

A RÉSZECSKÉK HULLÁMTERMÉSZETE

„Hajlunk arra, hogy azt mondjuk: Thomson – az apa – 1906-ban azért kapott Nobel díjat mert megmutatta, hogy az elektron részecske, Thomson – a fiú pedig 1927-ben azért, mert megmutatta, hogy az elektron hullám”

MAX JAMMER

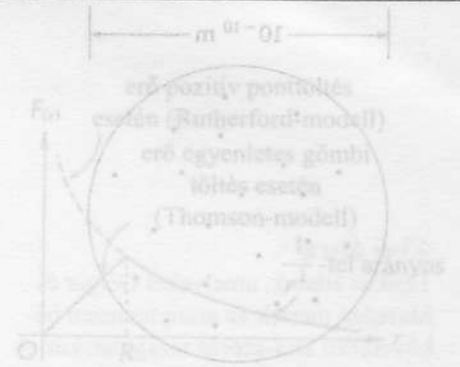
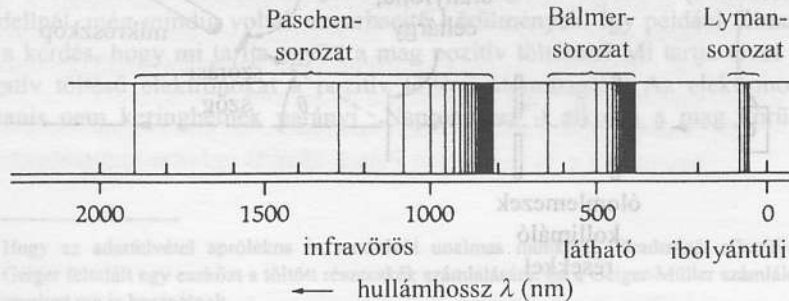
(megjegyzések J. J. Thomson és G. P. Thomson: *A kvantummechanika fogalmi fejlődése* c. könyvéhez McGraw Hill (1966))

43.1 Bevezetés

A sugárzás kettős természetének felfedezése már magában is izgalmas felismerés volt, de az 1920-as években újabb hasonlóan izgalmas felfedezés történt, kiderült, hogy az anyagi részecskék hullámtulajdonságokat mutatnak. Ez rendkívül kielégítő módon szimmetrikussá tette a fizikusok természetről alkotott elképzelését. A sugárzás és az anyag egyaránt mutat részecskejellegű és hullámjellegű vonásokat. Ahhoz, hogy ezt a felfedezést összefüggéseiben láthassuk, először néhány kiegészítő ismeretet tárgyalunk. Olyanokat, amelyek előkészítették az anyag kettős természetére vonatkozó állítás kimondását.

43.2 Az atommodellek

A századforduló táján azt hitték, hogy az atomok csak kétféle összetevőből: pozitív töltésű részecskékből és elektronokból épülnek fel. A kérdés lényege az volt, hogy hogyan állnak össze ezek stabilis atomokká? Vajon a töltött



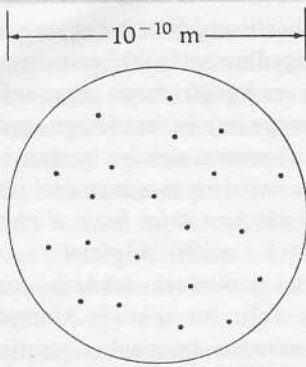
(a) Thomson-modell. A gömb alakú pozitív töltésű részecske, amelyben az elektronok egyenletesen eloszlottak. (b) Rutherford-modell. A pozitív töltésű részecske, amelyben az elektronok egyenletesen eloszlottak. (c) Rutherford-modell. A pozitív töltésű részecske, amelyben az elektronok egyenletesen eloszlottak.



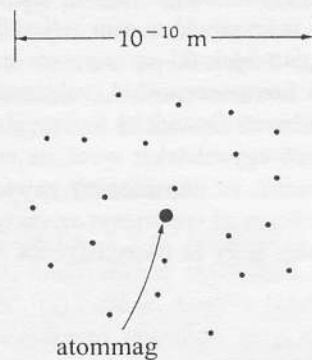
(b) Rutherford atommag modellje. Az atom pozitív töltésű részecske, amelyben az elektronok egyenletesen eloszlottak. (c) Rutherford atommag modellje. Az atom pozitív töltésű részecske, amelyben az elektronok egyenletesen eloszlottak.



43-1 ábra
Amikor a hidrogén gázt úgy melegítjük, hogy elektromos áramot bocsátunk át rajta, a gáz fényes vonalak sorából álló színekre bontható fényt bocsát ki magából. Ezt *emissziós színek*nek nevezzük (a fényes vonalakat itt sötét vonalakkal ábrázoltuk).



(a) Az atom „mazsolás-puding” modellje Thomson szerint. Az elektronok pozitív töltésű folyadék-gömbbe ágyazódnak.



(b) Rutherford atommag modellje. Az összes pozitív töltés (és közel az összes tömeg) a középpontban igen kis tartományban koncentrációdik. Az elektronok ezt a magot ismeretlen módon veszik körül.

43-2 ábra

Az atom klasszikus modelljei

részecskéknek milyen elrendezése hozhatja létre az atomi színekvonalaknak azt a rendkívül bonyolult gazdagságát, ami akkor figyelhető meg, ha a gázok a rajtuk átfolyó áram hatására gerjesztődnek? (43-1 ábra). A színeképeket nagy gondtal tanulmányozták és katalogizálták. Megpróbálták matematikai összefüggéseket keresni a hullámhosszak között, mert azt remélték, hogy így megtalálható az atomszerkezet felépítésének kulcsa. A rejtély megoldásának másik kiindulópontja az elemek kémiai tulajdonságainak megfigyelhető periodikus változása volt. (Erre épül a periódusos rendszer.) Kiindulópontként az atomokat kb 10^{-10} m sugarú gömböknek tekintették. Ezt a sűrűséget, az atom-súly és az Avogadro-szám segítségével lehet kiszámítani.

A Thomson-modell

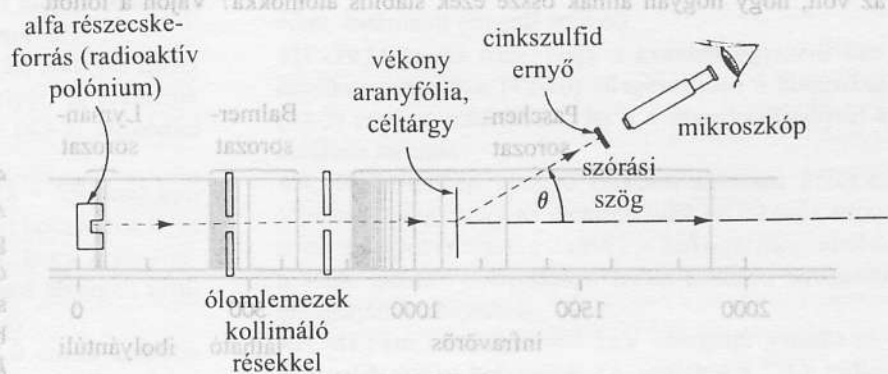
Figyelemre méltó próbálkozást tett az atom modellszerű elképzelésére J. J. Thomson angol fizikus, a Cambridge Egyetem tanára. 1898-ban, hogy az atom tömegének nagy részét lényegében egy Ze (ahol Z az atom rendszáma) pozitív töltésű folyadékgömb tartalmazza. Az elektronok ennek a pozitív folyadéknak a belsejébe vannak beágyazva, nagyjából úgy, ahogyan a mazsolák a mazsolás pudingba. (43-2a ábra) A feltevés szerint az elektronok a pozitív töltésű folyadékban különféle rezgéseket végezhetnek és emiatt (a klasszikus elmélet szerint) az adott frekvenciákon sugárzást bocsáthatnak ki. Sajnos azonban az így számított színekpi frekvenciák nem egyeztek a megfigyelt frekvenciákkal.

A Rutherford-modell

1910 előtt a fizikusok az atomszerkezet titkait szórás kísérletekkel próbálták felderíteni. Azt vizsgálták, hogy az atomok hogyan szórják a rájuk eső részecskéket, ill. sugárzást. A bombázó részecskék leggyakrabban röntgensugarak, elektronok és alfa-részek voltak. Ernest Rutherford¹ a Manchester-i Egyetem professzora, Thomson tanítványa az alfa-sugarak szóródását tanulmányozta az anyagokon. Az alfarészecskékről akkor már tudták, hogy töltésük pozitív és az elektron töltésének kétezerszerese, tömegük pedig a hidrogénatom tömegének kb. négyszerese. Az alfa-részek megfelelő bombázó részecskéknek bizonyultak, mert egyes természetes radioaktív elemek néhány

43-3 ábra

Rutherford alfa-szórás kísérlete. A cinkszulfid detektor úgy mozgatható, hogy vele a különböző irányokban érkező szórt részecskéket lehessen detektálni. A berendezést légritkított kamrában helyezték el.



¹ Rutherford 1908-ban kémiai Nobel-díjat kapott azért a felfedezésért, hogy az urániumból származó sugárzás legalább két összetevőből áll, amit ő *alfa-* és *béta-*sugárzásnak nevezett. Később kimutatta, hogy az alfa-„sugárzás” valójában hélium atommagokból álló részecskenyaláb.

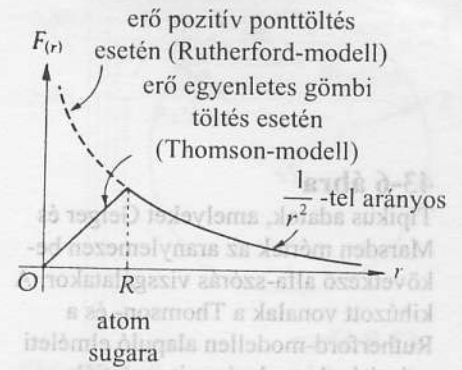
millió elektronvolt energiával bocsátották ki őket. Rutherford igen vékony céltárgy-lemezt alkalmazott azt remélve, hogy ezáltal az egyes atomok okozta szórás lesz képes megfigyelni, nem a sok atom hatását. A többszörös ütközések ugyanis elmoshatták volna az egyszeri ütközések jellegzetességeit, tehát éppen azt, amit vizsgálni szeretett volna. Jóllehet több különböző kémiai elemet megvizsgált, az arany bizonyult a legmegfelelőbb céltárgynak, ezt ugyanis igen vékony, néhány száz atomnyi vastagságú rétegekké lehet kiverni. Amint a 43-3 ábra mutatja, a szórt alfa-részecskék végül cinkszulfiddal bevont kicsiny ernyőnek ütköznek, aholis parányi fényfelvillanást okoznak, s ez mikroszkóppal észlelhető. Az észlelés fárasztó munka volt, mert a sötétséghez jól adaptált szemét kívánt. Ebben a munkában Rutherford segítései Dr. Hans Geiger és egy egyetemi hallgató, Ernest Marsden voltak².

A kis, 1° , 2° , nagyságú szórás szögeknél történő első megfigyelések a Thomson-modellt látszottak megerősíteni. Rutherford azt akarta, hogy Marsden mihamarább saját kutatási programba kezdjen, és azt javasolta, hogy a visszaszórás (a 90° -os eltérítésnél nagyobb szögeket) vizsgálja meg, bár ő maga nem sok esélyt látott arra, hogy a gyors alfa részecskét a Thomson típusú atom hátraszórja. Mindenki legnagyobb meglepetésére sok visszaszórt alfarészecskét észleltek. A meglepetés oka a szórás valószínűségek becsléséből nyilvánvaló. Az alfa-részecskék tömege kb. 8000-szer akkora, mint az elektronoké, így az elektronoknak csak elhanyagolható szerepük lehet a szórásban. A szórás csakis a nagy tömegű pozitív töltés hatásának tudható be. A Thomson-atomban a pozitív töltés az egész gömbszerű atomban egyenletesen oszlik el, így az a maximális erő, amit egyetlen atom az alfa-részecskére ki tud fejteni, korlátozott nagyságú (lásd 43-4 ábra), s ez az α részecske mozgásában legfeljebb néhány századfoknyi eltérést okozhat. Így az α -részecskéknek egymás után atomok ezreiről kellene szóródnia, és ráadásul mindegyikről azonos irányban, hogy végezetül 90° -os, vagy nagyobb eltérítést észleljünk. A Thomson-atom okozta visszaszórás valószínűsége a kísérletben alkalmazott fóliára, Rutherford számításai szerint, hihetetlenül kicsinek adódott: 10^{-3500} . Geiger és Marsden viszont kísérletileg 10^{-4} értéket állapított meg. Kétségtelen, hogy ez a $\sim 10^{3496}$ nagyságú szorzótényezőbeli eltérés elnyerheti a „minden idők legnagyobb eltérése a kísérlet és elmélet között” díjat. Rutherford később így írt erről:

„Ez volt a leghihetlenebb esemény az egész életemben. Csaknem annyira hihetetlen volt, mint az, hogy 15 hüvelykes lövedékkel selyempapírra lövök, s a lövedék visszapattanva engem talál el”.

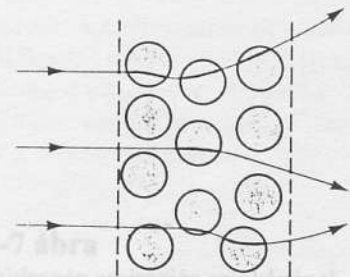
Felismerve, hogy az egyszeri szórás aktusban bekövetkező nagy szögű szórás csak nagyon nagy erőktől származhat, Rutherford 1911-ben atommagot tartalmazó modellt javasolt. Ebben a nagy tömegű pozitív töltés a központi régióban, az úgynevezett **atommagban** koncentrálódik, amely semmiképpen nem nagyobb, mint 10^{-14} m, mivel ahhoz, hogy az alfa-rész visszaszóródjék, csak akkor léphet fel elegendően nagy erő, ha az alfa résznek a Z nagyságú ponttöltést ennyire megközelítik. A 43-5 ábra a kétféle modellt hasonlítja össze. A 43-6 ábrán szórás kísérlet során kapott eredmények láthatók.

Bár a Rutherford-modell nyilvánvalóan megfelelőbb volt a Thomson-modellnél, még mindig voltak zavarbaejtő körülmények. Így például felmerül a kérdés, hogy mi tartja együtt a mag pozitív töltéseit? Mi tartja távol a negatív töltésű elektronokat a pozitív töltésű atommagtól? Az elektronok ugyanis nem keringhetnek parányi „Naprendszer”-t alkotva a mag körül,

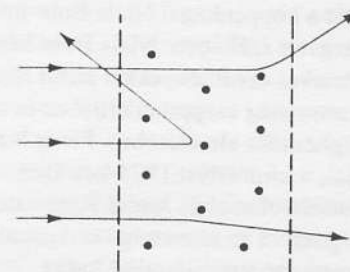


43-4 ábra

Kétféle különböző elrendezésű pozitív töltés által az alfa-részecskére kifejtett erő (ponttöltés és véges méretű, egyenletesen töltött gömb). (lásd a 25-16 ábrát is a 25. fejezetben)



(a) A Thomson-modell szerint többszörös ütközés lép fel akkor, amikor az alfa-részecskék egyenél több atomba hatol be. (A szórás mértékét nagyon eltúloztuk)



(b) A Rutherford-modell szerint a nagy szórás szögek megjelenése egyetlen atommaggal való igen közeli találkozás következménye.

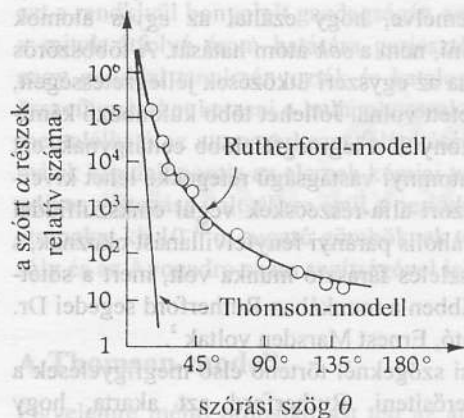
43-5 ábra

Az alfa-részecskék szóródása vékony anyagfólián. A céltárgy fólia általában néhány száz atomnyi vastagságú.

² Hogy az adatfelvétel aprólékos és rendkívül unalmas munkáját, fáradtságát elkerülje, Geiger feltalált egy eszközt a töltött részecskék számlálására. Ez a Geiger-Müller számláló, amelyet ma is használnak.

43-6 ábra

Tipikus adatok, amelyeket Geiger és Marsden mértek az aranylemezen be-következő alfa-szórás vizsgálatokor. A kihúzott vonalak a Thomson- és a Rutherford-modellen alapuló elméleti számítások eredményeit mutatják.



mert a Maxwell-elmélet szerint a gyorsuló töltések elektromágneses hullámokat bocsájtanak ki. Valóban, ilyen sugárzás keletkezését mindig megfigyelték, valahányszor elektronok gyorsuló mozgásáról volt szó. A klasszikus fizika szerint, ha az elektronok körpályán kezdenének mozogni, akkor energiájukat kevesebb, mint 10^{-8} s alatt kisugároznák és spirális pályán a magba zuhannának. Nyilvánvaló, hogy az atomokban ez nem történik meg. Hol van hát a hiba?

A Bohr-modell

Ahogy a 43-7 ábra mutatja, már a H -atom – valamennyi atom közül a legegyszerűbb – esetében is a színeképvonalak rendszerének rendkívül bonyolult és mégis szabályszerű szerkezete van. Milyenek kell lennie egyetlen proton és egyetlen elektron kölcsönhatásának, hogy a színeképvonalaknak ezt a sorozatát eredményezze? Egy svájci középiskola ábrázológeometria-tanára, J. Balmer próbálgatással felállított egy *empirikus* képletet, amely csaknem egzaktnul reprodukálta a megfigyelt hullámhosszakat:

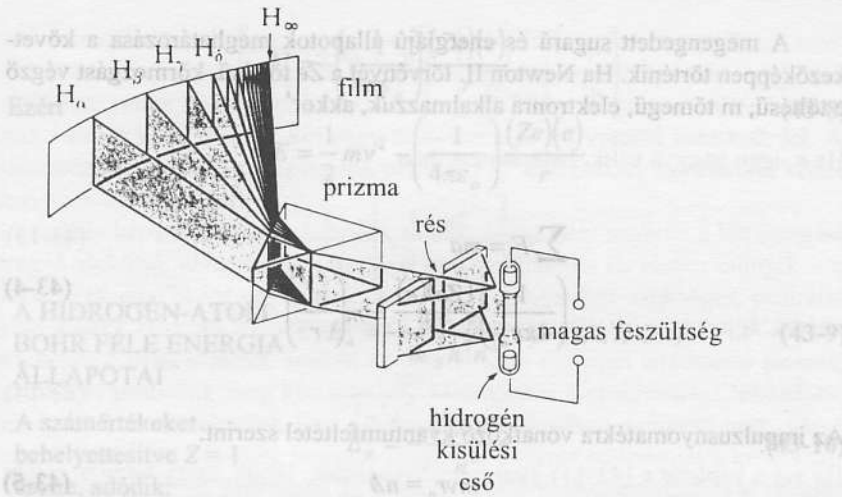
A HIDROGÉN
BALMER
SOROZATA

$$\lambda = (364,56 \text{ nm}) \left(\frac{n^2}{n^2 - 2^2} \right) \quad (\text{ahol } n = 3, 4, 5, \dots) \quad (43-1)$$

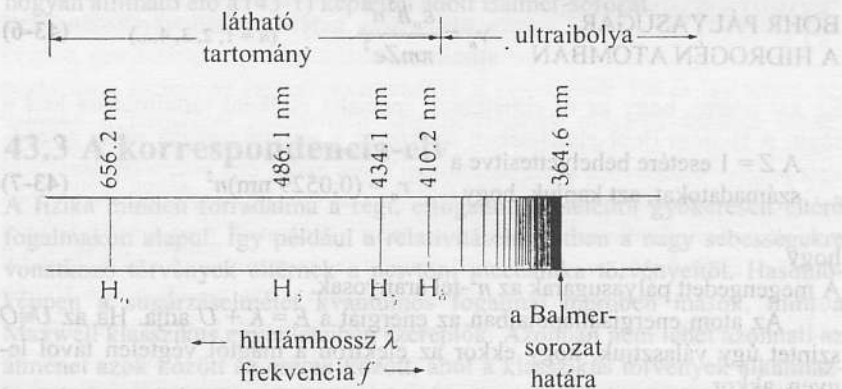
Az azonban, hogy a H -atom hogyan hozza létre ezt a matematikai szempontból egyszerű sorozatot, továbbra is bosszantó rejtély maradt.

1913-ban Niels Bohr dán fizikus megalkotta híres atommodelljét. Bohr akkor fiatal (28 éves) volt és merész. Elmélete a klasszikus fizikának gyökeresen ellentmondó eszmékre épült, a modell alapján azonban szinte minden megfigyelt színeképvonal majdnem pontosan adódott. A modell az alábbi, úgynevezett **Bohr-féle pusztulátumokon** alapult:

- (1) Az elektron a proton körül körpályán mozog a klasszikus mechanika törvényei szerint. (A Coulomb-féle vonzóerő szolgáltatja a centripetális erőt)
- (2) A klasszikus elmélettel szemben az elektronok csak bizonyos *megengedett* r_n sugarú pályákon mozoghatnak, s ezeken nem sugároznak. Minthogy ezeken a pályákon az E_n energia állandó, az elektron ezeken a pályákon *stacionárius állapotban* van.
- (3) A megengedett pályák azok, amelyekben az elektron mrv impulzusnyomatéka a 2π -vel osztott Planck-állandó egész számú többszöröse.



(a) Prizmás spektrométer. A hidrogén töltött kisülési cső fénye prizmaára esik, ahol a különböző hullámhosszú fények szétválnak és egy fényképezőlemezén vonalas színeképet alkotnak.



(b) A Balmer-sorozat végtelen számú színeképvonalból áll. A vonalak a 364,6 nm hullámhosszúgnál torlódnak.

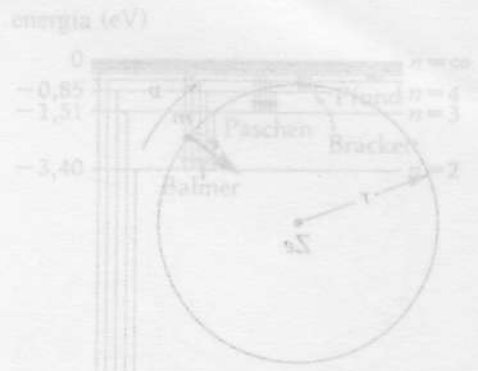
$$mvr = n\hbar \quad (\text{ahol } n = 1, 2, 3, 4, \dots \text{ és } \hbar = 1,0546 \times 10^{-34} \text{ Js}) \quad (43-2)$$

(4) A stacionárius állapotok közti átmenetek úgy mennek végbe, hogy az elektron „valahogyan” átugrik az egyik állapotból a másikba. Ekkor az atom elektromágneses hullámokat bocsát ki vagy nyel el. A két energiaállapot energiája közti különbség egyenlő a kibocsátott (elnyelt) sugárzás energiakvantumával:

$$hf = E_{\text{végső}} - E_{\text{kezdeti}} \quad (43-3)$$

Bohr hipotézise a klasszikus fizika és a kvantumfizika sajátosságos keveréke. A klasszikus Coulomb-erőnek megfelelően, az elektron a klasszikus mechanika szerint mozog. A klasszikus fizikával ellentétben azonban nem sugároz. A Planck-állandó kétféleképpen is színre lép, egyfelől a hf kifejezésben, ami a kisugárzott energiával kapcsolatos, másfelől az impulzusnyomaték teljesen újszerű kvantálása során, egy olyan fizikai mennyiség esetén, amit mindeztideig nem kvantáltak.

³ Az egyszerűség kedvéért $\hbar/2\pi$ helyett a \hbar jelet írjuk, amit há vonásnak olvasunk ki.



43-8 ábra

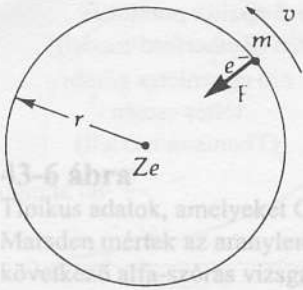
Az egyelektronos atom Bohr-modellje. A $(-e)$ töltésű elektron pályája az $(+e)$ töltésű mag körül körpályán mozog. A Coulomb-erő szögimpulzus az elektron töltés háró centripetális erő. A töltésű mag tömegét M és a töltésű elektron tömegét m jelöljük. A mag tömegét M és a töltésű elektron tömegét m jelöljük. A mag tömegét M és a töltésű elektron tömegét m jelöljük. A mag tömegét M és a töltésű elektron tömegét m jelöljük.

43-7 ábra

A hidrogén emissziós színeképeének Balmer-sorozata

43-9 ábra

Niels Bohr (1882–1962) dán fizikus 1923-ban kapott Nobel-díjat a hidrogénatom modelljének kidolgozásáért. A fűvel Ágost Bohr fizikusi doktoriát kapott (aki 1923-ban születt), és követte apját a koppenhágai Niels Bohr intézetben. Niels Bohr később a fizika vezető kutatója lett a Kopenhági Egyetem fizikai intézetében. Niels Bohr később a fizika vezető kutatója lett a Kopenhági Egyetem fizikai intézetében. Niels Bohr később a fizika vezető kutatója lett a Kopenhági Egyetem fizikai intézetében.



43-8 ábra

Az egyelektronos atom Bohr modellje. A $(-e)$ töltésű elektron nyugvó Ze töltésű mag körül körpályán mozog. Az F Coulomb-erő szolgáltatja az elektronnra ható centripetális erőt.

A megengedett sugarú és energiájú állapotok meghatározása a következőképpen történik. Ha Newton II. törvényét a Ze töltésű, körmozgást végző e töltésű, m tömegű, elektronnra alkalmazzuk, akkor⁴

$$\sum F = ma$$

$$\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{(Ze)(e)}{r^2} = m \left(\frac{v^2}{r} \right) \quad (43-4)$$

Az impulzusnyomatékra vonatkozó kvantumfeltétel szerint:

$$mvr_n = n\hbar \quad (43-5)$$

Ezeket az egyenleteket kombinálva kiküszöbölhető a v és adódik a megengedett pálya r_n sugara:

BOHR PÁLYASUGÁR
A HIDROGÉN ATOMBAN

$$r_n = \frac{\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{\pi m Z e^2} \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots) \quad (43-6)$$

A $Z = 1$ esetre behelyettesítve a számadatokat, azt kapjuk, hogy $r_n = (0,0529 \text{ nm})n^2$ (43-7)

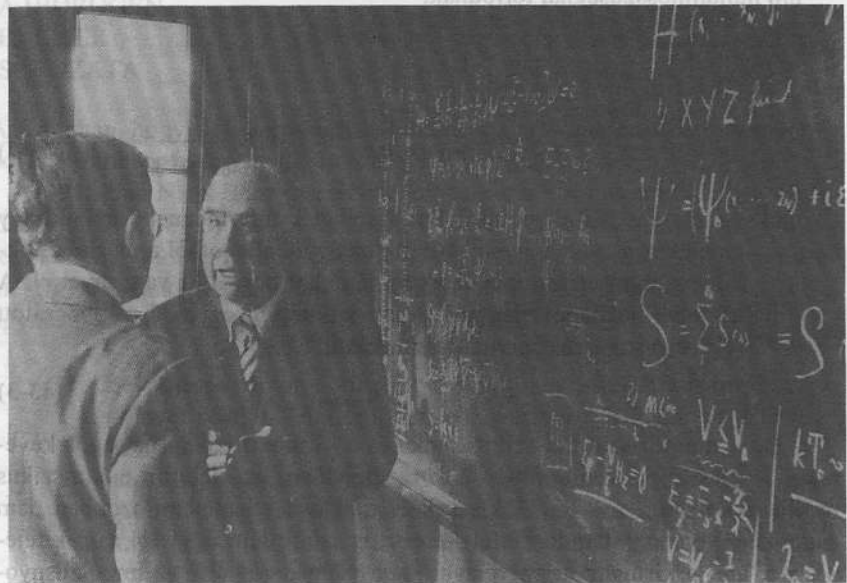
hogy

A megengedett pályasugarak az n^2 -tel arányosak.

Az atom energiaállapotaiban az energiát a $E = K + U$ adja. Ha az $U \equiv 0$ szintet úgy választjuk, hogy ekkor az elektron a magtól végtelen távol legyen, akkor

43-9 ábra

Niels Bohr (1885–1962) dán fizikus 1922-ben kapott Nobel-díjat a hidrogénatom modelljének kidolgozásáért. Itt fiával Aage Bohr fizikussal beszélget (aki 1922-ben született), és követte apját a koppenhágai Niels Bohr intézet igazgatói székében. Niels Bohr később is értékes eredményekkel járult hozzá az atommag cseppmodelljéhez és a maghasadás elméletéhez. Fia is Nobel-díjas, a kitüntetést 1975-ben Ben Mottelssohnnal és James Rainwaterrel megosztva az atommag szerkezetére vonatkozó vizsgálataíért kapta (A fényképet a Niels Bohr Intézet Margareth Bohr Gyűjteménye bocsátotta rendelkezésünkre.)



⁴ Ha a mag töltése Ze (ahol Z az atom rendszáma), akkor az elemzés alkalmazható az egyszer ionizált héliumra, a kétszer ionizált lítiumra és így tovább. A kapott eredmények ezekben az esetekben igen jól egyeznek a megfigyelt színképekkel.

Ezért

$$U = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{(Ze)(e)}{r} \quad (43-8)$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{(Ze)(e)}{r} \quad (43-9)$$

A HIDROGÉN-ATOM BOHR FÉLE ENERGIA ÁLLAPOTAI

A számértékeket behelyettesítve $Z = 1$ esetre, adódik:

$$E_n = -\frac{13,6\text{ eV}}{n^2} \quad (43-10)$$

A hidrogén megengedett energiaállapotai negatívak és $1/n^2$ -tel arányosak (lásd a 43-10 ábrát). Az egyes színeképvonalsorozatokat a közös végállapot jellemzi. A 43C-35 probléma mutatja meg, hogy ebből a kifejezésből hogyan állítható elő a (43-1) képlettel adott Balmer-sorozat.

43.3 A korrespondencia-elv

A fizika minden forradalma a régi, elfogadott elmélettől gyökeresen eltérő fogalmakon alapul. Így például a relativitáselméletben a nagy sebességekre vonatkozó törvények eltérnek a newtoni mechanika törvényeitől. Hasonlóképpen a sugárzáselmélet kvantumos fogalmai merőben mások, mint a Maxwell klasszikus egyenleteiben szereplők. Azonban nem lehet azonnali az átmenet azok között az esetek között, ahol a klasszikus törvények alkalmazhatóak és azok között, ahol az újabb fogalmakat kell használni. Kell, hogy legyen átmeneti tartomány, ahol az egyik elmélet kijelentései „fedik” a másikat.

A kvantumfizikában a klasszikus és az új elmélet közti kapcsolatot Bohr fogalmazta meg a *korrespondencia-elvnek* nevezett megállapításában. A klasszikus elektrodinamika szerint a körpályán mozgó elektron által kibocsátott sugárzás f_0 frekvenciája éppen a keringés frekvenciája. A (43-5) és (43-6) összefüggésekből erre a frekvenciára ($Z = 1$) a

$$f_0 = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^3 n^3} \quad (43-11)$$

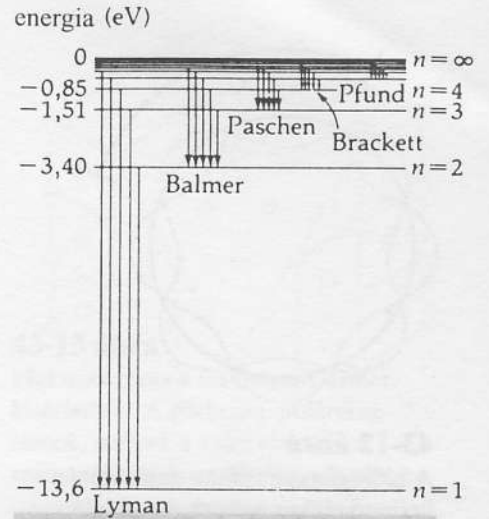
formula adódik. A Bohr-elméletben a szomszédos energiaállapotok közti átmenet során kibocsátott sugárzás f frekvenciája a két keringési frekvencia közé esik, ahogy a (43-3) képletből adódik:

$$hf = E_{\text{végző}} - E_{\text{kezdeti}}$$

A (43-9)-ből viszont

$$hf = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] \quad (43-12)$$

A zárójelben lévő kifejezést átalakítva:

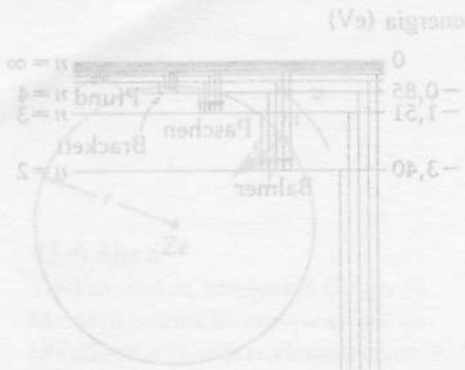


43-10 ábra

A hidrogén atom energiaállapotai. Az $n = 4$ és $n = \infty$ szintek között végtelen sok energiaszint van. A magasabb energiaszintekről az alacsonyabbakra való átmenet során hf nagyságú energia kibocsátására kerül sor. A sorozatok mellett azoknak a kísérletezőknek a nevét tüntettük fel, akik a különböző sorozatokat vizsgálták. A Balmer-sorozatnak csak egy része esik a látható spektrumba.

43-11 ábra

Louis Victor de Broglie régi francia fizikusok között volt a legjelentősebb. Középkori történelmet tanult a Sorbonne-on, majd a görög katolikus iskolákban tanult. Később azonosították a fizika felé fordult és 1913-ban fizikus oklevelet szerzett. De Broglie szokatlan javaslatát, hogy egy mozgó részecskével hullám lehet kapcsolatban, Erwin Schrödinger fejlesztette hullámmechanikaként ismert kvantummechanikát elismerté. De Broglie, aki nagyon zavart a kvantummechanika valószínűségi természetéről, nagy (és sikertelen) erőfeszítéseket tett arra, hogy a valószínűségi helyett kauzális értelmezést dolgozzon ki a hullámmechanikára. 1929-ben a fizikai Nobel-díjjal tüntették ki. De Broglie elgondolásainak kialakulását ösztönözte H. Medicus tanulmányai „Fifty Years of Matter Waves” (Az anyaghullámok ötven éve) Physics Today (1947) február.



43-8 ábra



43-11 ábra

Louis Victor de Broglie régi francia arisztokrata család tagja. Eredetileg középkori történelmet tanult a Sorbonne-on, hogy majd a gótikus katedrálisokkal foglalkozzék. Később azonban érdeklődése a fizika felé fordult és 1913-ban fizikus oklevelet szerzett. De Broglie szokatlan javaslatát, hogy egy mozgó részecskével hullám lehet kapcsolatban, Erwin Schrödinger fejlesztette *hullámmechanikaként* ismert kvantummechanikai elméletté. De Broglie, akit nagyon zavart a kvantummechanika valószínűségi természete, nagy (és sikertelen) erőfeszítéseket tett arra, hogy a valószínűségi helyett kauzális értelmezést dolgozzon ki a hullámmechanikára. 1929-ben a fizikai Nobel-díjjal tüntették ki. De Broglie elgondolásainak kialakulását összefoglalja H. Medicus tanulmánya „Fifty Years of Matter Waves” (Az anyaghullámok ötven éve) *Physics Today* (1947) február.

$$\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] = \left[\frac{n^2 + 2n + 1 - n^2}{n^2(n+1)^2} \right]$$

Ha n igen nagyá válik, határátmenetben

$$\lim_{n \gg 1} \left[\frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \right] = \frac{2}{n^3} \quad (43-13)$$

adódik. Így nagy n esetén a kisugárzott frekvencia:

$$f \approx \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^3 n^3} \quad (43-14)$$

Ha ezt a képletet a (43-11)-gyel összehasonlítjuk, látjuk, hogy *nagy n esetén a kvantumelméleti kifejezés megegyezik a klasszikussal. Ez jól illusztrálja Bohr korrespondencia-elvét.*

A BOHR-FÉLE KORRESPONDENCIA ELV

minden új elméletnek arra a klasszikus elméletre kell redukálódnia, amely megfelel a klasszikus helyzetre illő körülményekre alkalmazva.

Ez azt jelenti, hogy az új elméletnek speciális esetként tartalmaznia kell a régit. A H-atom Bohr-elméletében amikor az n nagyon nagyá válik, a rendszer *makro*-rendszerhez kezd hasonlítani (nem pedig egy *mikro*-rendszerhez) és a fent mondottak értelmében a klasszikus törvények megfelelő leírást fognak adni. Természetesen az elektronok nem változtatják meg viselkedésüket nagy n értékeknél, az elektronok *mindig* a kvantummechanikát követik (miként az Univerzum minden más objektuma). De mondjuk $n = 10\,000$ esetére a pályasugár, az energia, az impulzusnyomaték kvantummechanikai eltérése az $n = 10\,001$ -nek megfelelő esetétől lényegében elhanyagolhatóan kicsi és a rendszer viselkedése közelítőleg leírható a klasszikus törvényekkel. Egy másik példaként emlékeztetünk arra, hogy kis sebességek esetére Einstein speciális relativitáselmélete a newtoni mechanikára redukálódik – s így a speciális relativitáselmélet is illusztrálja Bohr korrespondencia-elvét. Ez az elv értékes ellenőrzési lehetőséget teremt az új elméleti fejlemények érvényességének megítélésére.

43.4 A de Broglie-hullámok

Bohr H -atom modellje nagy diadal volt. Nagyon pontosan követte a Balmer-sorozat hullámhosszait és helyesen adott számot más sorozatoknak a látható tartományon kívüli spektrumáról is. Mégis voltak kicsi és félreismerhetetlen eltérések. Ezek egy része abból a tényből fakadt, hogy az energiákat mozdatlan atommag feltételezésével számították ki (vagy, ami ezzel egyenértékű, feltették, hogy a mag végtelenszer nagyobb tömegű, mint az elektron). A kísérleti adatokkal való egyezés megjavult, amikor figyelembe vették azt, hogy a proton is mozog a forgó proton-elektron-rendszer tömegközéppontja körül. További finomítást hajtott végre A. Sommerfeld, aki az elektron körpályái mellett ellipszispályákat is figyelembe vett, valamint az elektron mozgásában számításba vette a relativisztikus hatásokat is.

De bizonyos tekintetben még az így tökéletesített elmélet sem bizonyult teljesen kielégítőnek. Mi lehet az oka az impulzusnyomatékre vonatkozó különös kvantum-megkötésnek? Ebből a következne például, hogy egy pörgettyű tetszőleges szögsebesség helyett csak meghatározott ω szögsebesség-

gel mozoghatna. Ahogyan a kísérletek folytatódtak, egyre több rejtély került elő. Néhány színeképvonalról kiderült, hogy több színeképvonal egybeeső együttese, mert amikor az atomot elektromos vagy mágneses erőter hatásának tesszük ki, a vonalak két vagy több szomszédos vonallá hasadnak fel. A diszprózium egyik színeképvonala például 137 különböző, egymáshoz közel eső vonallá hasadt fel!

Más kérdések is zavarbaejtőek voltak. Miért nem sugároz a körmozgást végző elektron, ahogyan a klasszikus elektrodinamika törvényei előírják – a törvények egyébként ugyanazok, amelyek a mozgáshoz szükséges, centrális erőt adják? Hogyan jönnek létre az atomi energiaátmenetek? Miért vallott kudarcot a Bohr-elmélet, amikor az egynél több elektront tartalmazó atomok színeképvonalát próbálták meg kiszámítani? Mindezeket a problémákat leküzdötte az az új kvantumelmélet, ami a következő évtizedben született meg. Most ennek fejlődését követjük lépésről-lépésre, a történet tetőpontját a következő fejezetben érjük el, amelyben az atomszerkezet kvantummechanikai leírását ismertetjük.

A döntő lépést az említett „misztikus” problémák megoldása irányában a Párizsi Egyetem fizikus doktorandusza, Louis Victor de Broglie (herceg) (1892–1987) tette meg. Míg a doktori vizsgájára készült, de Broglie azon kezdett gondolkodni, hogy talán a hullám-részecske kettősség nemcsak a sugárzásra, hanem az anyagi részecskékre is vonatkozik. Ha ez így lenne, az valóban a természet magasfokú szimmetriájának megnyilvánulása lenne. Ekkor tehát a részecskék hullámtulajdonságot, a hullámok részecsketulajdonságot mutatnának. Doktori értekezésében (1924) de Broglie felvetette a következő (itt kissé leegyszerűsített) gondolatokat. Minthogy az elektromágneses sugárzás fotonjai

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (43-15)$$

impulzussal rendelkeznek, de Broglie feltette, hogy minden mv impulzusú részecskéhez hozzárendelhető egy hullám, melynek λ hullámhosszát a

$$mv = \frac{h}{\lambda} \quad (43-16)$$

formula adja meg.

A p impulzusú részecske
DE BROGLIE FÉLE
HULLÁMHOSSZA

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (43-17)$$

Ahogyan az elektromágneses hullámok esetében, úgy itt is felmerülhet a kérdés, hogy mi az, ami hullámszik, de ez hosszú magyarázatot kívánna. Az azonban bizonyos, hogy *nem* elektromágneses hullámról van szó. De Broglie ezeket a hullámokat *anyag-hullámoknak*, *fázis-hullámoknak* nevezte, mert szilárdan hitt abban, hogy ahogyan a fényhullámok között, úgy itt is fellép majd interferencia a különböző fázisú hullámok között.

43-1 PÉLDA

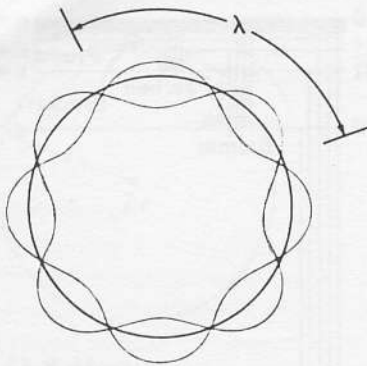
Az 1 g tömegű részecske 1 mm/s sebességgel mozog. Számítsuk ki a részecskéhez rendelt de Broglie-hullám hullámhosszát!

MEGOLDÁS

A részecskéhez rendelt de Broglie-hullám hullámhossza:



43-13 ábra
Elektron-sugárzás a szilárdtestben. A körbe az elektronok körmozgását mutatja. A körök az elektronok által kibocsátott hullámok. A hullámok interferenciája miatt csak bizonyos irányokban lehet megfigyelni a sugárzást. A körök közötti távolság λ . Ez a távolság a hullámhossz. A körök közötti távolság λ . Ez a távolság a hullámhossz.



43-12 ábra

A hidrogénatom Bohr-modelljében keringő elektronoknak megfelelő de Broglie hullámok állóhullámok. A csomópontok közti távolság $\lambda/2$. Ez a rajz az $n = 4$ energiaállapotra vonatkozik.

43-11 ábra

Louis Victor de Broglie régi francia arisztokrata család tagja. Eredetileg középiskolai történelmet tanult a Sorbonne-on, hogy majd a görögös katedrálisokkal foglalkozzék. Később azonban érdeklődése a fizika felé fordult és 1913-ban fizikus oklevelet szerzett. De Broglie ezáltal javasolta, hogy egy mozgó részecskével hullám lehet kapcsolatban. Erwin Schrödinger fejlesztette *hullámmechanikaként* ismert kvantummechanikai elméleté. De Broglie, akü nagyon zavart a kvantummechanika valószínűségi természetét, nagy (és sikertelen) erőfeszítéseket tett arra, hogy a valószínűségi helyett kauzális értelmezést dolgozzon ki a hullámmechanikára. 1929-ben a fizikai Nobel-díjjal tüntették ki. De Broglie elgondolásainak kialakulását összefoglalja H. Medicus tanulmánya „Fifty Years of Matter Waves” (Az anyaghullámok ötven éve) *Physics Today* (1947) február.

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}}{(0,001 \text{ kg})(0,001 \text{ m/s})} = 6,63 \times 10^{-28} \text{ m}$$

Ez megmérhetetlenül kicsiny hullámhossz, mert még a proton mérete is 10^{13} -szor nagyobb nála. Valóban a de Broglie-hullámoknak kevés következménye lesz a makroszkópikus részecskékre. Ugyanakkor mikroszkópikus részecskék, mint az elektronok, neutronok, atomok esetén a de Broglie hullámokkal kapcsolatos interferencia-effektusok teljesen természetesebb és meglepő hatásokhoz vezetnek.

De Broglie-kimutatta, hogy ha feltesszük, hogy az elektronoknak is megfeleltethetünk anyaghullámokat, akkor az impulzusnyomatékra vonatkozó és annak idején oly megdöbbentő Bohr-féle kvantumfeltételre ésszerű magyarázat adódik. De Broglie szerint a magyarázat egyszerűen az elektron állóhullám alakzata. Eszerint stacionárius állapotban a körpálya kerületén csak a hullámhossz egész számú többszöröse férhet el, amint azt a 43-12 ábra is mutatja: $n\lambda = 2\pi r$. Ha a hullámhossz de Broglie-féle képletét ($\lambda = h/mv$) behelyettesítjük és végrehajtjuk az átrendezéseket, adódik, hogy

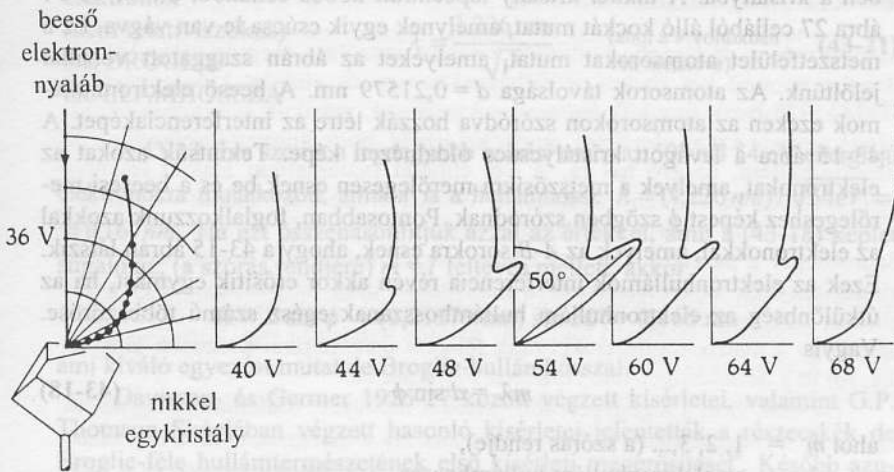
$$mvr = n \left(\frac{h}{2\pi} \right)$$

Ez viszont épp a Bohr-féle pálya-feltétel. Így a Bohr-féle *önkéntes* feltevés – aminek az indokolása eredetileg csak annyi volt, hogy ez vezet a helyes eredményre – most kézenfekvő magyarázatot kap azáltal, hogy feltételezzük, hogy az elektron csak úgy mozoghat, hogy az atom stacionárius állapotában állóhullám-alakzatot alakít ki. Figyeljük meg, hogy itt egyetlen elektronhoz rendelt de Broglie-hullám különböző részeinek interferenciájáról van szó. (Ez hasonlít ahhoz, hogy a fényinterferencia esetén egyetlen *foton* elektromos mező hullámának különböző részei közötti interferencia a lényeges, nem pedig két különböző foton hullámainak szuperpozíciója.)

A de Broglie-féle feltevést nem azonnal fogadták el. Amíg csak érdekes elméleti fizikai eszmefuttatásnak tekintették, nem volt más, mint egy, a különös feltevések között, melyekről kiderülhet az, hogy érvényes, de az is, hogy nem. A szóbeli doktori vizsgán de Broglie-tól megkérdezték, hogyan lehet a hullámokat kimutatni. Azt válaszolta, hogy talán egy kristályra eső elektronnyaláb már mutatna interferencia-effektusokat, hiszen a kristályrácsban az atomok esetleg az elektronhullám hullámhosszána nagyságrendjébe eső közelségben lehetnek, ami az interferencia bekövetkezésének szükséges feltétele. A de Broglie-hullámok kimutatására vonatkozó első próbálkozások nem jártak sikerrel a kísérleti nehézségek miatt. De három évvel az értekezés megvédése után az Egyesült Államokban az anyaghullámok létezés drámai megerősítést nyert.

43.5 A Davisson-Germer-kísérlet

A de Broglie-hullámok kimutatására szolgáló kísérletek már 1921-ben elkezdődték, amikor egy amerikai fizikus, Clinton Davisson, az elektronok fémfelületekről történő visszaverődését tanulmányozta a Western Electric



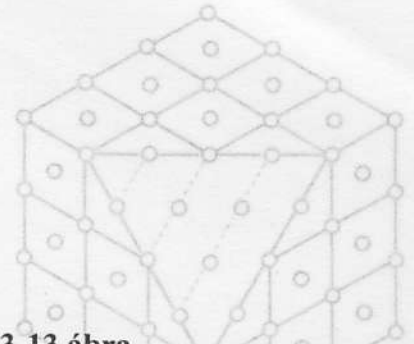
43-13 ábra

Elektron-szórás a Davisson-Germer kísérletben. A görbe un. polárdiagramok, melyek a szórt elektronok számát mutatják a szög függvényében.

Company (most Bell Telephone Laboratory) laboratóriumában⁵. A kapott eredmények egy része érthetetlen volt. Ahelyett, hogy az elektronok tetszőleges szögben egyenletesen szóródtak volna, egyes irányokba több, másokba kevesebb elektron szóródott. Davisson nyilvánosságra hozta eredményeit, de nem tudott elfogadható magyarázatot adni a szokatlan szórásra. A kísérleteket asszisztensével Lester Germerrel folytatta tovább.

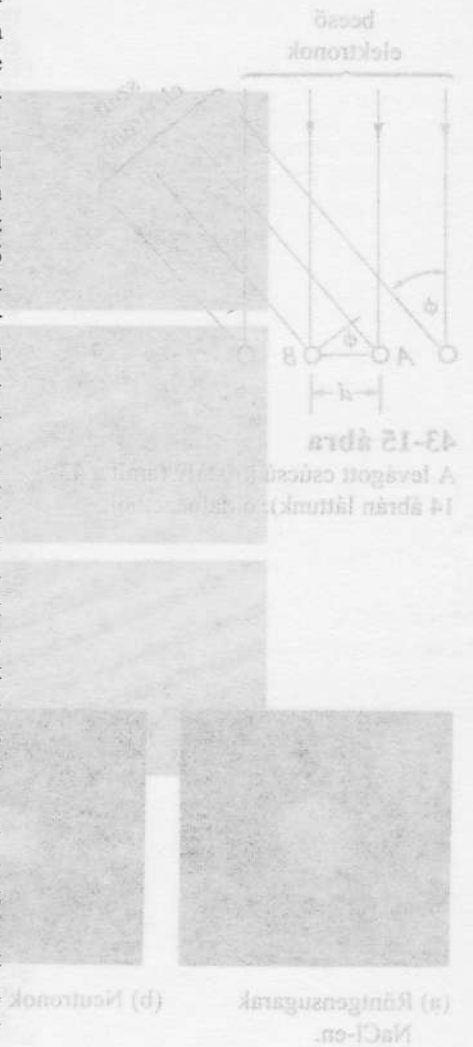
1925-ben Davisson elektron-szórás-kísérleteiben tiszta polikristályos Ni fémet használt céltárgyként. A minta véletlenszerű irányítottágú számtalan kicsiny kristályszemcséből állt. Egy véletlen robbanás szétvetette azt az üvegbúrát, ami a berendezést légüres térben tartotta. A levegővel érintkező nikkelfelülete oxidálódott és így a minta alkalmatlanná vált a további kísérletek céljaira. Hogy ezt az oxidréteget eltávolítsák, Davisson és Germer újjáépítette a vákuumkamrát és felfűtötte a céltárgyat. Véletlenül azonban annyira túlfűtötték, hogy a nikkelfelület megolvadt és újrakristályosodott. Pontosan oda, ahová az elektronnyaláb becsapódott, néhány nagyobb kristályszemcske került. Az újrakezdett kísérletek eredményei bizonyos elektronsebességeknél eltéveszthetetlen csúcsokat mutattak a szórás eloszlásban. A megfigyelt különbségeket arra a tényre lehetett visszavezetni, hogy most a céltárgy néhány nagyobb kristályból és nem polikristályos anyagból állt. Davisson és Germer nem ismerve de Broglie elgondolását, helytelen javaslattal álltak elő a speciális szórás mintázat eredetét illetően. Azt hitték ugyanis, hogy a kristálysíkok valahogyan „vezették” az elektronokat bizonyos irányokban. 1927-ben, miután Davisson az Oxfordi Egyetemen részt vett egy fizikus találkozáson, rájött, hogy a szokatlan szórásért az *anyag-hullámok* lehetnek felelősek. Az adatokat kiértékelte de Broglie elméletével és kitűnő egyezést tapasztalt. A 43-13 ábra nagy egykristályon végzett szórás-kísérletek eredményét mutatja.

Az elektronok a fémkristály felületéről kitüntetett irányokban szóródnak. Az elektronok hullámtermészetük miatt a felületen elhelyezkedő szabályosan elrendezett atomokkal kölcsönhatva a diffrakciós rácsra eső fényhez hasonlóan interferencia-effektusokat hoznak létre. Vizsgáljuk meg a 43-13 ábrán látható kristályt kissé részletesebben. A 43-14 ábrán a kristály nagyított képe látható a felületén elhelyezkedő atomok elrendeződésével. Azzal nem kell foglalkoznunk, hogy a kristály belsejében milyen az atomok elrendeződése, mert a kis energiájú elektronok nem hatolnak be jelentős mélység-

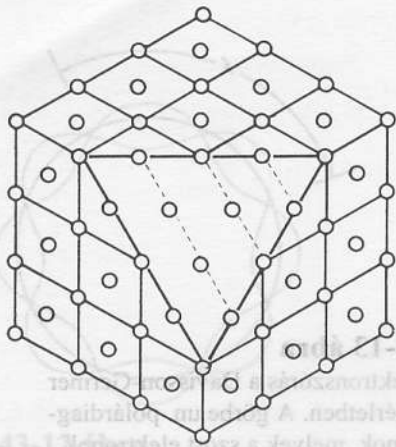


43-13 ábra
Elektron-szórás a Davisson-Germer kísérletben. A görbe un. polárdiagramok, melyek a szórt elektronok számát mutatják a szög függvényében.

Az atomok felületi elhelyezkedésével.

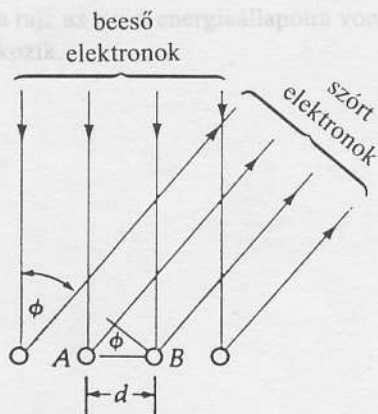


⁵ A General Electric Company szabadalmi pert indított a Western Electric ellen egy elektroncső tervével kapcsolatban. Az elektronok szórására vonatkozó kísérleteket azért kezdték el, hogy a pert számára kísérleti bizonyítékokat szerezzenek. A pert a Western Electric nyerte meg.



43-14 ábra

Levágott csúcsú Ni-egykristály képe az atomok felületi elhelyezkedésével.



43-15 ábra

A levágott csúcsú kristály (amit a 43-14 ábrán láttunk), oldalnézetből.

ben a kristályba. A nikkal kristály lapcentrált köbös cellából áll. A 43-14 ábra 27 cellából álló kockát mutat, amelynek egyik csúcsa le van vágva. Ez a metszefelület atomsorokat mutat, amelyeket az ábrán szaggatott vonallal jelöltünk. Az atomsorok távolsága $d = 0,21579$ nm. A beeső elektronhullámok ezeken az atomsorokon szóródva hozzák létre az interferenciaképet. A 43-15 ábra a levágott kristálycsúcs oldalnézeti képe. Tekintsük azokat az elektronokat, amelyek a metszősíkra merőlegesen esnek be és a beesési merőlegeshez képest ϕ szögben szóródnak. Pontosabban, foglalkozunk azokkal az elektronokkal, amelyek az A-B sorokra esnek, ahogy a 43-15 ábrán látszik. Ezek az elektronhullámok interferencia révén akkor erősítik egymást, ha az útkülönbség az elektronhullám hullámhosszának egész számú többszöröse. Vagyis

$$m\lambda = d \sin \phi \tag{43-18}$$

- ahol $m = 1, 2, 3, \dots$ (a szórás rendje),
- $\lambda =$ az elektronhullám hullámhossza,
- $d =$ az atomsorok közti távolság,
- $\phi =$ a szórt elektronnyaláb és a felület normálisa közti szög.

Az elektronok energiája és a hozzájuk rendelt de Broglie-hullám hullámhossza közti kapcsolatot meghatározhatjuk, ha tekintetbe vesszük, hogy a 100 V-nál kisebb V feszültséggel gyorsított elektronok energiája még nem relativisztikus:

$$eV = \frac{1}{2}mv^2$$

Ebből a v -t kifejezve:

$$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}}$$

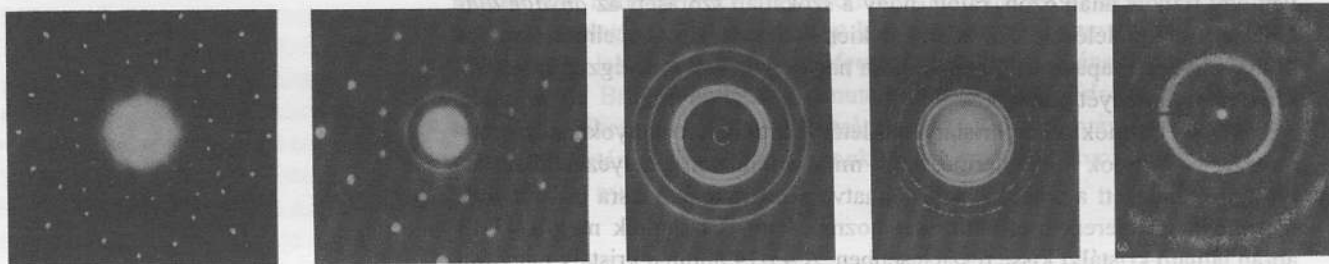
A $p = mv$ impulzus tehát

$$p = m\sqrt{\frac{2eV}{m}} = \sqrt{2meV} \tag{43-19}$$

és a $\lambda = h/p$ de Broglie-hullámhossz

$$\lambda = \left(\frac{h}{\sqrt{2me}} \right) \frac{1}{\sqrt{V}} \tag{43-20}$$

A számértékek behelyettesítésével jól használható összefüggés adódik:



(a) Röntgensugarak NaCl-en. (b) Neutronok NaCl-en. (c) 0,070 nm hullámhosszúságú röntgensugár. (d) 600 eV energiájú elektronok. (e) 0,057 eV energiájú neutronok.

43-16 ábra

Elektromágneses hullámokkal, illetve részecskékkel létrehozott elhajlás (a) és (b) A Laue-folt-mintázat a fotonok, ill. neutronok hullámtermészetét demonstrálja. (c), (d) és (e). polikristályos fémmintákon létrejövő szórás diffrakciós gyűrűi.

elektronok

(nem relativisztikus)

DE BROGLIE

HULLÁMHOSSZA

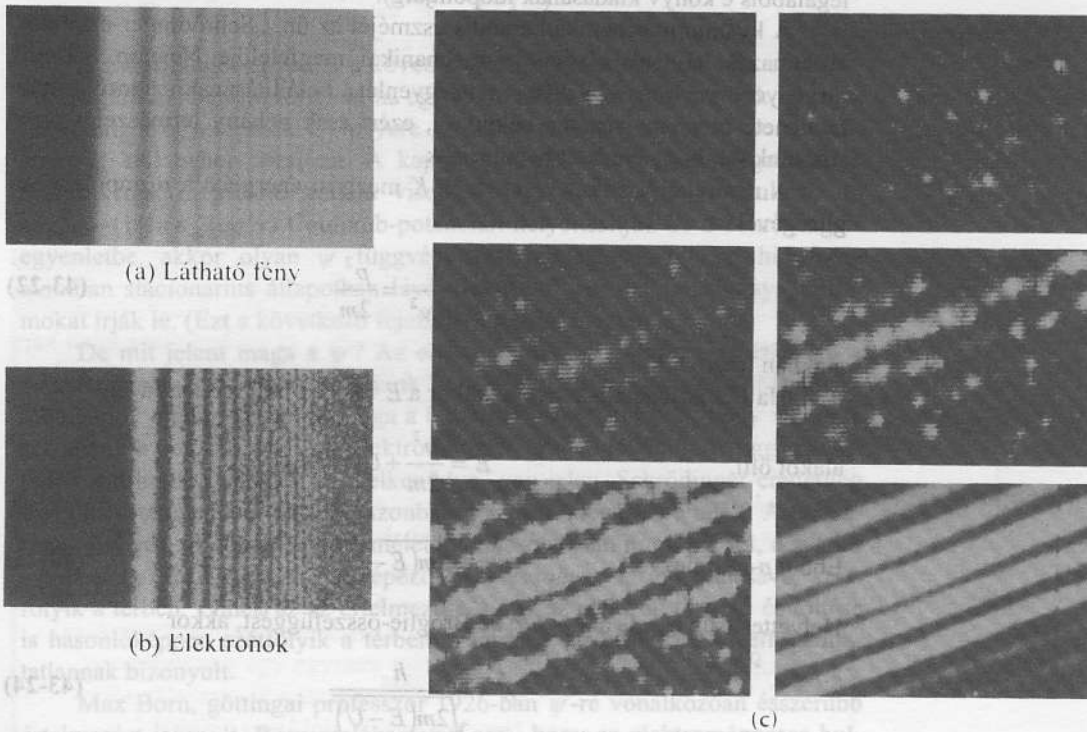
$$\lambda = \frac{1,226 \text{ nm}}{\sqrt{V}} \quad (\text{ahol a } V \text{ voltokban van megadva}) \quad (43-21)$$

A 43-13 ábra szerint a legnagyobb szórási csúcs az 50° -nál 54 eV energiájú elektronokra mutatkozott, amikor is a hullámhossz $\lambda = (1,226 \text{ nm}) / \sqrt{54 \text{ eV}} = 0,167 \text{ nm}$. Ha ezt összehasonlítjuk azzal az értékkel, amit a (43-18) képlet sugalmaz, (a szórás rendjére) $m = 1$ feltevés mellett, akkor

$$\lambda = d \sin \phi = (0,21579 \text{ nm}) \sin 50^\circ = 0,165 \text{ nm}$$

ami kiváló egyezést mutat de Broglie-hullámhosszal.

Davisson- és Germer 1925-27 között végzett kísérletei, valamint G.P. Thomson Skóciában végzett hasonló kísérletei jelentették a részecskék de Broglie-féle hullámtermészetének első kísérleti megerősítését⁹. Később azután lényegében az összes olyan interferencia- és elhajlási kísérletet elvégezték a részecskékkel, amiket az elektromágneses hullámoknál megismertünk. (Lásd a 43-16 és 43-17 ábrákat.)



(a) Látható fény

(b) Elektronok

(c)

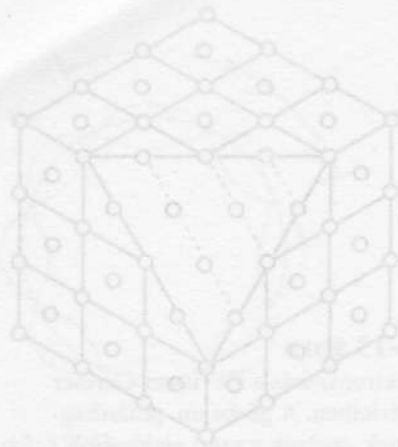
43-17 ábra

Csíkrendszerek, amiket (a) látható fény, (b) elektronhullám elhajlása hoz létre egy él mellett. A (b) csíkokat elektronmikroszkópban, a (c)

sok független esemény eredőjeként regisztrálható elektroninterferencia.

Ha nő az események száma, a mintázat egyre kifejezettebbé válik

⁹ Davisson és Thomson 1937-ben az elektron hullámtermészetének kimutatásáért megosztva kapták a Nobel-díjat. 31 évvel korábban Thomson édesapja, J. J. Thomson a Nobel-díjat a gázok elektromos vezetőségének tanulmányozása során elért eredményeiért kapta, melyekben az elektron részecsketulajdonságainak volt döntő szerepük.



43-14 ábra

Leválogott csúcsú Ni-egy kristály képe az atomok felületi elhelyezkedésével.

beeső elektronok



43-15 ábra

A levágott csúcsú 14 ábrán láttunk)

43.6 A hullámmechanika

Mielőtt még a de Broglie-hullámok kísérleti igazolása megtörtént volna, de Broglie eszméit két fizikus is felhasználta egy új elmélet kidolgozásához (1924–1925-ben). Egyikük *hullámmechanikának*, másikat *kvantummechanikának* nevezte azt az elméletet, amely azt írta le, hogy hogyan viselkedik a de Broglie-hullám, ha erő hat rá. A két elmélet matematikai alakját tekintve meglehetősen különbözött egymástól. Werner Heisenberg német fizikus bonyolultnak tűnő mátrix-módszereket alkalmazott, míg az osztrák Erwin Schrödinger a parciális differenciál-egyenletek módszerével dolgozott.⁷ Röviddel ezeknek az elméleteknek a közreadása után felfedezték, hogy a két elmélet tökéletesen egyenértékű,* kölcsönösen levezethetők egymásból. Minthogy a mátrix-módszereket csak felsőbb matematikai kurzusok tárgyalják, mi itt a Schrödinger-féle elméletet mutatjuk be.

Ha csak nem a legegyszerűbb eseteket tekintjük, matematikailag ezt az elméletet is meglehetősen nehéz alkalmazni. Az elméletnek talán a leginkább problematikus pontja az, hogy hétköznapi tapasztalatainktól eltérő és a mindennapi gondolkodás számára idegen fogalmakkal dolgozik. Mégis az a helyzet, hogy ez bizonyult a mikrofizikai világ helyes leírásának. Az elmélet relativisztikus általánosításából, a kvantumelektrodinamikából következő eredményei és a tapasztalat között semmilyen eltérés sincs. (Pontosabban: legalábbis e könyv kiadásának időpontjáig).

A kvantummechanika centrális eszméjét az ún. „Schrödinger-egyenlet” tartalmazza. (Ennek klasszikus mechanikai megfelelője Newton második törvénye, a $m d^2x/dt^2 = F$ differenciálegyenlet.) Felállításának szigorú gondolatmenete messzire vezetne célunktól, ezért csak néhány természetes érvet sorolunk fel, hogy eredetét bemutassuk.

A nemrelativisztikus részecskék K mozgási energiája a p impulzus segítségével az

$$K = \frac{1}{2mv^2} = \frac{p^2}{2m} \quad (43-22)$$

alakban írható fel.

Ha U a potenciális energia, akkor a $E = K + U$ teljes energia az

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

alakot ölti.

$$\text{Ebből } p\text{-t kifejezve: } p = \sqrt{2m(E - U)} \quad (43-23)$$

Helyettesítsük be ide a $\lambda = h/p$ de Broglie-összefüggést, akkor

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - U)}} \quad (43-24)$$

adódik.

Mint a 18. fejezetben levezettük, a klasszikus hullámegyenletnek

$$y = A \sin(kx - \omega t) \quad (\text{ahol } k = 2\pi/\lambda \text{ és } \omega = 2\pi/T)$$

a $+x$ irányban haladó hullám megoldása ((18-26) formula).

Az argumentumbeli kx tag az y térbeli változását, míg a ωt tag az időbeli változást írja le, aminek következtében az y amplitúdója az ω körfrekven-

43-16 ábra

⁷ Heisenberg a Nobel-díjat 1932-ben kapta, míg Schrödinger és P. A. M. Dirac megosztva 1933-ban a kvantummechanika kiépítésében nyújtott teljesítményeikért.

* Ezen egyenértékűség legáltalánosabb bizonyításában a magyar származású Neumann Jánosnak volt meghatározó szerepe. (A magyar kiadás szerkesztőjének megjegyzése.)

(a) Röntgensugarak NaCl-en.

(b) Neutronok

ciával változik. A továbbiakban csak a térbeli változással foglalkozunk. Ha a hullámfüggvény x szerinti második parciális deriváltját képezzük, akkor az

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 y = 0 \quad (43-25)$$

egyenletet kapjuk, ahol
$$y = A \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) \quad (43-26)$$

Ez az egyenlet tetszőleges mechanikai hullám leírására alkalmas – legyen szó hanghullámról, egy kifeszített kötélen végigfutó rugalmas hullámról, stb.

Schrödinger a (3-24) egyenletből λ értékét behelyettesítette a (43-25) egyenletbe és megkapta a ma *időtől független Schrödinger-egyenletnek nevezett összefüggést*.

AZ IDŐTŐL FÜGGETLEN
SCHRÖDINGER EGYENLET (egy dimenzióban)

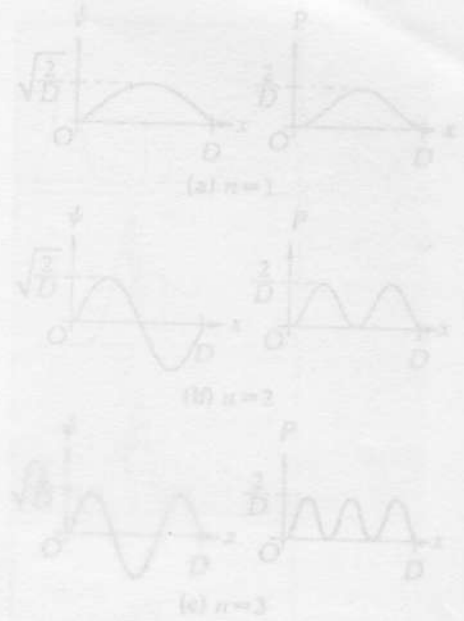
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left(\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\right) \psi = 0 \quad (43-27)$$

ahol
$$\psi = \psi_{\max} \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) \quad (43-28)$$

A Schrödinger-egyenlet a következőképpen alkalmazható. Ha azt akarjuk megtudni, hogy mi történik, ha egy részecskére erőt gyakorolunk, akkor a Schrödinger-egyenletben U helyére az adott erőnek megfelelő potenciális energiát kell behelyettesíteni. A kapott differenciál-egyenlet megoldásai a részecskének megfelelő hullám viselkedését írják le. Így például, ha az $U(r) = -(1/4\pi\epsilon_0)(qq'/r)$ Coulomb-potenciált helyettesítjük be a Schrödinger-egyenletbe, akkor olyan ψ függvényeket kapunk, amelyek a hidrogén-atomban stacionárius állapotban lévő elektronoknak megfelelő anyaghullámokat írják le. (Ezt a következő fejezetben fogjuk megtenni.)

De mit jelent maga a ψ ? Az előbb „anyaghullámnak” neveztük, de a pusztá elnevezéstől még nem látunk bele mélyebben a lényegébe. Minthogy a hullámok eredendő tulajdonsága a térbeli terjedés, felmerül, hogy vajon ez azt jelenti-e például, hogy az elektron a hidrogén-atomban a ψ függvénnyel jellemzett módon valahogyan „elkenődve” van jelen. Schrödinger eredetileg ezzel az értelmezéssel állt elő, azonban nem sok megértésre talált. A nehézségek a teljes, időtől is függő elmélettel kapcsolatosan merültek fel, e szerint ugyanis a szabad elektront jelképező *hullámcsomag* az idő múlásával szétfolyik a térben. Ennek az az értelmezése, hogy az elektron tömege és töltése is hasonlóképpen szétfolyik a térben, a legtöbb fizikus számára elfogadhatatlannak bizonyult.

Max Born, göttingai professzor 1926-ban ψ -re vonatkozóan ésszerűbb értelmezést javasolt. Born emlékeztetett arra, hogy az elektromágneses hullámok E elektromos erőterének amplitúdójára Einstein új értelmezést javasolt. Minthogy az amplitúdó négyzete a hullám intenzitásával arányos mennyiség, Einstein azt javasolta, hogy E^2 legyen arányos annak valószínűségével, hogy az adott hely környezetében egy fotont találunk. Így a fényképező lemezen a világos és sötét csíkok (amiknek helyét a hullámok interferenciája alapján határozzuk meg) annak a valószínűségeként is értelmezhetők, hogy a lemez adott helyére foton érkezik. Born ezt az elgondolást kiterjesztette a ψ hullámfüggvény értelmezésére. Azt feltételezte, hogy $|\psi|^2$ annak a valószínűsége, hogy a részecske a térnek az adott tartományában tartózkodik. Ez az értelmezés az elkent jelleg helyett megerősítette az elektronok *részecske természetét*. Az *elektron helyének meghatározására vonatkozó lehetőségeink azonban korlátozottak, az elektron helyét csak egy elkent tartományként tudjuk megadni*.



43-19 ábra

Egy dimenzióban, egymástól D távolságra elhelyezett merev falak közötti mozgó elektron első három kvantumállapota.



43-18 ábra

Az egydimenziós dobozban zárt részecske mozgása. A részecske a falak között visszaverődik.

Általában ψ komplex függvény (azaz, a $\sqrt{-1}$ is szerepel benne.) Mivel a fizikailag létező objektumokkal csak valós számok hozhatók kapcsolatba, Born a ψ komplex voltából származó jellegzetességeket úgy kerülte ki, hogy fizikai jellemzőként a ψ abszolút értékének négyzetét javasolta. Pontosabban

BORN VALÓSZÍNŰSÉGI ÉRTELMEZÉSE ψ -RE $|\psi|^2 \Delta V =$ (annak a valószínűsége, hogy a ΔV térfogatban a részecskét megtaláljuk)

A P valószínűségsűrűség-függvény definíció szerint

$$P = |\psi|^2 \quad (43-29)$$

Ekkor annak φ valószínűsége, hogy egy elektron a V térfogatban van:

$$\varphi = \int_V P dV \quad (43-30)$$

ahol az integrált a V térfogatra kell kiterjeszteni. Ahhoz, hogy $|\psi|^2$ -et valószínűségként értelmezhesük, vegyük észre, hogy az elektron valahol bizonyosan megtalálható. Vagyis, ha a P valószínűség-sűrűség-függvényt az egész térre integráljuk, akkor egyet kell kapnunk. Ezért a hullám-függvényre írójuk a következő *normálási feltételt*

A ψ NORMÁLÁSA $\int_{\text{egész térre}} |\psi|^2 dV = 1 \quad (43-31)$

A dobozba zárt részecske

Annak érdekében, hogy a ψ hullámfüggvény és a φ valószínűség közti kapcsolatot megvilágítsuk, tárgyaljuk most azt az esetet, amikor az elektron egy egymástól D távolságra lévő merev falak közötti egydimenziós tartományban mozog, lásd a 43-18 ábrát. Az elektron, ami ebbe a „dobozba” van bezárva, egy de Broglie-féle állóhullám-mintázattal írható le, amelynek a falaknál csomópontjai vannak. Ez azt jelenti, hogy a D távolságra a félhullámhosszak n egész számú többszörösét illeszthetjük. Ezért

$$n \left(\frac{\lambda}{2} \right) = D, \text{ vagy } \lambda = 2D/n \quad (43-32)$$

A (43-28) Schrödinger-egyenlet megoldása

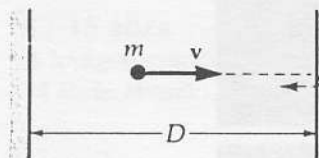
$$\psi = \psi_{\max} \sin(2\pi x / \lambda) = \psi_{\max} \sin[2\pi x / (2D/n)]$$

vagy

DOBOZBA ZÁRT RÉSZECSCKE HULLÁMFÜGGVÉNYE $\Psi(x) = \Psi_{\max} \sin\left(\frac{4\pi x}{D}\right) \quad (43-33)$

ahol x az egyik faltól mért távolság. Mielőtt továbbmennénk, *normáljuk* a hullámfüggvényt azáltal, hogy a (43-33) integrálját képezzük az elektron által hozzáférhető egész térre, vagyis $x = 0$ és $x = D$ között, majd az eredményt 1-gyel tesszük egyenlővé:

$$\int_0^D |\psi|^2 dx = 1$$



43-18 ábra

Az egydimenziós dobozba zárt részecske mozgása. A részecske a falakról rugalmasan visszapattan.

A (43-33) behelyettesítésével adódik:

$$\int_0^D (\psi_{\max})^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{D}\right) dx = 1$$

Ha ezt az integrált meghatározzuk, azt kapjuk, hogy

$$\psi_{\max} = \sqrt{\frac{2}{D}} \quad (43-34)$$

Így a normált hullámfüggvény:

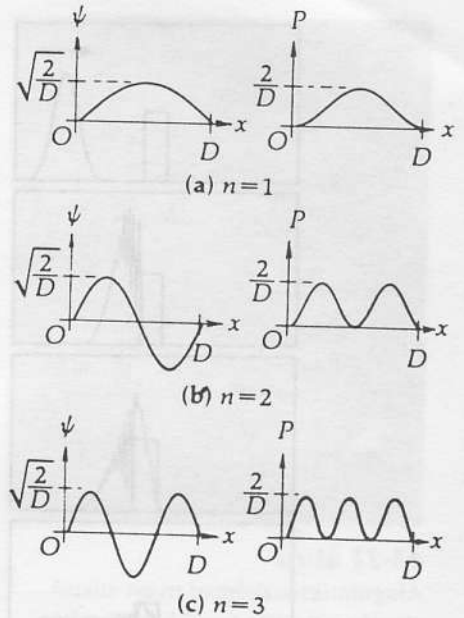
DOBOZBA ZÁRT
RÉSZECSCKE
NORMÁLT
HULLÁMFÜGGVÉNYE

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{D}} \sin\left(\frac{n\pi x}{D}\right) \quad (43-35)$$

és a $P = |\psi|^2$ valószínűség-sűrűségfüggvény

$$P(x) = \left(\frac{2}{D}\right) \sin^2\left(\frac{n\pi x}{D}\right) \quad (43-36)$$

A 43-19 ábra az első három kvantumállapot ($n = 1, 2$ és 3) hullámfüggvényét és valószínűségi sűrűségeit mutatja. Figyeljük meg, hogy annak a valószínűsége, hogy a részecskét a doboz közepén lévő kis tartományban találjuk meg, maximális az $n = 1$ esetén és minimális az $n = 2$ esetén, mindegyik valószínűségi sűrűség görbe alatti terület egységnyi, mert mindegyik hullámfüggvény egyre normált.



43-19 ábra

Egy dimenzióban, egymástól D távolságra elhelyezett merev falak között mozgó elektron első három kvantumállapota.

43-2 PÉLDA

Elektron egydimenziós mozgást végez két, egymástól D távolságra lévő merev fal között. (a) Mekkora a valószínűsége annak, hogy az elektront az $x = 0$ és $x = D/3$ közti intervallumban találjuk meg, ha az elektron az $n = 1$ kvantumállapotban van? (b) Hasonlítsuk ezt össze a klasszikus valószínűséggel.

MEGOLDÁS

(a) Az elektron megtalálásának \wp valószínűsége az x hosszúságú intervallumban egy egyenes mentén, a (43-30) egyenlet egydimenziós változatával számítható ki:

$$\wp = \int_x^{x+\Delta x} P(x) dx$$

ahol $P(x)$ a (43-36) képlettel van megadva. Ha ezt a fenti képletbe behelyettesítjük, akkor

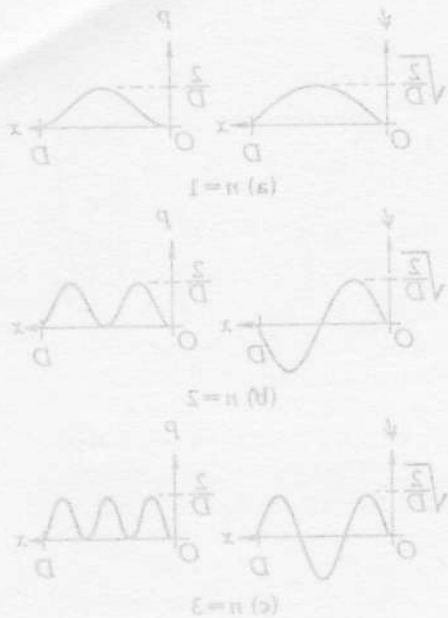
$$\wp = \frac{2}{D} \int_0^{D/3} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{D}\right) dx$$

$$\wp = \frac{2}{D} \left[\frac{x}{2} - \sin\left(\frac{2n\pi x}{D}\right) / \left(\frac{4n\pi}{D}\right) \right]_0^{D/3} = 0,196 \quad (n = 1 \text{ esetén})$$

Így az elektron $x = 0$ és $x = D/3$ közti szakaszon az $n = 1$ állapotban való megtalálásának hullámmechanikai valószínűsége kb $1/5$.

43-20 ábra

Számítógéppel készült rajzfilm kockái a $|\psi|^2$ valószínűségi sűrűség alakulásától. A derékszögű potenciálfal felé haladó részecske energiája éppen nem elegendő ahhoz, hogy (klasszikusan) áthaladjon a gát fölött. Az ütközés után azonban két valószínűségi „hullámcsomag” távozik a fáltól, a fal két oldalán. Ez azt mutatja, hogy véges valószínűsége van annak, hogy a részecske alagút effektussal áthaladjon a gáton. Ez nem azt jelenti, hogy a részecske betaszakadt volna. Az a tény, hogy a $|\psi|^2$ a fal jobb oldalán sem tűnik el, csak azt jelenti, hogy a részecske az ütközés után nem nulla (ahogyan a klasszikus fizika mondia), hanem véges valószínűséggel található meg ebben a részében. (A. Goldberger – H. M. S. J. L. Schwartz: Scattering in One Dimension (Szórás egy dimenzióban) c. filmből, aminek a leírását lásd American Journal of Physics 35, 177 (1967).)



(b) A korrespondencia-elv illusztrálásaként: $n \rightarrow \infty$ esetén $\lim_{n \rightarrow \infty} [(\sin an/bn)] = 0$. Ezért a klasszikus valószínűség $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho = 1/3$ lesz. Klasszikus szempontból az elektron állandó sebességgel mozog ide-oda a falak között, ezért annak a valószínűsége, hogy az adott térrészben megtaláljuk, valóban 1/3.

Dobozba zárt részecske energiaállapotai

Az elektron által betöltött kvantumállapotok mindegyikének az energiáját az $E = U + K$ összefüggésből kaphatjuk meg. Itt $U = 0$. (Miért?) A K viszont a $p = h/\lambda$ impulzussal kifejezhető. Így

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \quad (43-37)$$

Stacionárius energia állapotokban (állóhullámok-esetén) a falak közötti D távolságon a félhullámhossz egész számú többszörösének kell elférnie (ellentétben azzal, hogy a hidrogén atomban lévő elektronpályákon a teljes hullámhossz egész számú többszörösének kell elférnie),

$$n \left(\frac{\lambda}{2} \right) = D \quad (\text{ahol } n = 1, 2, 3, \dots) \quad (43-38)$$

Ha ezt az értéket a (43-37) képletbe behelyettesítjük, adódik, hogy:

A DOBOZBA ZÁRT RÉSZECSKE ENER-GIAÁLLAPOTAI

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mD^2} \right) n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (43-39)$$

ahol az n szám az elektron n -edik kvantumállapotát jelenti.

43-3 PÉLDA

Közéltől 6 eV energiájú elektron egymástól pontosan 1 nm távolságra lévő merev falak között mozog. (a) Adjuk meg az elektron által betöltött állapotra az n szám értékét! (b) Adjuk meg az elektron energiájának a pontos értékét!

MEGOLDÁS

Az n kvantumszám és az energia közti kapcsolatot a (43-37) egyenlet adja meg. Ebből n -et kifejezve, azt kapjuk, hogy

$$n = \left(\frac{2D}{h} \right) \sqrt{2mE}$$

A számértékeket behelyettesítve: $E = (5\text{eV})(1,6 \times 10^{-19}\text{J/eV}) = 8 \times 10^{-19}\text{ J}$ adódik, hogy

$$n = \frac{2(10^{-9}\text{ m})}{(6,626 \times 10^{-34}\text{ Js})} \sqrt{2(9,1 \times 10^{-31}\text{ kg})(8 \times 10^{-19}\text{ J})} = 3,642$$

43-18 ábra

Az egydimenziós dobozba zárt részecske mozgása. A részecske a falakról rugalmasan visszaverődik.

43-19 ábra
Egy dimenzióban, egymástól D távoli, szilárd falak között mozogó elektron első három kvantumállapota.

Mínt hogy n egész szám kell legyen, megpróbálhatjuk az $n = 4$ értéket a (43-37)-ben. Ez $E = 6,017$ eV-et ad. Ha $n = 3$, akkor $E = 3,384$ eV. Mivel az $n = 4$ esetén az energia „közelebb esik” a „közelítőleg 6 eV”-hoz, arra következtetünk, hogy

$$(a) \quad n = 4$$

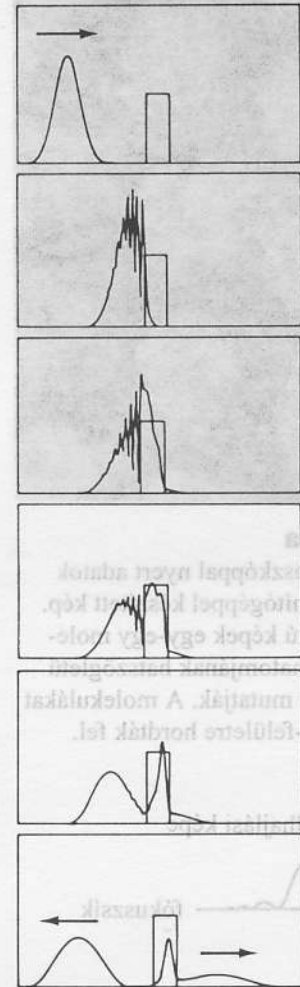
$$\text{és } (b) \quad E = 6,02 \text{ eV}$$

A fentiekben a lehető legrövidebb bevezetőt adtuk a kvantummechanikához. Az elméletbe még számos kiegészítést és újítást vezettek be; kiépítéséhez igen sok fizikus járult hozzá, a legnevesebb közöttük P.A.M. Dirac (1928), aki megalkotta a *relativisztikus hullámegyenletet*. Ez a szinképvonalak mágneses térben mutatott felhasadásáról is számot adott és megjósolta az antianyag létezését⁸.

43.7 Az alagúteffektus

A kvantummechanika egyik meglepő következménye, hogy egy részecske hullámfüggvénye olyan térrészbe is be tud hatolni, amely a klasszikus elmélet szerint tiltott. Tegyük fel, hogy egy homokszemcsét ismételtelen neki-hajítunk egy papírlapnak, amit a térben rögzítve tartunk. Amennyiben a homokszem mozgási energiája nem elég a papír átszakításához, akkor azt várjuk, hogy a papír sértetlensége mellett sohasem fordul elő az, hogy a homokszem változatlan sebességgel haladva megjelenik a papír másik oldalán. Ezzel szemben az elektron, – amikor véges magasságú potenciálgáthoz a gát magasságánál kisebb kinetikus energiával közeledik – másként viselkedik. Az elektron hullámfüggvénye be tud hatolni a falba és a fal túlsó oldalán is zérustól különböző értéket vehet fel. Ez azt jelenti, hogy esetleg úgy találjuk, hogy az elektron egy „kvantummechanikai alagúton” átjutott a potenciálgáton, ahova a klasszikus elmélet szerint sohasem juthatott volna (lásd 43-20 ábra). Makroszkópikus objektumok esetén az átálgútozás valószínűsége lényegében zérus, a kvantummechanikai méretek skáláján azonban jelentőssé válik. A 43B-23 problémában ilyen alagútozás valószínűségét számítjuk ki.

Az alagúteffektusnak igen sok gyakorlati alkalmazása van. A potenciálgát igen kicsiny magasságváltozása az áthaladás valószínűségében igen nagy változást tud eredményezni. Így például az *alagútdiódában* az elektronok áramlását két ellenkező töltésű tartomány között gyorsan lehet változtatni a két tartományt elválasztó potenciálgát kicsiny megváltoztatásával. Egy másik érdekes alkalmazási lehetőség a *pásztyázó alagútmikroszkóp*⁹. Ebben a beren-

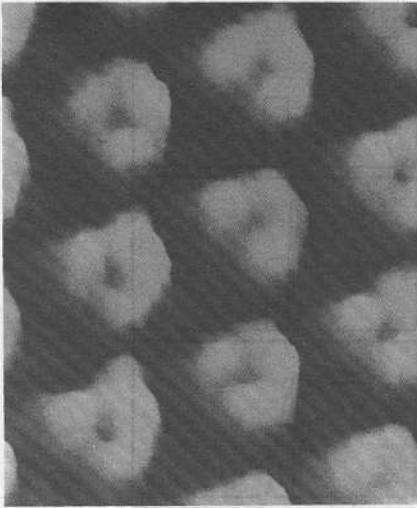


43-20 ábra

Számítógéppel készült rajzfilm kockái a $|\Psi|^2$ valószínűségi sűrűség alakulásáról. A derékszögű potenciálfal felé haladó részecske energiája éppen nem elegendő ahhoz, hogy (klasszikusan) áthaladjon a gát fölött. Az ütközés után azonban két valószínűségi „hullámcsomag” távozik a faltól, a fal két oldalán. Ez azt mutatja, hogy véges valószínűsége van annak, hogy a részecske alagúteffektussal bejutott a számára klasszikusan tiltott területre. Ez nem azt jelenti, hogy a részecske kettészakadt volna. Az a tény, hogy a $|\Psi|^2$ a fal jobb oldalán sem tűnik el, csak azt jelenti, hogy a részecske az ütközés után nem nulla (ahogyan a klasszikus fizika mondja), hanem *véges valószínűséggel található meg ebben a részében.* (A. Goldberg – H. M. Shey – J. L. Schwartz: *Scattering in One Dimension* (Szórás egy dimenzióban) c. filmből, aminek a leírását lásd *American Journal of Physics* 35. 177 (1967).)

⁸ Az antianyag – antielektron, antiproton, antineutron, stb... – az anyag új, más megjelenési formája, amely nagy energiájú fotonok és részecskék ütközésekor keletkezik. Az antirészecskék tömege, spinje (lásd a 44.4 pontot) ugyanolyan, mint közönséges párjuké, de töltésük ellentétesek, és ellentétes a spin és a mágneses nyomaték egymáshoz képest vett beállása is. Ha antirészecske ugyanolyan típusú közönséges részecskével találkozik, kölcsönösen megsemmisítik egymást és szétsugárzódnak, mc^2 nyugalmi energiájuk fotonok energiájává alakulnak. Mínt hogy az anyag és az antianyag a kísérletek során egyenlő mennyiségekben keletkezik (párkeltéssel) a kozmológia egyik problémájává vált az a kérdés, hogy miért élünk olyan Univerzumban, melyet túlnyomórészt anyag és nem antianyag tölt be.

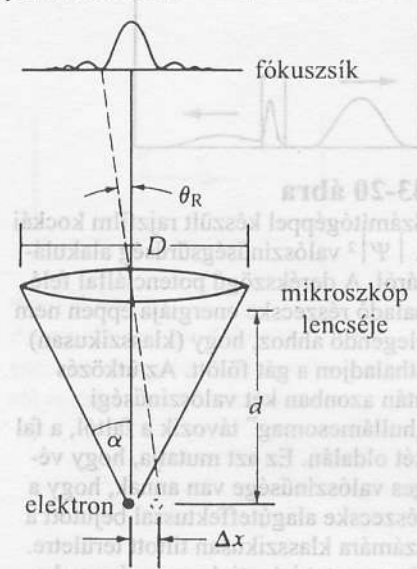
⁹ Lásd Gerd Binnig-Heinrich Rohrer: *The Scanning Tunneling Microscope* (A pásztázó alagút mikroszkóp) *Scientific American* 253. 50 (1985 aug). Ez a cikk elmagyarázza, hogy hogyan lehet végrehajtani a tülhegy ilyen finoman szabályozott mozgatását. Az 1986 évi Nobel-díjat a két szerző kapta, ezért a találmányért, megosztva Ernst Ruska-val, aki korábban az elektronmikroszkópot találta fel.



43-21 ábra

Alagútmikroszkóppal nyert adatok alapján számítógéppel készített kép. A gyűrűalakú képek egy-egy molekula hat szénatomjának hatszögletű elrendezését mutatják. A molekulákat ródiom-fém-felületre hordták fel.

pontforrás elhajlási képe



43-22 ábra

Elektron helyének megfigyelése mikroszkóp segítségével. Az elhajlási kép középponti csúcsa a tengelytől mért $\pm\theta_R$ szögű kúpon belül van.

dezésben egy rendkívül hegyes fémtűt, ami (ideális esetben) egyetlen atomban végződik, kb. 2 atomátmérőnyi távolságra viszünk egy vezető felülethez. Kis potenciálkülönbség esetén a klasszikus elmélet szerint az elektronok nem tudnak áthaladni a hézagon. Ezzel szemben a potenciálgáton alagúteffektussal átjutnak. Ha a tű hegye és a felület között a feszültség csökken, az elektronáram is csökken. A tűt a felület mentén mozgatva a tű és a felület távolságát állandóan úgy szabályozzuk, hogy az áram állandó maradjon. Ezáltal a tű függőleges mozgása úgyszólván domborzati térképet rajzol ki hegyekről és völgyekről, feltárva az atomok elhelyezkedését a felületen. A felületet egymás mellett húzódo vonalak mentén tapogatják le, s így valóban komplett domborzati térkép készíthető. Az egyenes vonalakat egy számítógépprogram „kisimítja” és előállítja a 43-21 ábrát. Olyan különbségeket is ki lehetett mutatni, ami az atomátmérő egyszázad része, szemben a fénymikroszkóp gyengébb pontosságával, ahol is a felbontóképesség csak mintegy 2000 atomátmérő.

43.8 A határozatlansági elv

A hullámmechanika a részecskék pályájának pontos térben elkent valószínűségi „felhővel” helyettesíti. Ez mélyreható változást idéz elő természet szemléletünkben. A fizika legátfogóbb elmélete – a kvantummechanika – már nem olyan fizikai modellekre épül, mint a korábbi elméletek. Nem adja meg egzaktul, hogy hol van az elektron, vagy hogy *hogyan* mozog, csak azt, hogy *hogyan* becsülhető meg a tartózkodási valószínűsége egy tartományban, ha közben adott sebességtartományba eső sebességgel halad. A gyötrő kérdés megmarad: az elektronnak *valahol* lennie kell. Vajon nem tudnánk e mérési technikánkat finomítva pontosan megmutatni, hogy hol van az elektron és *hogyan* mozog egyik helyről a másikra?

Heisenberg 1927-ben rámutatott arra, hogy létezik olyan *alapvető* határ, amely minden mérésre érvényes és minden ilyen lehetőséget kizár. Ezen az alapvető akadályon nem segít át sem az, ha okosabbak leszünk, sem az, ha a mérőeszközöinket tovább finomítjuk, mert ez a korlátozás a *hullám-részecske kettősség következménye* amin nem változtathatunk.

A határozatlansági elv a következőképpen illusztrálható. Tegyük fel, hogy egy elektron helyét akarjuk az x-tengely mentén meghatározni, egy nagy teljesítményű (nagy felbontóképességű) mikroszkóppal (lásd a 43-22 ábrát). A D átmérőjű lencse szélén bekövetkező elhajlás miatt a (pontszerű) elektron képe olyan elhajlási mintázat lesz, amelynek centrális csúcsa a (39-22) képlet szerint

$$\theta_R = \frac{(1,22)\lambda}{D}$$

szögátmérővel rendelkezik, ahol λ a megvilágító fény hullámhossza és D a lencse átmérője. A θ_R minimális szögfelbontás a $\Delta x/d$ alakban is felírható. Ebből következik, hogy az elektron helyét csak $\pm\Delta x$ határozatlansággal lehet megadni, ahol

$$\frac{\Delta x}{d} = \frac{(1,22)\lambda}{D}$$

Átrendezéssel

$$\Delta x = \frac{(1,22)\lambda}{(D/d)}$$

Ha 2α annak a fénykúpnak a nyílásszöge, ahonnan a lencse a fényt gyűjti, akkor $\alpha = (D/2)/d = 1/2(D/d)$. Nagyságrendi becslés érdekében a $\operatorname{tg} \alpha$ függvényt $\sin \alpha$ -val helyettesíthetjük (ami nem túl jó közelítés, de használható).

$$\Delta x \approx \frac{(1,22)\lambda}{2 \sin \alpha}$$

Végül ha a becslés eddigi szellemében elhagyjuk az $1,22/2$ szorzót, és így azt kapjuk, hogy

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin \alpha} \quad (43-40)$$

Ez a módszer lényegével együtt járó bizonytalanság, amivel az elektron helyének x -koordinátáját meghatározhattuk, ami annak tulajdonítható, hogy D átmérőjű lencsét használtunk. Ha kisebb átmérőjű lencsét használtunk volna, a határozatlanság nagyobb lett volna (mert a $\sin \alpha$ kisebb lett volna).

A helyzetet megpróbálhatunk úgy javítani, hogy kisebb hullámhosszúságú megvilágítást alkalmazunk, mondjuk a röntgen-tartományból. Sajnos azonban a rövidebb hullámokhoz nagyobb impulzus tartozik, hiszen $p = h/\lambda$, és ez az elektront jobban meglökné, amikor a foton az elektronnal a mikroszkóp lencséjébe szóródik. A szórt foton bárhol beléphet a 2α szög-nyílású kúpon belül a lencsébe. A beesés pontos irányát nem ismerjük, mert az elektront egészen addig nem detektáljuk, míg az a lencsén átjutva a kép helyére nem érkezik. Csak azt tudjuk, hogy a lencsén valahol átjutott. A Compton-szórás során, amikor a foton egy elektronnal szóródik, a foton x -irányú impulzuskomponense $+(p_x \sin \alpha)$ és $-(p_x \sin \alpha)$ között bármely értéket felveheti. Így az impulzusmegmaradás miatt az elektronnak átadott impulzus is határozatlan. Ezért az elektron impulzusának x -komponensében

$$\Delta p_x \approx 2p \sin \alpha \approx 2 \left(\frac{h}{\lambda} \right) \sin \alpha \quad (43-41)$$

határozatlanság jelenik meg. Ha a hely és az impulzus határozatlanságát egy összefüggéssé kombináljuk, az adódik, hogy

$$\Delta x \Delta p_x \approx \frac{\lambda}{\sin \alpha} 2 \left(\frac{h}{\lambda} \right) \sin \alpha \approx 2h \quad (43-42)$$

Amikor a hely határozatlansága csökken, elkerülhetetlenül nő az impulzus határozatlansága, és megfordítva. Ez a határozatlanság nem a mérőműszer esetleges tökéletlenségével függ össze. Még az elképzelhető legideálisabb berendezéssel is együtt jár az a fundamentális korlátozottság, ami a sugárzás és az anyag kettős (hullám és részecske) természetére vezethető vissza.

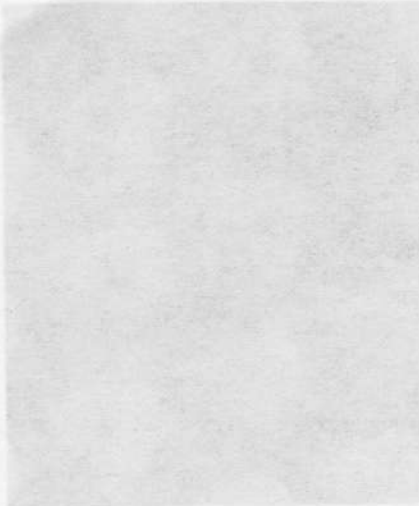
A Heisenberg-féle határozatlansági relációnak szigorúbb megfogalmazása a következő:

HEISENBERG FÉLE
HATÁROZATLANSÁGI
ÖSSZEFÜGGÉS

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar \quad (43-43)$$

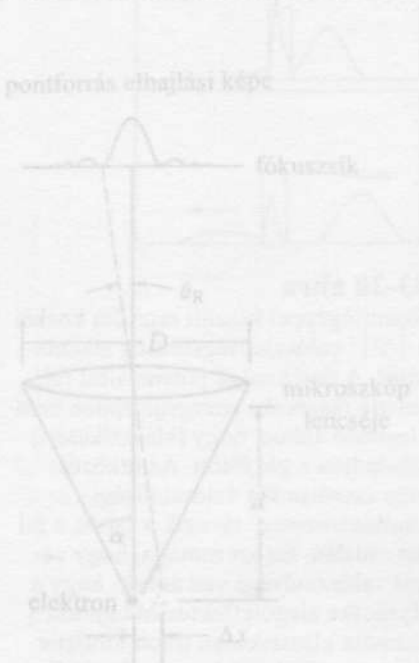
Egy részecske helyének és impulzusának egyidejű mérésekor a határozatlanságok szorzata nagyobb vagy olyan nagyságrendű, mint a $\hbar = h/2\pi$ szám.

Semmilyen ötlet vagy a mérés technika mégoly látványos fejlődése sem segíthet át ezen a korláton. Az anyagnak és a sugárzásnak hullám-részecske-kettőssége miatt maga a mérési aktus megzavarja a vizsgált rendszert, még-



43-21 ábra

Alagótmikroszkóppal nyert adatok alapján számítógéppel készített kép. A gyűrűalakú képek egy-egy molekula hat szénatomjának határozógtűltű elrendezését mutatják. A molekulákat ródiám-fém-felületre hordták fel.



43-22 ábra

Elektron helyének megfigyelése mikroszkóp segítségével. Az elhajlási kép középponti csúcsa a tengelytől mért $\pm \alpha$ szögű kúpon belül van.

hozzá lényegében ismeretlen módon, amit nem lehet elkerülni. Ez a természetben egyfajta beépített korlátozás. A határozatlansági elv azt a tényt húzza alá, hogy az atomi jelenségek klasszikus modelljei biztosan félrevezetőek.

Vegyük azonban észre, hogy kizárólag a részecske helyének vagy impulzusának mérésére, (ha tehát csak az egyik mennyiséget mérjük) semmiféle korlátozás sincsen, tetszőleges pontosság elérhető. De ahogyan a hely Δx határozatlanságát csökkentjük, ($\Delta x \rightarrow 0$), a részecske impulzusának egyidejű meghatározásakor a határozatlanság egyre nagyobb és nagyobb lesz ($\Delta p_x \rightarrow \infty$), és megfordítva. A Δx és a Δp_x között a pontos összefüggés attól függ, hogy a konkrét esetekben a határozatlanság határait hogyan definiáljuk. A szorzat értéke a $2\hbar$ -tól lefelé kb. a \hbar -ig változhat. Hasonló relációk állnak fenn az y és a z irányban is

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar \quad (43-44)$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar \quad (43-45)$$

Az elv más változó párokat is hasonlóképpen érint. Kimutatható, hogy fennáll a

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (43-46)$$

reláció is, ahol ΔE az adott állapot energiájának határozatlansága és Δt pedig az energiaállapot élettartama. Az elv a szögmérésekre is vonatkozik. Például ha azt akarjuk meghatározni, hogy hol van az elektron a hidrogén-atombeli Bohr-pályán, akkor a ϕ szög mérési bizonytalansága az L_ϕ impulzusnyomaték határozatlanságával lesz

$$\Delta \phi \Delta L_\phi \geq \hbar \quad (43-47)$$

kapcsolatban. A határozatlansági relációnak ez az alakja lényegében tönkreteszi a Bohr féle „naprendszer” képet, amely szerint az elektronnak mindig a pálya jól definiált pontján kellene lennie. Tekintsük a következő példát!

43-4 PÉLDA

Becsüljük meg, mekkora az elektron szöghelyzetének $\Delta \phi$ határozatlansága a Bohr-pályán!

MEGOLDÁS

A $\Delta \phi$ értékét a (43-47) képlet kapcsolja az elektron L_ϕ impulzusnyomatékának ΔL_ϕ határozatlanságához: $\Delta \phi \Delta L_\phi > \hbar$. Minthogy az L_ϕ az egyik Bohr-feltétel szerint kvantált, csak diszkrét értékeket vehet fel, nem lehet szó egyik Bohr-pályán sem határozatlanságról, tehát

$$\Delta L_\phi = 0$$

Ekkor a (43-47) képlet azt állapítja meg, hogy a $\Delta \phi$ -nek nem lehet véges nagyságú. Ez azt jelenti, hogy ϕ -teljesen határozatlan. Egyformán valószínű, hogy az elektron a Bohr-pálya bármelyik pontjában legyen az egész idő alatt. Ezért nincs jelentősége arról beszélni, hogy az elektron a pálya egyik pontjáról átmegy a másik pontjára a pálya mentén.

43-5 PÉLDA

Elektron (aminek a tömege $m = 9,11 \times 10^{-31}$ kg) és puskagolyó (amelynek a tömege $m = 0,02$ kg) 500 m/s sebességgel mozog. A sebesség értéke 0,01%-ra pontos. Mely határok között tudnánk a helyüket meghatározni?

MEGOLDÁS

(a) Az elektron impulzusa $p = mv = (9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})(500 \text{ m/s}) = 4,56 \times 10^{-28} \text{ kgm/s}$. Ennek az impulzusnak a Δp_x határozatlansága az adatok szerint 0,01%. Így

$$\Delta p_x = (4,56 \times 10^{-28} \text{ kg m/s})(0,0001) = 4,56 \times 10^{-32} \text{ kg m/s}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció (a (43-43) képlet) szerint a hely Δx határozatlansága nagyságrendben

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{\Delta p_x} = \frac{\hbar}{(2\pi)\Delta p_x} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}}{2\pi \left(4,56 \times 10^{-32} \frac{\text{kg m}}{\text{s}} \right)} \approx 0,00231 \text{ m, vagy } \approx 2,31 \text{ mm}$$

Ennél pontosabban nem tudjuk az elektron helyét meghatározni. Ez arra utal, hogy ebben a helyzetben az elektron nem tekinthető tömegpontnak.

(b) A puskagolyó impulzusa $p = mv = (0,02 \text{ kg})(500 \text{ m/s}) = 10,0 \text{ kgm/s}$. Az impulzus Δp_x határozatlansága 0,01%, vagyis

$$\Delta p_x = (10,0 \text{ kgm/s})(0,0001) = 10^{-3} \text{ kg m/s}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció (43-43) szerint a hely Δx határozatlansága nagyságrendben

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{\Delta p_x} = \frac{\hbar}{2\pi(\Delta p_x)} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}}{2\pi \left(10^{-3} \frac{\text{kg m}}{\text{s}} \right)} \approx 1,00 \times 10^{-31} \text{ m}$$

Ez a bizonytalanság messze alatta marad az egyáltalán elképzelhető mérési pontosságnak (az atommag mérete is 10^{-13} m). Ezért makroszkópikus tárgyakra hétköznapi körülmények között megbízhatóan alkalmazhatjuk a klasszikus részecskeképet.

A határozatlansági relációnak mélyreható filozófiai következményei vannak. Miként Einstein rámutatott arra, hogy az abszolút tér, az abszolút idő és az abszolút egyidejűség lényegében meghatározhatatlan tartalom nélküli fogalmak, amelyeket ki kell küszöbölni a fizikai elméletekből, úgy Heisenberg azt mutatta meg, hogy egy elektron egyidejű helye és impulzusa csak eredendően korlátos értelemben használható.

Ez a klasszikus fizikában megszokott helyzettel ellentétes, ott ugyanis bármilyen mérést, elvben legalább is, egyre nagyobb pontossággal – korlátozás nélkül – el lehet végezni. A határozatlansági elv ezt tagadja. Azt állítja: nem lehet az objektumon mérést végezni anélkül, hogy meg ne zavarnánk, méghozzá ismeretlen mértékben, s így valamely vele kapcsolatban álló fizi-

kai mennyiségre vonatkozó ismeretünk ne csökkenne. Ez még a technikailag tökéletes mérőberendezések használatakor is bekövetkezik, mert a bizonytalanság nem a berendezések, vagy a mérési eljárások hibáiból ered. *A határozatlanság eredete az anyag és a sugárzás kettős természetében rejlik.*

Míthogy atomi szinten nem tudjuk kísérletileg tökéletesen meghatározni a részecskék viselkedését, erről a mozgásról nem is szabadna a klasszikus kifejezések használatával beszélni!

Most már kezd világgossá válni, hogy a két-réses-interferencia esetén miért lépnek fel paradoxonok, ha a fotonok (vagy a részecskék) áthaladását a réseken a klasszikus pályaképpel írjuk le. Egy kísérletben, ahol egy elektronyaláb olyan két résen halad át, amelyek távolsága összemérhető az elektronok de Broglie-hullámhosszával, a megszokott két-réses interferencia-mintázatot fogjuk tapasztalni. A csíkrendszer még akkor is kialakul, ha csak egyetlen elektront engedünk egyszerre a résekre. (A kép statisztikailag jön létre, ha elég hosszú ideig elég sok elektront használunk). De ha az expozíciós idő egy része alatt az egyik rést, más része alatt pedig a másik rést zárva tartjuk, akkor a kétréses mintázat helyett a két egy-réses-mintázat szuperpozíciója lesz az eredmény. Így arra a következtetésre kell jutnunk, hogy amikor mindkét rés nyitva van egyszerre, akkor az elektronok valahogyan mindkét réssel egyszerre vannak kölcsönhatásban, annak ellenére, hogy a klasszikus elektronmodell szerint az elektron jól definiált részecske, amelynek egyszerre csak egy résen lenne szabad átmennie. Amennyire kísérletileg igazolható, az elektronok nem klasszikus objektumok, amelyeknek jól definiált pályájuk lenne, ezért nem beszélhetünk róluk úgy, mintha mégis ez volna a helyzet. Ez a *pozitívista filozófia* lényege, mely álláspont eléggé megvetette a lábát a fizikában. Először Einstein relativitáselméletében (mely elvetette az éter fogalmát, mert létét nem lehetett kísérletekkel bizonyítani), később pedig a kvantummechanikában hódított tért, (amely viszonyt elvetette a pontos klasszikus fogalmak használatát az atomi jelenségek leírásában, mert a kísérletek tanúsága szerint azok megmérhetetlenek). Ezek helyett a kvantummechanika többnyire csak valószínűségi kijelentéseket kínál. Ha egy rendszer tulajdonságaira vonatkozóan azonos mérésekből álló mérősortozatot végzünk, akkor a mérések átlagértéke kvantummechanikailag is *pontosan* meghatározható, az egyedi mérések eredményeire csak valószínűségi becslések tehetők.

A kvantummechanikának ez a valószínűségi értelmezése az ún. koppenhágai iskola nevével fonódott össze, amit legnagyobb jelentőségű mestere, a dán Niels Bohr működési helyéről neveztek el így. Ma a fizikusok többsége elfogadja ezt az értelmezést – bár vannak illusztris kivételek. Például Einstein sohasem fogadta el, hogy a szigorú oksági elvet – amin a klasszikus fizika nyugodott – el kellene vetni. „Isten nem játszik kockajátékot” szokta mondani és az volt a hite, hogy kell lennie valamilyen kauzális összefüggésnek a háttérben, amely létrehozza az általunk megfigyelt statisztikus viselkedést. Hitt abban, hogy majd a jövőben egy elmélet feltárja a mélyebb szinten megmutatózó kauzalitást. Néhány kiváló elméleti fizikus hosszú éveket szentelt annak, hogy az ilyen „rejtett paramétereket” megtalálja és kidolgozza az elméletüket. Mindezideig azonban egyikük sem járt sikerrel.

Végül egy körülményt még hangsúlyoznunk kell.¹⁰ Minden megfigyelést a klasszikus fizika nyelvén írunk le, mert végső soron a méréseket makroszkópikus mérőműszerekkel végezzük. Ez azonban nem azt jelenti, hogy a mérőműszerek és más makroszkópikus objektumok nem a kvantum-

¹⁰ Ezeket a megjegyzéseket Herman Feshbach és Victor F. Weisskopf: „Ask a Foolish Question...” (Tégy fel egy buta kérdést...!) c. cikkének alapján fogalmaztuk. (*Physics Today*, 1988 október). Az 1989 áprilisi szám tartalmaz néhány levelet a szerkesztőhöz, amelyek meglehetősen lelkesedéssel fejtegetnek más álláspontokat.

mechanika, hanem a klasszikus mechanika törvényeinek tesznek eleget! *Minden objektum a kvantummechanikának tesz eleget.* Viselkedésüket csak azért tudjuk a klasszikus fogalmak segítségével elhanyagolható hibával leírni, mert a makroszkópikus objektumok nagyon nagyok. Amikor azonban az atomi jelenségeket elemezzük, csak a kvantummechanika képes a helyes válaszokat megadni.

A kvantummechanika bizonyos eredményei rendkívüli pontosságúak. Például a hidrogén-atom alapállapotának az energiáját 10^{-12} ($1:10^{12}$) pontossággal adja meg. Vannak azonban olyan kérdések, amelyekre a kvantummechanika csak valószínűségi eloszlást ad meg, egyetlen határozott válasz helyett. Ahogy Feshbach és Weisskopf megfogalmazta:

A Heisenberg-féle határozatlansági relációk úgyszólván útjelző-táblák, amelyek azt mondják: „Eddig és nem tovább használhatók a klasszikus változók (bizonyos párijai). Ezen a határon túl ezek a változók már nem megfelelőek. A nem megfelelő kérdésre valószínűségeloszlás lesz a válasz.” Másrészt a megfelelő kérdésekre a kvantummechanika olyan éles, pontos választ ad, mint amilyen pontos a hidrogén-atom alapállapotának energiája.

A szerzők természetesen definiálták a „nem megfelelő” szó értelmét is. „A megfigyelések eredményeit a klasszikus fizika nyelvén fogalmazzuk meg. De a klasszikus fizika fogalmai nem mindig illeszkednek jól az atomi szituációkhoz”. Ezen azonban nem azt kell érteni, hogy az ilyen nem megfelelő kérdéseket nem szabad feltenni. A kvantummechanika tartalma, úgy látszik, mindig heves vita tárgya marad a fizikusok és filozófusok között.

43.9 A komplementaritási elv

Eddig azt írtuk le, hogy a fizikusok miként jutottak arra a meggyőződésre, hogy a természetet a részecskék és a hullámok közötti bizonyos szimmetria jellemzi. De ez az új egység csak új fogalmi nehézségek ábrán bontakozott ki. A legjobb elmélet, amivel rendelkezünk, a kvantumelektrodinamika sem teszi lehetővé, hogy a mikroszkópikus testek mozgását és kölcsönhatását úgy írjuk le, ahogyan azt a klasszikus fizikában tettük. Mert ezek az objektumok sem nem részecskék, sem nem hullámok, bár egyes esetekben az egyik, más-kor a másik jellegük domborodik ki. Olyan kísérlet, amelyet a *hullám-természet* kimutatására terveztek (ilyen a két-réses interferencia-kísérlet), nem tárgyalható részecske fogalommal. Hasonlóképpen az a kísérlet, amely a *részecske-természetet* emelik ki, (ilyen pl. a Compton-szórás), nem szemléltethető a hullámok fogalomrendszerével. Bohr (1928) felismerve a természetnek ezt a lényeges vonását, megfogalmazta az atomi szinten érvényesülő **komplementaritás elvet**.

A BOHR-FÉLE KOMPLEMENTARITÁSI ELV

A kvantum jelenségek körében a hullám és a részecske tulajdonságok egymást kiegészítik. Bár az egyik leírási mód választása eleve kizárja másik egyidejű (szimultán) használatát, a teljes megértéshez mindkettőre szükség van.

Ennek az elvnek a magyarázatára Bohr egy analógiát ajánlott. Egy pénzérme teljes leírásához mindkét oldalát jellemezni kell, mégis az a helyzet, hogy egyszerre (szimultán) nem láthatjuk ugyanannak az érmenek mindkét oldalát. Bohr komplementaritási elve általánosan próbálja kifejezni, hogy miért érzünk dilemmát, amikor az atomi szinten a klasszikus fogalmakhoz próbálunk ragaszkodni.

Fogalmaink, gondolkodásunk és nyelvünk – szóval valójában mindaz, amit gyűjtőnéven józan észnek tekintünk – mind a tapasztalatainkban gyökerezik. A klasszikus fizika ennek a józan észnek egyik legmagasabb rendű produktuma. Az 1920-as években azonban a mikrovilágra és a relativisztikus tartományokra vonatkozó tapasztalataink egyre többször ütköztek olyan megfigyelésekbe, amelyek szemben álltak a klasszikus fogalmakkal, és az ún. „józan ész” határait jócskán ki kellett tolni, elveit meg kellett változtatni, hogy ezeket az új típusú tapasztalatokat befogadhassa. A természet azonban folyamatosan szolgál rejtélyes esetekkel és kihívásokkal. Milyen meglepő új fogalmakat és elgondolásokat kell majd befogadnunk, hogy a jövőbeli új talányokat megfejthessük?

43.10 A kvantumelmélet fejlődésének rövid időrendi táblázata

- 1900 A fekete-test sugárzásának magyarázata az energia kvantálásával.
Max Planck (Nobel-díj 1918).
- 1900 A katódsugárzás elektronok áramlása.
Philip von Lenard (Nobel-díj 1905)
- 1905 A fényelektromos jelenség magyarázata.
Albert Einstein (Nobel-díj 1921)
- 1905 A speciális relativitáselmélet,
Albert Einstein
- 1907- A szilárd testek fajhőjének magyarázata az energia kvantálásával.
1911 *Albert Einstein*
- 1911 Az atommag kiterjesztésére vonatkozó becslés.
Ernest Rutherford (kémiai Nobel-díj 1908)
- 1913 A hidrogén-atom első kvantált modellje.
Niels Bohr (Nobel-díj 1922)
- 1916 A fotoelektromos hatásra vonatkozó kísérleti vizsgálatok.
Robert Millikan (Nobel-díj 1923)
- 1923 A fénykvantum és az elektron ütközésének felfedezése és magyarázata.
Arthur Compton (Nobel-díj C.T. Wilson-nal megosztva 1927)
- 1924 Hipotézis arra vonatkozóan, hogy az elektronhoz hullám tartozik, melynek hullámhossza $\lambda = h/p$.
Louis de Broglie. (Nobel-díj 1929)
- 1925 A hullámmechanika matematikai elmélete.
Erwin Schrödinger. (Nobel-díj, P.A.M. Dirac-kal megosztva 1933)
- 1925 A mátrix-mechanika matematikai elmélete.
Werner Heisenberg. (Nobel-díj 1932)
- 1925 A kizárási elv.
Wolfgang Pauli. (Nobel-díj 1945)
- 1926 A hullámfüggvény statisztikus értelmezése.
Max Born. (Nobel-díj 1945)
- 1927 A határozatlansági összefüggés.
Werner Heisenberg.
- 1928 Relativisztikus kvantummechanika és a pozitron létének megjósolása.
Paul A.M. Dirac. (Nobel-díj E. Schrödingerrel megosztva, 1933)
- 1932 A pozitron megfigyelése.
Carl Anderson. (Nobel-díj, Victor Hess-szel megosztva: 1936)
- 1948 A kvantumelektrodinamika elméletének kiépítése.
Sin-Itiro Tomonaga, Julian Schwinger és Richard P. Feynman. (Nobel-díj 1965)

Összefoglalás

A hidrogén-atom Bohr-modellje az alábbi feltevésekre épül:

- (1) Az elektron a proton körül körpályán mozog. A centripetális erőt a Coulomb-erő létesíti.
- (2) Vannak megengedett E_n energiájú állapotok, amelyekben az elektron sugárzás nélkül mozog.
- (3) A megengedett energiájú állapotok azok, amelyekre teljesül, hogy

$$mvr = n\hbar$$

- (4) A megengedett energiaállapotok közötti átmenet hf energiájú foton elnyelésével vagy kibocsátásával jár, ahol

$$hf = E_{\text{végső}} - E_{\text{kezdeti}}$$

A megengedett energiaállapotokban a pályasugarak és az energiák rendre

$$\left. \begin{aligned} r_n &= \frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi m Z e^2} = (0,0529 \text{ nm}) n^2 \\ E_n &= -\frac{m Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \end{aligned} \right\} (n = 1, 2, 3, \dots)$$

A Bohr-féle korrespondencia-elv:

Minden új elméletnek a megfelelő klasszikus elméletre kell redukálnia, amikor a klasszikus elméletnek megfelelő körülményekre alkalmazzuk.

Bizonyos feltételek mellett a részecskék hullámtulajdonságokat mutatnak, melyeknél a hullámhossz a

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

de Broglie-féle hullámhossz és p a részecske impulzusa. A V potenciálkülönbség hatására felgyorsított elektronok esetében

$$\lambda = \frac{1,226 \text{ nm}}{\sqrt{V}} \quad (\text{ahol } V \text{ feszültséget voltokban mérjük}).$$

A hullámmechanika vagy kvantummechanika az elmélet, amit Ervin Schrödinger (és ettől eltérő matematikai formában Werner Heisenberg) épített ki, és amely az anyagoknak és a sugárzásnak mind a részecske, mind a hullám jellegét magába foglalja. Az elmélet a ψ függvény meghatározására alkalmas (parciális) differenciálegyenleten alapul. Born értelmezése szerint

$$|\psi|^2 \Delta x = \begin{cases} \text{annak a valószínűsége, hogy a részecskét} \\ \text{a } \Delta x \text{ méretű tartományban találjuk.} \end{cases}$$

Heisenberg határozatlansági relációja alapvető korlátot ró ki arra a pontosságra, mellyel bizonyos változó párok egyszerre mérhetőek. A bizonytalanságok szorzata nem lehet kisebb, mint \hbar . Az alábbiakban felsorolunk néhány ilyen változó párt:

hely és impulzus: $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$

energia és idő: $\Delta E \Delta t \geq \hbar$

szög és impulzusnyomaték: $\Delta \phi \Delta L_\phi \geq \hbar$

AZ IDŐTŐL

FÜGGETLEN

SCHRÖDINGER

EGYENLET

(egy dimenzióban):

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left(\frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \right) \psi = 0$$

ahol

$$\psi(x) = \psi_{\text{max}} \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

A hullámfüggvényt úgy normalizáljuk, hogy a ψ_{max} értékét a

$$\int_{\text{az egész térre}} |\psi|^2 dV = 1$$

összefüggésből határozzuk meg. Ha a részecske D távolságban elhelyezett merev falakkal határolt dobozba van bezárva, akkor a hullámfüggvényeket abból a követelményből lehet meghatározni, hogy a hullámfüggvényeknek a falaknál csomópontjuknak kell lenniük.

DOBOZBA

ZÁRT

RÉSZECSE

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{D}} \sin\left(\frac{n\pi x}{D}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{8mD^2} \right) n^2$$

ahol az x az egyik faltól mért távolság.

A részecske ψ hullámfüggvénye behatolhat olyan térrészekbe is, amelyek a klasszikus elmélet szerint a részecske számára tiltottak (ezeken a helyeken az $E < U$). Ez a potenciálgátakon való átalagutazáshoz vezet (lásd a 43B-23 problémát), ahol a derékszögű potenciálfalon való átmenet valószínűségét határozzuk meg).

Bohr komplementaritási elve:

A kvantumos tartományban a részecske- és a hullámtermészet kiegészíti egymást. Jóllehet az egyiknek megfelelő leírás választása kizárja a másik egyidejű alkalmazását, mindkét szempont szükséges a teljes megértéshez.

Kérdések

1. Hogyan alkalmazható a korrespondencia-elv az Einstein-féle speciális relativitáselméletre?
2. Mik lennének a megfigyelhető következményei annak, hogyha a Planck-állandó $0,1 \text{ J}\cdot\text{s}$ lenne?¹¹
3. Miben hasonlítanak egymáshoz az anyaghullámok és az elektromágneses hullámok? Miben különböznek?
4. Miben hasonlítanak egymáshoz a nagy energiájú fotonok és elektronok? Miben különböznek?
5. Jelenti-e a részecskék hullám-természete azt, hogy nyitott ajtón („résen”) bedobott baseball-labda (részecske) az áthaladás során elhajlik?
6. A részecskék hullámtermészetének koncepciója miként mond ellent a hidrogénatom Bohr-féle modelljének?
7. Próbáljuk meg megmagyarázni a következő megállapítást! Ha elektronnyalábot alkalmazunk két réses-interferencia-mintázat előállítására, akkor minden elektronnak mindegyik résen át kell haladnia.
8. A határozatlansági reláció miképpen közvetlen következménye a részecskék hullámtermészetének?
9. Mennyiben összeférhetetlen a határozatlansági relációval de Broglie koncepciója, mely szerint a hidrogén-atomban az elektron a pálya mentén álló hullámot alakít ki?
10. Mi a szerepe a komplementaritási elvnek az olyan kísérletekben, amelyek az elektron-diffrakciót bizonyítják?
11. Dobozba zárt részecskének valószínűségi-sűrűsége (43-18 ábra) bizonyos pontokban zérus lehet. Át tud-e hatolni a részecske ezeken a pontokon?

Feladatok

43.2 Az atommodellek

43A-1 Mielőtt Bohr kidolgozta volna modelljét a hidrogén-atomra, J. R. Rydberg felállított egy empirikus szabályt, mely megadja a λ hullámhossz értékét arra a sugárzásra, mely az atomnak az n_i kezdeti állapotból az n_f végállapotába történő átmenetekor keletkezik:

$$\text{A RYDBERG-FORMULA: } \frac{1}{\lambda} = R \left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right],$$

ahol R a Rydberg-állandó. Felhasználva azt a tényt, hogy a Balmer-sorozatban az $n = 3$ állapotból az $n = 2$ állapotba történő átmenet során jön létre a H_α vonala, melynek hullámhossza $656,3 \text{ nm}$, mutassuk meg, hogy a hidrogén esetén $R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$.

43A-2 Amikor a spektroszkópikusok a hullámhossztáblázatokat készítik, a 200 nm -nél nagyobb hullámhosszakat úgy adják meg, mintha az levegőben lenne értendő, hiszen általában ténylegesen úgy is mérik. (A 200 nm -nél kisebb hullámhosszú sugarak a levegőben elnyelődnek, így a táblázatban a vákuumban mért értékeik szerepelnek.) A H_α vonalnak (a Balmer-sorozatból) a hullámhossz-adata $656,28 \text{ nm}$ értékkel szerepel a táblázatban. Számítsuk át ezt az értéket vákuumbelire, öt jegyre!

43B-3 Vezessük le a hidrogén-színkép hullámhosszaira az alábbi képletet. Ezek azokhoz a színképvonalakhoz tartoznak, amelyeket az elektron akkor bocsát ki, amikor az n_i kezdeti állapotból az n_f végállapotba megy át!

$$\lambda = 91,13 \text{ nm} \left(\frac{n_i^2 n_f^2}{n_i^2 - n_f^2} \right)$$

43B-4 Tekintsünk egy hidrogén-atomot alapállapotban! Számítsuk ki a következő mennyiségeket (elektronvoltokban)! (a) az elektron kinetikus energiáját (b) a potenciális energiáját (c) a teljes energiáját és (d) azt az energiát, amely ahhoz szükséges, hogy az elektront a protontól teljesen elszakítsuk!

43B-5 Oldjuk meg az előbbi problémát az egyszerűen ionizált hélium-atomra! (Ez olyan hélium-atom, amelyről egy elektront eltávolítottunk.)

43B-6 Határozzuk meg a színképvonalak Paschen-sorozatában a hidrogén-atom legnagyobb és a legkisebb hullámhosszúságú színképvonalainak hullámhosszát!

43B-7 Tekintsünk egy ideális, merev kétatomos molekulát, két egyenlő nagy pontszerű m tömeggel, amelyek $2a$ (állandó) távolságban helyezkednek el. A molekula forog a tömegek közti távolság felezőpontján átmenő és arra merőleges tengely körül. Feltéve, hogy az impulzusnyomatékot kvantálni kell úgy, ahogyan a hidrogénatom Bohr-féle modelljében, mutassuk meg, hogy a rotációs (forgási) energiák szintjeit az

$$E_n = n^2 h^2 / 16 \pi^2 m a^2 \text{ összefüggés adja meg.}$$

43B-8 Amikor a hidrogén-atom az $n = 3$ kezdeti állapotból az $n = 1$ végállapotba megy át, egy fotont bocsát ki. Az ólom kilépési munkája $4,25 \text{ eV}$. Adjuk meg azt a maximális kinetikus energiát, amire a fotoelektron szert tehet (elektronvoltokban), ha ilyen foton löki ki az ólomból!

¹¹ A relativitáselmélet és a kvantumelmélet különös következményeiről szórakoztató képet ad George Gamow „*Mr. Tompkins in Wonderland*” (Mr. Tompkins a csodák országában) c. könyvében McMillan 1940. Ebben a világban $c = 10$ mérföld/óra, (kb $1,6 \text{ km}/\text{ó}$) $h = 1 \text{ erg}\cdot\text{s}$ és $G = 10^{12}$ -szerese a tényleges értéknek). A könyvnek a folytatása: „*Mr. Tompkins Explores the Atom*” (Mr. Tompkins felfedezi az atomot) McMillan 1940. Magyarul G. Gamow: Tompkins úr kalandjai a fizikával (Mr. Tompkins in paperback) Gondolat 1976.

43.4 A de Broglie-hullámok

43.5 A Davisson-Germer-kísérletek

43A-9 Egy elektronmikroszkóp 50 keV-es elektronokat használ. Hányszor kisebb ezeknek az elektronoknak a de Broglie-hullámhossza, mint az 500 nm hullámhosszú látható fényé?

43A-10 Egy 1 g tömegű részecske és egy elektron 150 m/s-os sebességgel mozog. Számítsuk ki de Broglie-hullámhosszukat.

43A-11 Számítsuk ki a de Broglie-hullámhosszat olyan elektron esetére, melyet nyugalomból 50 V-os potenciálkülönbség gyorsított fel!

43A-12 Egy mozgó neutron de Broglie-hullámhossza 0,2 nm. Adjuk meg (a) a sebességét, és (b) a mozgási energiáját eV egységekben!

43A-13 Az alfa-részecske hélium-atommag, melynek tömege 4 u (ahol u az atomi tömeg egység $1 u = 1,661 \times 10^{-27}$ kg). Számítsuk ki az alfa részecskéhez tartozó de Broglie-hullámhosszat, ha az alfa részecske mozgási energiája 2 MeV!

43A-14 Elektronmikroszkóp 0,01 nm de Broglie-hullámhosszúságú elektronok alkalmazásával igen nagy felbontást ér el. Magyarázzuk el, miért nem tervezhetünk fotonmikroszkópot, mely ilyen nagyságrendbe eső hullámhosszúságú fotonokat alkalmaz?

43A-15 Az A elektron úgy mozog, hogy de Broglie-hullámhossza kétszer akkora, mint B-é. Adjuk meg mozgási energiájuk K_A/K_B hányadosát!

43B-16 Magyarázzuk meg kvalitatív módon, miért nem jelentősek (nem nyilvánulnak meg) az elektronszórás másodrendű csúcsai a 43-13 ábrán mutatott elektron-energiák esetében!

43B-17 Tekintsük a 60 eV energiájú elektronokkal végzett Davisson-Germer kísérletet (43-13 ábra) a) Energiájuk alapján mekkora az elektronok de Broglie hullámhossza? b) Milyen szórási szög várható ebben az esetben?

43B-18 Köbös kristályra a kristály felületéhez képest 35° beesési szöggel „fehér” röntgennyaláb (ami sok különböző hullámhosszúságú sugarat tartalmaz) esik. A legnagyobb hullámhosszúságú röntgensugár, ami szimmetrikusan (ugyanabban szögben) verődik vissza, 0,330 nm-es. (a) Adjuk meg a szomszédos atomsíkok távolságát a kristályban. (b) A röntgennyaláb helyett elektronnyalábot használva mekkora lenne azoknak az elektronoknak a minimális energiája (elektronvoltokban), amelyek ugyancsak erős visszaverődést szenvednének ebben a szögben?

43B-19 Elektronokat gyorsítunk V feszültségkülönbséggel, majd kristályport tartalmazó céltárgyra irányítjuk őket. A rácsban az atomsíkok legnagyobb távolsága 0,283 nm. Adjuk meg, mekkora az a legkisebb V -érték, amelynél olyan Bragg reflexió lép fel, hogy a beeső nyalábtól mérve 130° szögben verődnek vissza az elektronok.

43.6 A hullámmechanika

43.7 Alaguteffektus

43B-20 Szabad elektron hullámfüggvényének helytől függő része $\Psi(x) = A \sin(7 \times 10^9 x)$ SI-rendszerben. Adjuk meg (a) az elektron de Broglie-hullámhosszát, (b) az elektron sebességét és (c) a mozgási energiáját elektronvoltokban!

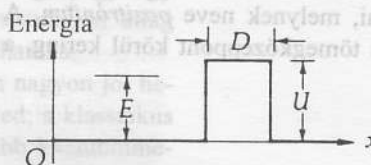
43B-21 Egy részecske egydimenziós mozgást végez egymástól D távolságra lévő két merev fal között. A valószínűségi-sűrűségfüggvény $P = |\psi|^2$, amit a (43-29) képlet ad meg. Mutassuk meg, hogy az eloszlás minimumai közti Δx távolság D/n !

43B-22 Egy 80 pg tömegű porszem két, egymástól 0,6 mm távolságra lévő merev fal közé zárva lebeg a levegőben. A porszem 5 perc alatt jut el az egyik faltól a másikig. Írjuk le ezt a mozgást kvantummechanikai szempontból úgy, mint egy egydimenziós dobozba zárt részecske mozgását és adjuk meg (a) ennek az energiaállapotnak az n kvantumszámát. (b) Magyarázzuk meg, miért nem lehet kísérletileg meghatározni a kvantumszám értékét erre az állapotra. (c) Most tegyük fel, hogy ez a porszem a lehető legalacsonyabb ($n = 1$) energiaállapotban van. Adjuk meg (években) mennyi időt venne igénybe, hogy az egyik faltól a másikig eljusson.

43B-23 A T átérésztési tényező azt adja meg, mekkora a valószínűsége annak, hogy egy m tömegű részecske a 43-23 ábrán bemutatott derékszögű potenciálfalhoz közeledve „átalagútozik” a potenciálfalon.

$$T = e^{-2kD} \quad \text{ahol} \quad k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m(U-E)}{h^2}}$$

Vizsgáljunk olyan potenciálfalat, melyre $U = 5$ eV és $D = 950$ pm (pikométer). Tegyük fel, hogy egy $E = 4,5$ eV energiájú elektron közeledik a potenciálfalhoz. Klasszikusan az elektron nem képes áthaladni a potenciálfalon, mert $E < U$. A kvantummechanika szerint azonban véges valószínűsége van az átalagútozásnak. Számítsuk ki ezt a valószínűséget!



42-23 ábra

A 43B-23 és 43B-26 közötti feladatokhoz.

43B-24 Az előző problémánál számítsuk ki, mekkora a valószínűsége annak, hogy egy 4,5 eV energiájú proton átalagútozik a potenciálfalon.

43B-25 A 43B-23 problémában mennyire kellene a potenciálfal D szélességét megnövelni ahhoz, hogy a beeső 4,5 eV energiájú elektron esélye az átalagútozására egymilliomod legyen!

43B-26 (a) A 43B-23 problémában számítsuk ki a potenciálfalhoz közeledő 4,5 eV energiájú elektron de Broglie-hullámhosszát. (b) A 950 pm széles potenciálfal hányadrésze a de Broglie-hullámhossznak? (c) Ismételjük meg a számítást a 4,5 eV energiájú proton esetére!

43.8 A határozatlansági összefüggés

43B-27 Egy 9 g tömegű golyó 2 m/s sebességgel gurul az asztalon. (a) Ha impulzusát 0,1% pontossággal mérjük, akkor helyének egyidejű mérésében mekkora a határozatlanság? (b) Ismételjük meg a számítást egy ugyanilyen sebességgel haladó elektron esetére! Kommentáljuk az eredményeket!

43B-28 Egy atomot az 1,8 eV energiával az alapállapot fölé gerjesztve, az atom átlagosan 2×10^{-6} s időt tölt el, mielőtt alapállapotba kerülne vissza. (a) Adjuk meg a kibocsátott foton frekvenciáját! (b) Adjuk meg a foton hullámhosszát! (c) Adjuk meg a foton energiájának bizonytalanságát!

43B-29 A π^0 mezon – egy instabilis részecske – nagy energiájú részecske-ütközések során keletkezik. Tömegenergia-egyenértéke 135 MeV, átlagos élettartama csak $8,7 \times 10^{-17}$ s, míg el nem bomlik két gamma fotonra. A határozatlansági elv alapján adjunk becslést a tömegmeghatározás $\Delta m/m$ relatív hibájára!

Vegyes feladatok

43C-30 Negatív μ -mezonnak (amit *müonnak* neveznek) (-e) töltése és kb 206,8 m_e tömege van. Tekintsük azt a hidrogénszerű magot, amelyet egy proton és egy müon alkot! (a) Feltéve, hogy a proton mozdulatlan, adjuk meg az $n = 1$ Bohr-pálya sugarát erre a „müonatomra”. (b) Mekkora az alapállapot energiája elektronvoltokban? (c) Adjuk meg, mekkora az $n = 2$ kezdeti és $n = 1$ végállapot közti átmenet során kibocsátott sugárzás hullámhossza!

43C-31 Az elektron és a pozitron (melynek tömege egyenlő az elektronéval, csak a töltése pozitív) kötött állapotot képes alkotni, melynek neve *pozitronium*. A két részecske a közös tömegközéppont körül kering, a

teljes impulzusnyomatékot a Bohr-feltételnek megfelelően kvantálni kell. Vezessünk le általános képleteket (a) a kvantált r pályasugarakra és (b) adjuk meg az E_n energiaállapotokhoz tartozó energiákat elektronvoltban. (c) Számítsuk ki, hogy mekkora legnagyobb és legkisebb hullámhosszú sugárzást képes kibocsátani az alapállapotba visszatérő pozitronium.

43C-32 Tekintsünk egy olyan *elképzelt* atomot, melynek magva neutron. A neutron körül keringő elektront a két test közötti gravitációs erő tartja pályáján. A Bohr-atomnál használt elemzéshez hasonló módon határozzuk meg (a) a pályasugarakat a (43-7) képletnek megfelelő formula szerint és (b) az energiaállapotokat a (43-10) képletnek megfelelően.

43C-33 Amikor egy atom fotont bocsát ki, az energia valamilyen hányada az atom visszalökődésére fordítódik. Mutassuk meg, hogy ez a hányad közelítőleg $E/2mc^2$, ahol E az átmenet energiája és m az atom tömege.

43C-34 Egy 50 kg tömegű mesterséges hold 2 órás keringési idővel körpályán kering a Föld körül. (a) A Bohr-féle kvantumfeltételeket alkalmazva az impulzusnyomatékra, számítsuk ki erre a pályára az n kvantumszámot. (b) Adjuk meg ezen állapot és a következő nagyobb sugarú megengedett pálya közötti távolságot. Kísérletileg ki lehetne-e mutatni ezt a távolságot?

43C-35 A (43-9) képletből kiindulva vezessük le a hidrogén Balmer-sorozatára a (43-1) empirikus képletet!

43C-36 Az egyszerűen ionizált hélium-atom, melynek jele HeII) egy elektrontól és egy +2e töltésű magból épül fel. Alkalmazzuk a Bohr-elméletet és határozzuk meg ennek az ionizált atomnak (a) az E_n megengedett energiáit és (b) az elektronpályák r_n sugarait. (c) Mutassuk meg, hogy a hidrogén-spektrum minden vonalának megfelel egy vonal az ionizált He színképében. Mi az összefüggés az egymásnak megfelelő vonalak n -értékei között? (Figyelem: ezek a vonalak az eredeti Bohr-elmélet szerint azonosak. Valójában kissé eltérnek, mert az R Rydberg-állandó enyhén függ a mag tömegétől).

43C-37 A korrespondencia-elvet illusztrálja az, hogy a relativisztikus kinetikus energia $K = mc^2[1/(1-v^2/c^2)^{1/2} - 1]$ a $K = mv^2/2$ klasszikus alakjára redukálódik, ha $v \ll c$. Bizonyítsuk be, hogy ez az állítás igaz!

- 42A-21 128 MeV
 42B-23 A válasz adott.
 42B-25 A válasz adott.
 42C-27 A válasz adott.
 42C-29 A válasz adott.
 42C-31 38,3 m
 42C-33 A válasz adott.
 42C-35 A válasz adott.
 42C-37 b) $2,27 \times 10^{-13} \text{ J/m}^3$
 42C-39 A válasz adott.
 42C-41 288 keV
 42C-43 A válasz adott.
 42C-45 A válasz adott.
 42C-47 A válasz adott.
 42C-49 A válasz adott.

XLIII. Fejezet

- 43A-1 A válasz adott.
 43B-3 A válasz adott.
 43B-5 A válasz adott.
 43B-7 A válasz adott.
 43A-9 $1/9,12 \times 10^4$
 43A-11 0,173 nm
 43A-13 10,2 fm
 43A-15 $\frac{1}{4}$
 43B-17 a) 0,158 nm b) $47,2^\circ$
 43B-19 5,71 V
 43B-21 A válasz adott.
 43B-23 $1,03 \times 10^{-3}$
 43B-25 956 pm
 43B-27 a) $5,86 \times 10^{-30} \text{ m}$ b) 5,79 cm
 43B-29 A válasz adott.
 43C-31 a) $r_n = (4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2)n^2$
 b) $E_n = -(6,80 \text{ eV})/n^2$ c) 243 nm, 182 nm
 43C-33 A válasz adott.
 43C-35 A válasz adott.
 43C-37 A válasz adott.

XLIV. Fejezet

- 44A-1 7
 44B-3 $54,7^\circ$ és $125,3^\circ$
 44B-5 $32,3^\circ$, $59,5^\circ$, $80,3^\circ$, $99,7^\circ$, $120,5^\circ$, $147,7^\circ$
 44B-7 32 állapot
 44B-9 b) $9,42 \times 10^{-25} \text{ J}$ c) $3,34 \times 10^{-49} \text{ J}$

- 44B-11 25,2
 44B-13 Ge; $[Zn]3d^{10}4s^24p^2$
 44B-15 A válasz adott.
 44A-17 22,0 kV
 44B-19 A válasz adott.
 44B-21 3,04 foton

- 44B-23 a) 4,20 mm b) $4,53 \times 10^{33}$
 c) $3,81 \times 10^{31}$
 44C-25 $d = (\mu \cos\theta)(dB/dz)(x/v)^2(1/M)$
 44C-27 a) $E_1 = -15,5 \text{ eV}$, $E_2 = -7,75 \text{ eV}$, $E_3 = -5,16 \text{ eV}$
 c) 479 nm
 44C-29 a) Kálium b) $[3p^64p^1]$, $[3p^54p^2]$
 44C-31 b) $3; 4d_{5/2} - 3p_{1/2}$
 44C-33 A válasz adott.
 44C-35 A válasz adott.
 44C-37 a) $(1/96\pi a^5)r^2 e^{-r/a}$
 b) $(1/24a^5)r^4 e^{-r/a}; 4a$
 44C-39 a) $1,18 \times 10^{-33}$ b) 32 800 K
 44C-41 b) -325 000 K

XLV. Fejezet

- 45A-1 13,7
 45A-3 5,68
 45A-7 27,9 perc
 45B-9 1 curie
 45B-11 $1,78t_0$
 45B-13 0,565 cm
 45B-15 $1,71 \times 10^{14} (!)$
 45B-17 A válasz adott.
 45B-19 1,37 MeV
 45B-21 A válasz adott.
 45A-23 38,8 keV
 45B-25 a) 0,144 MeV b) 0,288 MeV
 45C-27 3785 év
 45C-29 a) 86 s; $8,1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$
 45C-31 A válasz adott.
 45C-33 1,61 W
 45C-35 A válasz adott.
 45C-37 A válasz adott.
 45C-39 a) 0,931 MeV, 5,49 MeV, és 12,86 MeV
 b) 24,7 MeV c) 27,7 MeV
 45C-41 A válasz adott.
 45C-43 0,247 GeV mindkét részecske esetén
 45C-45 7,8 cm