 135
- Einstein 50
- Einstein képlete a fényelektromos hatásra 50
- elektron 12
  - elektromágneses sugara 19
  - elektromágneses tömege 19
  - eltérítése homogén elektromos mezőben 13
  - eltérítése homogén mágneses mezőben 14
  - fajlagos töltés meghatározása 12, 13, 16
  - felfedezése 12
  - hullámtermészete 72
  - mágneses nyomatéka 87
  - megtalálhatósági valószínűsége 83
  - spinje 92
  - teljes impulzusnyomatéka 96
  - töltésének meghatározása 12, 17
  - tömegének sebességfüggése 16
- elektron-konfigurációk 107, 108
- elektronhéj 107
- Empedoklész 7

energia sajátértékei, hidrogénatomra 81  
 energiakvantum 47  
 energiaminimum elve 107  
  
 Faraday 11  
 Faraday törvényei az elektrolízisre 11  
 fermionok 107  
 fékezési sugárzás 55  
 fényelektromos hatás 47  
     törvényei 48  
 finomszerkezet, színeképvonalaké 66, 92  
 finomszerkezeti állandó 69  
 foton 50  
     elnyelés és kibocsátás 131  
 főkvantumszám 81  
 Franck és Hertz kísérlete 70  
  
 Geiger és Marsden kísérlete 32  
 giromágneses hányados 88  
 Goudsmit 92  
 gömbfüggvények 79  
  
 Hamilton-operátor 77  
 Hartree-Fock egyenlet 125, 128  
 Hartree-Fock határ 124  
 Hartree-Fock módszer 124  
 háromszög-egyenlőtlenség 97  
 Heisenberg 8, 77  
 héliumatom 119  
 hiperfinom-szerkezet 99  
 hőmérsékleti sugárzás 41  
 Hund-szabály 110  
 Hylleras-típusú hullámfüggvény 124  
  
 ibolyántúli katasztrófa 46  
 impulzusnyomaték sajátértékei 79  
 impulzusnyomatékok csatolása 111  
 izotópok 21  
  
*jj* csatolás 114  
  
 karakterisztikus röntgensugárzás 56, 139  
 katódsugárzás 12  
 Kaufmann 13  
 két-elektron átmenetek 137  
 kicserélődési integrál 128  
 Kirchhoff-törvény, sugárzásra 41  
 kiválasztási szabályok 133  
 Klein-Gordon egyenlet 99  
 Koopman-tétel 126  
 korreláció 129  
 kvantumelektrodinamikai hatások 103  
 kvantálási feltételek 78  
  
 Lamb 102  
 Lamb-eltolódás 103  
 Landé-faktor 116  
 Landé-féle intervallumszabály 98  
 Laue 52  
 Loschmidt 9  
*LS* (Russel-Saunders) csatolás 111, 137  
 Lyman-sorozat 61  
  
 magmodell 33  
 mágneses kvantumszám 78  
 mágneses nyomaték 87  
 mellékkvantumszám 78  
 Mengyelejev 21  
 Millikan 17  
 Millikan-kísérlet 17  
 Moseley 56  
 Moseley-törvény 56, 142  
 multipliett 98  
     fordított 98, 113  
     normális 98, 113  
 multiplicitás 99  
  
 Nier-féle tömegspektróméter 25  
  
 optikai átmenetek 131  
 optikailag megengedett átmenetek 133  
 optikailag tiltott átmenetek 133  
 orbitál 79, 83, 124  
 orbitál-energia 126  
 orbitális kvantumszám 78  
 orthélium 139  
  
 önkonzisztens tér módszere 125  
  
 parabolamódszer 16, 22  
 parahélium 139  
 Paschen-sorozat 62  
 Paschen-Back hatás 118  
 Pauli 105

Pauli-féle kizárási elv 105  
perturbációs módszer 121  
Pfund-sorozat 62  
Pickering-sorozat 66  
Planck 46  
Planck-féle állandó 47  
Planck-féle sugárzási törvény 47  
Platón 7  
Proust 8

radiális egyenlet 80  
Rayleigh-Jeans törvény 43, 46  
relativisztikus Bohr-Sommerfeld modell  
69  
relativisztikus modell, hidrogénatomé 99  
röntgensugárzás 51  
röntgenspektroszkópia 53  
Russel-Saunders (*LS*) csatolás 111, 137  
Rutherford 32, 102  
Rutherford-szórás 34  
képlete 38  
Rydberg-állandó 56, 61

Schrödinger 77  
Schrödinger-egyenlet 77  
sebességszűrő 24  
Slater-determináns 107  
Soddy 21  
Sommerfeld 67  
spektrum  
optikai 61, 131  
röntgensugaraké 55, 139  
spin 92  
spin-mágneses nyomaték 92  
spin-pálya kölcsönhatás 95, 111, 113  
spinkvantumszám 93  
Stark-hatás 119  
lineáris 119  
Stefan-Boltzmann törvény 42  
Stern-Gerlach kísérlet 92  
Stoney 12  
sugár, atomoké 28  
szimmetrikus hullámfüggvény 106

teljes impulzusnyomaték, elektroné 96  
term-jelölés 98

Thomson, J.J. 12, 13, 22, 31  
Thomson-modell 31  
Thomson-szórás 56  
többszörös súlyviszonyok törvénye 8  
tömegmérés, atomoké 21  
tömegspektrográfok 23  
tömegspektrométerek 23

Uhlenbeck 92

ütközési hatáskeresztmetszet 28

variációs módszer 122  
vektormodell 89

Waterson 8  
Wien-féle eltolódási törvény 43  
Wien-féle sugárzási törvény 46  
Wien-törvény 42

Zeeman-hatás 69  
anomális 92, 114  
normális 90, 92, 135



# Könyvészet

- [1] Baiser, A., *Perspectives of modern physics*, McGraw-Hill Book Company, 1969.
- [2] Born, M., *Fizica atomică*, Editura științifică București, 1973.
- [3] Budó–Mátrai, *Kísérleti fizika III*, Tankönyvkiadó Budapest, 1980.
- [4] Cosma, C., *Fizică atomică și nucleară I*, Universitatea Babeș-Bolyai Cluj, 1996.
- [5] Cozar, O., *Teoria grupurilor în fizica atomului și moleculei*, Universitatea Babeș-Bolyai Cluj, 1986.
- [6] Farkas A., *Atomfizika*, Babeș-Bolyai Tudományegyetem Kolozsvár, 1977.
- [7] Iliescu, T., *Spectroscopie și laseri*, Universitatea Babeș-Bolyai Cluj, 1986.
- [8] Kapuy–Török, *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*, Akadémiai kiadó Budapest, 1975.
- [9] Koch F., *Atomfizikai alapismeretek*, Dacia könyvkiadó Kolozsvár, 1980.
- [10] Landau–Lifsic, *Elméleti fizika III – Kvantummechanika*, Tankönyvkiadó Budapest, 1978.
- [11] Landau–Lifsic, *Elméleti fizika IV – Relativisztikus kvantumelmélet*, Tankönyvkiadó Budapest, 1979.
- [12] Marx Gy., *Kvantummechanika*, Műszaki könyvkiadó Budapest, 1971.
- [13] McQuarrie, D.A., *Quantum chemistry*, University Science Books, Oxford University Press, 1983.
- [14] Mercea, V., *Fizică atomică*, Universitatea Babeș-Bolyai Cluj, 1975.
- [15] Messiah, A., *Mecanică cuantică I-II*, Editura Științifică București, 1973.
- [16] Muscalu Șt., *Fizică atomică*, Editura Didactică și Pedagogică București, 1980.
- [17] Oncescu, M.A., *Fizica II*, Editura Didactică și Pedagogică București, 1975.
- [18] Simonyi K., *A fizika kultúrtörténete*, Gondolat kiadó Budapest, 1978.
- [19] Sokolow–Loskutow–Ternow, *Quantenmechanik*, Akademie-Verlag Berlin, 1964.

- [20] Spolszkij, E., *Atomfizika I-II*, Akadémiai Kiadó Budapest, 1958.
- [21] Wichmann, E., *Cursul de fizică Berkeley IV – Fizica cuantică*, Editura Didactică și Pedagogică București, 1983.
- [22] Zsakó–Boboș–Marian, *Atom-és molekulaszervezet*, Babeș-Bolyai Tudományegyetem Kolozsvár, 1995.