1. A KLASSZIKUS FIZIKA ÉRVÉNYESSÉGÉNEK HATÁRAI

A XIX. század végén mindössze néhány probléma maradt megoldatlanul a fizika egyes fejezeteiből. Ilyen volt például a hőmérsékleti sugárzás problémaköre, a szilárd anyag fajhőjének viselkedése a hőmérséklet függvényében, és egyes anyagok ún. láthatatlan sugárzásának megmagyarázása. Abban azonban szinte minden fizikus egyetértett, hogy ezen problémák megértése (azaz a megfigyelt jelenségeknek matematikai formulákba való sűrítése) a klasszikus mechanika, az elektrodinamika, a termodinamika, vagy a statisztikus mechanika jól kidolgozott keretein belül lehetséges, és csupán idő kérdése a megfelelő válasz megadása.

Ezzel szemben, éppen ezen megválaszolatlan kérdések voltak azok, amelyek mintegy kikényszerítették egy új gondolkodásmód, egy új tudományág létrejöttét, amelyet ma KVANTUMMECHANIKA névvel illetünk. A kvantummechanika tudománya nyitott utat az anyag mikrostruktúrájának megértéséhez, feltárásához, a világról alkotott képünk módosulásához.

1.1. HŐMÉRSÉKLETI SUGÁRZÁS (Rayleigh-Jeans-, Wien-, Planck-féle sugárzási törvény).

Feketetest: minden beeső fényt elnyel $\Rightarrow$ minden anyagi testnél erősebben sugároz izzítás hatására. (Egy lehetséges megvalósítása: lyuk egy a oldalú üreges fémkockán.)

Kérdés: adott T hőmérsékleten mennyi energiát sugároz ki a feketetest egységnyi térfogata a fény egységnyi frekvencia-intervallumára vonatkoztatva, azaz

$$U(\nu, T) = ?$$

A fény elektromágneses hullám λ hullámhosszal, ν frekvenciával ($\lambda\nu = c$, $c = 2,9979 \times 10^8\, m\, s^{-1}$ a fénysebesség.) Az üregben állóhullámok alakulnak ki. Állóhullámokat egydimenzióban így írhatjuk: $\psi(x) \sim \sin kx$, ahol $\psi(0) = \psi(a) = 0$ a határfeltételek miatt.

Tehát a k hullámszámra a következő feltétel adódik:

$$ka = n\pi \rightarrow k = n\frac{\pi}{a} = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\frac{\nu}{c}, \qquad n = 0, 1, ...$$

A feketetestet **üregrezonátor**ként foghatjuk fel, amelyben térbeli állóhullámok alakulnak ki. Ezek hullámszám vektorának három komponensére a következő feltételek adódnak:

$$k_x a = n_1\pi, \qquad n_1 = 0, 1, ...$$

$$k_y a = n_2\pi, \qquad n_2 = 0, 1, ...$$

$$k_z a = n_3\pi, \qquad n_3 = 0, 1, ...$$

azaz $\Rightarrow k^2 = \frac{\pi^2}{a^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = 4\pi^2\frac{\nu^2}{c^2}$

Meghatározzuk a lehetséges (n_1, n_2, n_3) **módusok** Z számát $\nu' < \nu$ esetére.

Jelölés: $R^2 \equiv n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = (\frac{2\pi\nu}{c}\frac{a}{\pi})^2$

A teljes térfogatban $\nu-$nél kisebb módusok Z száma az R sugarú gömb térfogatának nyolcada, szorozva 2-vel (a kétféle módus miatt):

$$Z(\nu) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3.$$

A ν és $\nu + d\nu$ közötti módusok dZ száma $V = a^3$ térfogatban:

$$dZ(\nu) = 8\pi(\frac{a}{c})^3\nu^2 d\nu = \frac{8\pi}{c^3} V\nu^2 d\nu$$

Mennyi energiát képviselnek ezek a módusok (oszcillátorok)?

Ha egy oszcillátorra jutó átlagos energia $\bar{\epsilon}$, akkor a ν és $\nu + d\nu$ közötti frekvencia intervallumban térfogategységenként

$$dW = \frac{dZ}{V}\bar{\epsilon} = \frac{8\pi}{c^3}\bar{\epsilon}\nu^2 d\nu \equiv U(\nu, T)d\nu$$

energia van, azaz

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3}\bar{\epsilon}\nu^2. \tag{1}$$

A statisztikus mechanika képes az

$$\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}(T) = E_{tot}/N_{tot}$$

átlagenergia meghatározására hőmérsékleti egyensúly esetén. Legyen ui. az N_{tot} számú *megkülönböztethető* objektum (oszcillátor) közül N_n számúnak ϵ_n energiája és *tegyük fel,* hogy

$$\epsilon_n = n\,\varepsilon_0, \quad n = 1, 2, ...$$

(Vegyük észre, hogy $\varepsilon_0 \to 0$ határátmenet esetén az egyes módus-csoportok közötti energia *folytonosan* változik, amint azt megszámlálhatóan végtelen számú módus esetén el is várjuk első pillanatban.)

A Boltzmann eloszlás szerint (k_B a továbbiakban a Boltzmann állandót jelöli: $k_B = 1,38\times10^{-23}J/^oK = 3,29 \times 10^{-24}cal/^oK$):

$$\frac{N_n}{N_{tot}} = \frac{e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}}$$

A rendszer egyetlen objektumára jutó átlagos energia ($x = 1/k_B T$):

$$\bar{\epsilon}(T) = \frac{E_{tot}}{N_{tot}} = \sum_n \frac{N_n}{N_{tot}}\epsilon_n =$$

$$\frac{\sum\limits_{n=0}^{\infty}\epsilon_n e^{-\epsilon_n x}}{\sum\limits_{n=0}^{\infty} e^{-\epsilon_n x}} = \frac{\sum\limits_{n=0}^{\infty} n\varepsilon_0 e^{-n\varepsilon_0 x}}{\sum\limits_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon_0 x}} = \frac{-\partial/\partial x \sum\limits_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon_0 x}}{1+e^{-\varepsilon_0 x}+(e^{-\varepsilon_0 x})^2+...} = \frac{-\partial/\partial x[1/(1-e^{-\varepsilon_0 x})]}{1/(1-e^{-\varepsilon_0 x})} = \frac{\varepsilon_0 e^{-\varepsilon_0 x}/(1-e^{-\varepsilon_0 x})^2}{1/(1-e^{-\varepsilon_0 x})} = \frac{\varepsilon_0 e^{-\varepsilon_0/k_B T}}{1-e^{-\varepsilon_0/k_B T}} =$$

$$\bar{\epsilon}(T) = \frac{\varepsilon_0}{e^{\varepsilon_0/k_B T} - 1} \tag{2}$$

$$= \frac{+\varepsilon_0}{\varepsilon_0/k_B T + \frac{1}{2}(\varepsilon_0/k_B T)^2 + ...} = \frac{k_B T}{1 + \frac{1}{2}\varepsilon_0/k_B T + ...}$$

Klasszikus határátmenet ($\varepsilon_0 \to 0$) esetén: $\bar{\epsilon}(T) = k_B T$ (ekvipartició tétele!), azaz

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3}k_B T\nu^2$$

Ez a Rayleigh-Jeans-féle sugárzási törvény, amely csak kis ν-kre érvényes, ui. a kisugárzott összenergiára ($E_{tot} = \int_0^\infty U(\nu, T)d\nu = \infty$) végtelent ad, ami nyilvánvaló ellentétben áll a tapasztalattal.

Planck gondolt arra 1900-ban, hogy a módusok átlagenergiája, $\bar{\epsilon}(T)$, esetleg túl erősen van képviselve a nagyfrekvenciás tartományban (s ettől lesz ∞ az energia), azaz $\bar{\epsilon}(T) < k_B T$ egyenlőtlenség teljesülésére lenne szükség nagy ν-k esetén. Ez elérhető az

$$\varepsilon_0 = h\nu$$

munkahipotézis bevezetésével (ld. (2) utáni sorfejtés nevezőjét). Ezzel

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3}\nu^3 \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \tag{3}$$

amely a **Planck-féle sugárzási törvény** ($h = 6,62620 \times 10^{-34}\, Js$ a **Planck állandó**).

$\nu \to 0$ esetén visszaadja a **Rayleigh-Jeans törvény**t:

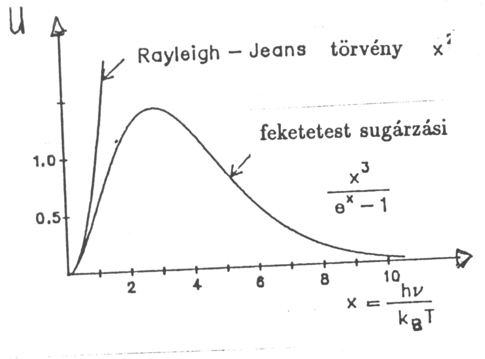
$$U \sim k_B T \nu^2,$$

$\nu \to \infty$ esetén pedig a **Wien-féle sugárzási törvény**t:

$$U \sim \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{k_B T}},$$

amely a sugárzás nagyfrekvenciás tartományában érvényes.

Ezenkívül megadja a ún. **Wien-féle eltolódási törvényt**:



1.Ábra. A hőmérsékleti sugárzás intenzitáseloszlás görbéje.

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

(λ_{max} jelenti az adott T hőmérséklethez tartozó maximális energiájú sugárzás hullámhosszát; a tétel bizonyításához nyilvánvalóan $dU/d\lambda = 0$-t kell meghatározni.)

Továbbá megkapjuk a **Stefan-Boltzmann törvény**t, amely kimondja, hogy a teljes kisugárzott energia arányos a hőmérséklet negyedik hatványával:

$$E_{tot} = \int_0^\infty U(\nu, T) d\nu = \text{const}\, T^4$$

$(=\frac{8\pi k_B^4}{c^3 h^3} T^4 \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1})$.

A Planck-féle sugárzási törvény teljes összhangban van a tapasztalattal. Amellett, hogy különféle gyakorlati alkalmazásai vannak (pl. csillagfelszín hőmérsékletek meghatározása), elvi jelentősége felbecsülhetetlen. Először jelent meg a Planck-féle **hatáskvantum**, a h állandó. Először jelent meg a kvantum fogalma kvantitativ módon, matematikai formulában. Az egyes frekvencia-módusok *legkisebb* energiája (az ε_0) nem lehet végtelenül kicsi, hanem véges adagokban, a frekvenciával arányos kvantumokban jelentkezik és a módusok energiái ennek az ε_0 kvantumnak egészszámú többszörösei lehetnek csak. A Planck-féle sugárzási törvény mérföldkő a fizika történetében, s egyben a kvantumfizika születését jelenti.

1.2. SZILÁRD ANYAG FAJHŐJE (Einstein). FÉNYELEKTROMOS JELENSÉG (Einstein). COMPTON EFFEKTUS (Compton).

a) SZILÁRD ANYAG FAJHŐJE. [Vizsgálata megmutatta, hogy a szilárd anyag energiája is kvantált, mint a fényé.]

Fajhő (C)**:** az az energia mennyiség, amelyet a gramm-molekulasúlynyi anyaggal közölni kell ahhoz, hogy hőmérsékletét egy fokkal emeljük (ekvivalens a molhővel):

$$C = \frac{\Delta E}{\Delta T} = \frac{dE}{dT}. \tag{4}$$

1 gramm-molekulasúlynyi anyagban $L = 6 \times 10^{23}$ molekula van.

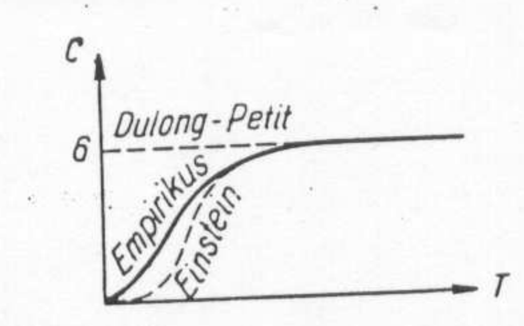
1 gramm-molekulasúlynyi kristályt $3L$ oszcillátorral jellemezhetjük.

1 gramm-molekulasúlynyi kristály (szilárd anyag) energiája:

$$E = 3L\bar{\epsilon}$$

($\bar{\epsilon}$ az egy módusra [oszcillátorra] jutó átlagenergia, L a Loschmidt szám).

Klasszikus határátmenetben ($\bar{\epsilon} \to k_B T$)



2.Ábra. Szilárd anyag molhőjének hömérsékletfüggése
1) a mérések szerint; *2)* a DULONG–PETIT szabályból; *3)* EINSTEIN szerint

$$E = 3Lk_BT.$$

A fajhő: $C = dE/dT = 3Lk_B \approx 6 cal/^oK$

Ez a **Doulong-Petit szabály**, amely kis hőmérsékletekre nem érvényes.

Hogy a $T \to 0$ viselkedést is megmagyarázza, Einsteinnek támadt az a merész gondolata 1906-ban, hogy alkalmazza a fény-oszcillátorokra egyszer már bevált eloszlási törvényt a szilárd testeket alkotó anyagi részecskék (hő-)rezgéseire is. Azaz

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_BT} - 1} = \frac{k_B T_0}{e^{T_0/T} - 1}, \tag{5}$$

ahol $h\nu/k_BT = T_0/T$ (most T a változó, $T_0 = h\nu/k_B$ pedig egy kristályra jellemző mennyiség).

Ezzel a fajhő:

$$C = 3\,L\,\frac{d\,\bar{\epsilon}}{d\,T}$$

$$= -\frac{3Lk_BT_0}{(e^{T_0/T} - 1)^2} e^{T_0/T} \left(-\frac{T_0}{T^2}\right) = 3Lk_B \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \frac{e^{T_0/T}}{(e^{T_0/T} - 1)^2} \tag{6}$$

Mármost két eset lehetséges:

$T >> T_0, \qquad C \to 3Lk_B(\frac{T_0}{T})^2 \frac{1}{(T_0/T)^2} = 3Lk_B \approx 6\, cal/^oK,$

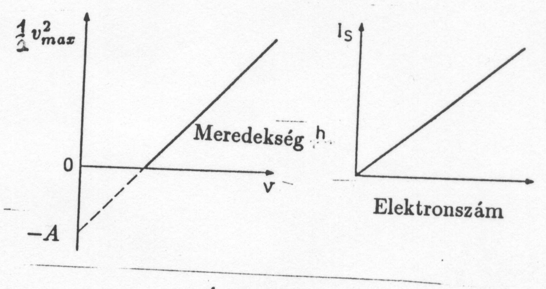
azaz visszakaptuk a Doulong-Petit szabályt; a másik eset

$T << T_0, \qquad C \to 3Lk_B(\frac{T_0}{T})^2 e^{-T_0/T},$

amely kvalitatíve megadja a fajhő viselkedését kis hőmérsékletektre (2. ábra).

b) FÉNYELEKTROMOS JELENSÉG. [Bizonyítékot szolgáltat "fényrészecskék" (**fotonok**) létezésére.]

Tapasztalati tény, hogy egyes anyagok (pl. Na, vagy Zn) fénnyel való besugárzás hatására *elektronokat* bocsátanak ki. A kibocsátott elektronok kinetikus energiájának maximuma független a fénysugár intenzitásától és csakis a fény frekvenciájától (ν) függ, méghozzá lineárisan. Másrészt a fényintenzitás növelésével egyenes arányban nő a kibocsátott elektronok száma. E tapasztalati tények vezették Einsteint 1905-ben arra a felismerésre, hogy a fény és az anyag elektronjai között egyedi ütközési folyamat játszódik le, amelyre az energiamérleg a következőképpen írható:



3.Ábra. A fotoeffektus kísérleti tapasztalati görbéi.

$$h\nu = \frac{1}{2}mv_{max}^2 + A. \tag{7}$$

A az ún. kilépési munkát jelenti, amely energia ahhoz szükséges, hogy az elektron kiszabaduljon a fémben kötött állapotából. A (7) összefüggés, amely teljes egyezésben áll a tapasztalattal, $E = h\nu$ energiamennyiséget tulajdonít az egyedi kölcsönhatási folyamatban résztvevő fényrészecskének. (vö. Planck $\varepsilon_0 = h\nu$ munkahipotézisével.)

Az egyedi elektronokkal kölcsönható fényrészecskéket Einstein **fotonoknak** nevezte el, és az ún. **tűsugárzás** (adott irányba haladó véges hosszúságú hullámvonulat) szemléleti képet fűzte a folyamathoz.

c) COMPTON EFFEKTUS (1923) [Bizonyítékot szolgáltat arra, hogy a fotonok $E = h\nu$ energiával és $\frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c}$ impulzussal rendelkeznek.]

A jelenség lényege abban áll, hogy anyagon való áthaladás (szóródás) révén a fény hullámhossza, ill. frekvenciája megváltozik (λ nő, ν csökken). A megváltozás mértéke csupán a szórási szög (θ) függvénye.

Képletbe sűrítve a tapasztalati tényeket, írhatjuk:

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_0(1 - \cos\theta), \tag{8}$$

ahol $\lambda_0 = h/mc$ a szóró anyagtól független fizikai álladó (m az elektron nyugalmi tömege).

(8) frekvenciákra érvényes alakja:

$$\Delta\nu = \nu_2 - \nu_1 = -\frac{h\nu_1^2}{mc^2}(1 - \cos\theta), \tag{9}$$

Mindkét tapasztalati képlet megmagyarázható a foton és a szóró anyag egy elektronja közötti kölcsönhatásra felírt energiamérleg és impulzusmérleg segítségével.

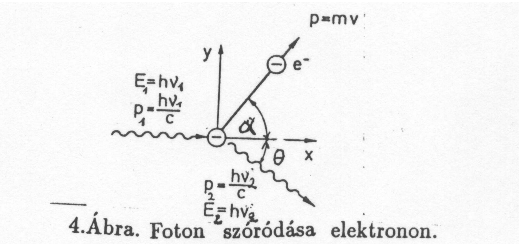
a) energiamérleg:

$h\nu_1 = h\nu_2 + \frac{1}{2}mv^2$;

b) impulzusmérleg (x és y irányban):

$\frac{h\nu_1}{c} = \frac{h\nu_2}{c}\cos\theta + mv\cos\alpha$,

$0 = \frac{h\nu_2}{c}\sin\theta - mv\sin\alpha$.



4.Ábra. Foton szóródása elektronon.

A három egyenlet elegendő az ismeretlen v (elektron sebesség) és az α (elektron eltérülési szög) kiküszöbölésére és a fenti (8)-(9) tapasztalati képletek levezetésére. A levezetésnél kihasználandó az a további tapasztalat, hogy a megváltozások az eredeti frekvenciához, ill. hullámhosszhoz képest elhanyagolhatók (tehát pl. $\nu_1 >> \Delta\nu = \nu_2 - \nu_1$, azaz $\nu_1 \approx \nu_2$).

1.3. AZ ANYAG HULLÁMTERMÉSZETE.

a) de BROGLIE-FÉLE HULLÁMOK. [Megtudjuk, hogy az anyagi részecskék is rendelkeznek hullámtulajdonságokkal]

de Broglie 1924-ben gondolt arra elsőként, hogy ha a fény, amely elektromágneses hullám, részecsketulajdonságokat mutat (ui. a fény energiával és impulzussal rendelkező foton-részecskékből áll), akkor talán fordítva is igaz, és minden $m\,v$ impulzusú (m tömegű és v sebességű) részecske hullámtulajdonsággal is rendelkezik. A kapcsolatot a fény$\leftrightarrow$foton analógiából sejtette meg: a foton energiája $E = h\nu$, impulzusa $p = h\nu/c$; a fény hullámhossza kifejezhető a foton impulzusával

($\lambda\nu = c$ miatt) a következőképp: $\lambda = h/p$. Ezt általánosítva kis sebességű anyagi részecskére, kapjuk a hullámtulajdonságok és részecsketulajdonságok közti fontos **de Broglie-féle összefüggés**t:

$$\lambda = \frac{h}{m\,v}. \tag{10}$$

Makroszkopikus világunkban a (10) által az anyagi testhez rendelt hullámhossz mérhetetlenül kicsiny. Pl. egy 1 tonnás autó (10) szerinti hullámhossza, miközben 100 km/h sebességgel halad, $\lambda_{\text{autó}} = 2.4 \times 10^{-37}$ m.

A mikroszkópikus világban azonban kimutatható λ létezése, azaz érvényre jut a részecskék hullám természete. Gyorsítsunk pl. elektronokat U feszültséggel. A gyorsítás hatására az elektronok $mv^2/2 = e\,U$ energiára tesznek szert (e az elektron töltése), amiből impulzusuk $p = m\,v = \sqrt{2meU}$-nek adódik. Így az elektron hullámhossza:

$$\lambda_{elektron} = h/mv = h/\sqrt{2me} \cdot 1/\sqrt{U} = \sqrt{\frac{150}{U}} \cdot 10^{-10}\,\text{m}$$

(amennyiben U-t Volt-ban mérjük és figyelembe vesszük, hogy $m = 9,10940 \times 10^{-31} kg$, $e = 1,60218 \times 10^{-19} C$, $h = 6,6262 \times 10^{-34}\, Js$). Összehasonlításképpen: egy atom átmérője $\approx 10^{-10}$ m = 1 Å, tehát az atomok világában az elektron hullám jellegének lényeges szerepe lehet.

b) Davisson-Germer ELEKTRON INTERFERENCIA KÍSÉRLETE (1927)

Hogy ez így van, azaz, hogy az anyagrészecskék interferenciára képesek, azt először Davisson és Germer mutatta ki 1927-ben, elektronnyalábot ejtve vékony fémfóliára. Az elektronok (feltételezett) hullámhosszát az előbbi képlet szerint U-val szabályozták. Egy szcintillációs felfogóernyőn olyan interferenciaképet észleltek, amilyent röntgensugárzással is kaptak (akkor, ha $\lambda_{\text{röntgen}} = \lambda_{\text{elektron}}$).

Magyarázat: egy λ hullámhosszal és $\nu = 1/\tau$ frekvenciával rendelkező, balról jobbra tovaterjedő, egydimenziós síkhullám (ami de Broglie feltételezése nyomán a szabad elektronhoz rendelendő) a következőképpen írható:

$$\Psi(x,t) = Ae^{2\pi i(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{\tau})} = \Psi(x+\lambda, t+\tau)$$

($\tau-$t periódusidőnek hívjuk; egy szabad hullám tulajdonsága az, hogy térben λ szerint, időben τ szerint periódikus).

Mármost $\Psi-$t kifejezhetjük a hullámot karakterizáló ($\lambda, \tau = 1/\nu$) mennyiségek helyett az anyagi részecskék mozgására jellemző (p, E) mennyiségekkel is, de Broglie ($\lambda = h/p$), ill. Planck és Einstein ($E = h\nu = h/\tau$) által megadott elemi összefüggések segítségével:

$$\Psi(x,t) = Ae^{\frac{2\pi i}{h}(p\,x - E\,t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p\,x - E\,t)}$$

ahol bevezettük (az exponensben) Dirac nyomán az ún. "h-vonás" állandót:

$$\hbar = h/2\pi = 1,05457 \times 10^{-34} Js = 6.582 \times 10^{-16}\, eV\, s.$$

Az elektron-hullám intenzitása, ami az ernyőn észlelhető: $I = |\Psi|^2 = |A|^2$.

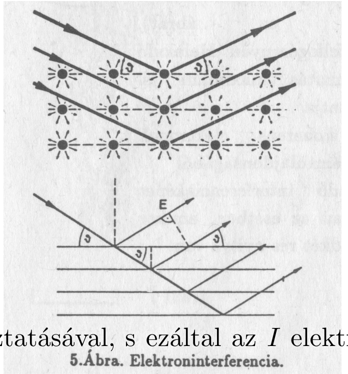
Koherens forrásból származó elektronok hulláma szóródás után:

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p\,x - E\,t)} + Ae^{\frac{i}{\hbar}(p\,[x+d] - E\,t)}$$

(az egyik lehetséges pályán az elektron-hullám $d = d_1 + d_2$ úttal többet tesz meg, ld. az 5. ábrát.)

Ebből az intenzitás:

$$I = |\Psi|^2 = 2A^2(1 + \cos\frac{pd}{\hbar})$$



5.Ábra. Elektroninterferencia.

Mármost a d útkülönbség fix, és a fémbeli rácstávolsággal, valamint a fixen tartott beesési szöggel kapcsolatos. Az elektron impulzusa ($p = h/\lambda = h\sqrt{U/150}$), ill. λ hullámhossza viszont hangolható az elektront gyorsító U feszültség változtatásával, s ezáltal az I elektron-intenzitásban változást tapasztalhatunk az alábbiak szerint:

$$\cos\frac{pd}{\hbar} = \cos 2\pi\frac{p}{h}d = \cos 2\pi\frac{d}{\lambda} = \begin{cases} 1, & \text{ha } 2\pi\frac{d}{\lambda} = 2\,n\,\pi \rightarrow \lambda = \frac{d}{n} \rightarrow I = 4\,A^2 \\ 0, & \text{ha } 2\pi\frac{d}{\lambda} = (2\,n+1)\,\frac{\pi}{2} \rightarrow \lambda = \frac{4}{2\,n+1}\,d \rightarrow I = 2\,A^2 \\ -1, & \text{ha } 2\pi\frac{d}{\lambda} = (2\,n+1)\,\pi \rightarrow \lambda = \frac{2}{2\,n+1}\,d \rightarrow I = 0\,(!) \end{cases}$$

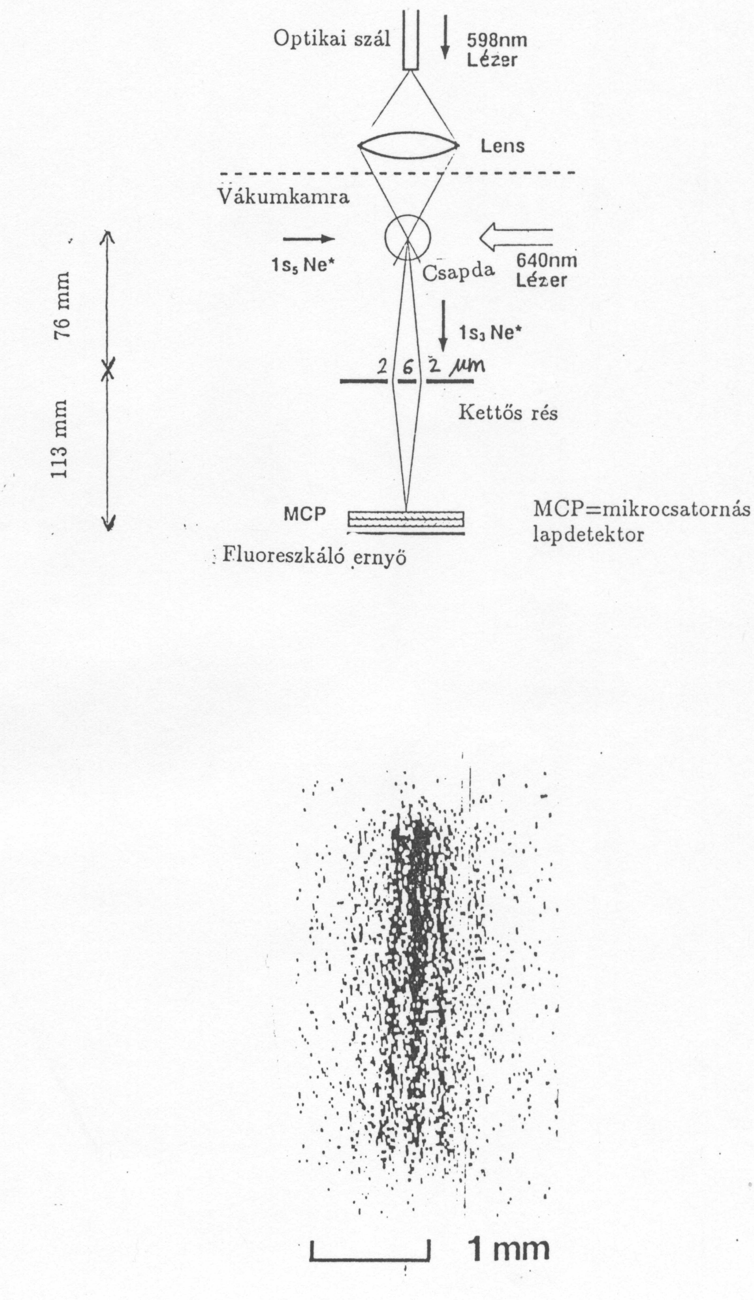
U változtatásával Davisson és Germer pontosan a fenti meggondolás alapján számított intenzitás növekedést (ill. hiányt !) észlelte.

c) JÖNSSON KÉTRÉSES (YOUNG-FÉLE) ELEKTRONELHAJLÁSI KÍSÉRLETE (1961)

Jönsson *elektronokkal* végezte el 1961-ben Young, a XVIII-XIX. században élt angol fizikus híres kétréses fényinterferencia kísérletét. A két 50 μm $\times$ 0.3μm keresztmetszetű rés egymástól 10 μm távolságra helyezkedik el (ld. az ábrát). A felfogóernyőn kialakuló intenzitás maximum jól mutatja a koherens elektronok hullámtulajdonságából fakadó interferenciaképet abban az esetben, amikor mindkét rés nyitva van.

d) ATOMEJTÉSES INTERFERENCIA KÍSÉRLET (1992)

F. és K. Shimizu, valamint H. Takuma japán fizikusok 1992-ben Tokióban ultralassú metastabil neon atomokkal végeztek el kétréses interferencia kísérletet. A két 2 μm szélességű, egymástól 6 μm távolságra elhelyezkedő résen (6.b Ábra) a mágneses csapdából a lézeres legerjesztés révén kiszabaduló, és a gravitációs erő hatására a résnél max. 2 m/s sebességre szert tevő, $1s_3$ állapotban levő metastabilis *atomok interferenciája* okozza a megfigyelt tipikus elhajlási képet, amelyet a fluoreszkáló ernyőn (is) észleltek (részletek megtalálhatók: Phys. Rev. A 46, R17 (1992) alatt).



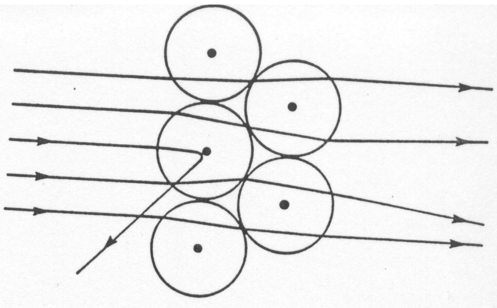
6/b. Ábra. Kétréses atomelhajlási kísérlet.

1.4. RUTHERFORD KÍSÉRLET, AZ ATOM SZERKEZETE. AZ ATOMOK VONALAS SZÍNKÉPE. FRANCK-HERTZ KÍSÉRLET.

a) AZ ATOM SZERKEZETE, RUTHERFORD KÍSÉRLETE. [Első evidencia arra nézve, hogy az anyagot alkotó atomok "darabos" szerkezetűek, térkitöltésük nem folytonos.]

Századunk elején J.J. Thompson, az elektron felfedezőjének atomképe volt általánosan elfogadott. Eszerint az atomot tömegének túlnyomó részét képviselő homogén eloszlású **pozitív töltés**, valamint ebben a folytonos háttértöltésben szabályosan elhelyezkedő, elektrodinamikai erők hatására egyensúlyban levő, a pozitív töltést leárnyékoló **elektronok** alkotják. Ez az atommodell csupán az atomok semlegességét és az elektronok származási helyét volt hivatott megmagyarázni, de pl. a vonalas színkép keletkezésére már nem tudott kijelentést tenni.

Rutherford 1911-ben $\alpha-$sugárzást bocsátott vékony fémfóliára. A Thompson-modell érvényessége esetén a $2e$ pozitív töltéssel rendelkező $\alpha-$részecskéknek gyakorlatilag eltérülés nélkül kellett volna áthaladni az atomokat alkotó folytonos eloszlású pozitív felhőn. Ezzel szemben a beesési iránytól jelentős eltérülési szöggel szórt $\alpha-$részecskéket is detektáltak a kísérletben, ami az atom túlnyomó tömegét alkotó pozitív töltés nem folytonos, hanem kis térfogatra koncentrált mivoltát jelentette.



7.Ábra. A Rutherford-kísérletben észlelt hátraszórás szemléltetése.

Az atom ezen kis térfogatú, pozitív töltésű részét hívjuk **atommag**nak. Az atomnak csak az ilyen kis térfogatban elhelyezkedő pozitív töltésű része képes olyan intenzív elektromos erőteret létesíteni, amellyel a jelentős mértékű $\alpha-$részecske eltérülést magyarázhatjuk. (Magfizikai kurzusban később részletes matematikai tárgyalást is nyer ez a kérdés.)

Rutherford tehát kísérlete révén felfedezte az atommagot. A kísérletből meghatározható volt az atommag töltése (Z), amely egyezőnek bizonyult a rendszámmal, az elemek periódusos rendszerben elfoglalt helyének sorszámával. A kísérletből következtetni lehetett az atommag méretére is, amely $\sim 10^{-15}m$-nek adódott. A helyes atomkép csak 1932-ben, a neutron felfedezése után alakult ki. Eszerint az atom Z protonból, N neutronból és Z elektronból áll, mérete $\sim 10^{-10}m$, tömegének túlnyomó része a magban koncentrálódik.

b) AZ ATOMOK VONALAS SZÍNKÉPE. [Megtudjuk, hogy az atomok csak meghatározott frekvenciájú fényt képesek emittálni, ill. abszorbeálni.]

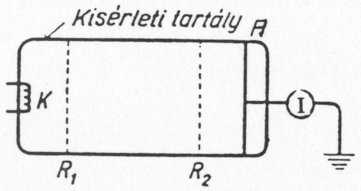
A múlt század végén, e század elején, elsősorban Balmer, Ritz és Rydberg spektroszkópiai munkássága nyomán ismertté vált, hogy a hidrogéngáz által kibocsátott, ill. elnyelt fény spektruma (frekvenciákra való eloszlása) ún. *term*ekbe, egész számokkal kapcsolatos mennyiségekbe rendezhető. Így pl. a hidrogéngáz látható színképére a következő képlet érvényes:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R\,(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{(2+n)^2})\,, \quad n = 1, 2, 3, 4...$$

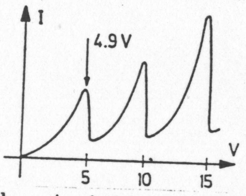
ahol $R = 10967775,9\,m^{-1}$ egy tapasztalatilag meghatározott konstans, az ún. Rydberg állandó.

c) A FRANCK-HERTZ KÍSÉRLET. [Megtudjuk, hogy az atomok energiából is csak meghatározott adagokat képesek felvenni.]

1913-ban, Bohr javaslatára, Franck és Hertz katódsugárcső felhasználásával az ábrán látható kísérletet végezte el. A csőben higanygőz van. A K katód és az R_1 rács közötti gyorsító feszültség V. Az R_1 és R_2 rácsok között nincs feszültségkülönbség, az R_2 rács és az A anód között pedig $-V$ lassító feszültség van. A kísérleti tapasztalat szerint a V gyorsító feszültség növelése hatására az anódra eljutó elektronok száma (az I áramerősség) egy ideig nő, majd $V = 4,9\,V$ elérésekor csökken, ezután újra nő. Hasonló intenzitás csökkenés figyelhető meg $V = n \times 4,9\,eV$ értéknél is (n egészszám).



8/a.Ábra. FRANCK és HERTZ kísérleti elrendezésének vázlata



8/b.Ábra. Az észlelt I áramerősség változása a V feszültség függvényében.

Magyarázat: a Hg-gáz atomokkal az $n \times 4,9\,eV$ kinetikus energiájú elektronok rugalmatlanlanul ütköznek, miközben energiát veszítenek, ezért nem képesek legyőzni az anód és R_2 közti lassító feszültséget, ez okozza az intenzitás csökkenést. Más V értékeknél az elektronok rugalmasan ütköznek az atomokkal, így növekvő feszültség hatására növekvő számban repülnek ki a katódból s érkeznek el az anódra. Az atomok szempontjából ez azt jelenti, hogy csak bizonyos, meghatározott energiájú elektronokkal tudnak kölcsönhatásba lépni, azoktól energiát felvenni.

1.5. A BOHR-FÉLE ATOMMODELL ÉS KORLÁTAI.

1913-ban Bohr a hidrogénatom vonalas színképének tanulmányozása során észrevette, hogy az atom elektronjának impulzusmomentumára és energiájára kirótt két kvantumfeltétel segítségével magyarázni tudja a színkép szerkezetét. Bohr két posztulátuma a következő volt:

a) az elektron csak meghatározott, kiválasztott pályákon keringhet és ezeken az ún. stacioner pályákon nem sugároz. A pályákat a **Bohr-féle kvantumfeltétel** határozza meg:

$$m_e v_n r_n = n\hbar, \;\; n = 1, 2, ..., \tag{10}$$

ahol n a lehetséges pályákat számozza le, v_n és r_n jelöli az $n-$edik pályán keringő m_e tömegű elektron sebességét és a pálya sugarát.

b) Az atom az elektronnak egy E_n energiájú pályáról egy E_m energiájú pályára való átmenete közben fényt sugároz ki (ill. nyel el), amelynek ν frekvenciáját a következő összefüggés határozza meg:

$$E_n - E_m = \hbar\, \omega = h\, \nu [= \varepsilon_0 (!)]. \tag{11}$$

A két posztulátumhoz a következő meggondolásokat lehet fűzni. Az a) kvantumfeltétel (bár ezt Bohr még nem tudhatta) azt jelenti, hogy az elektronhoz tartozó de Broglie hullámhossz éppen egész számszor ($n-$szer) mérhető fel a körpálya kerületére. A (10)–es összefüggés ui. a következő alakba írható át:

$$2\, r_n\, \pi = n\, \frac{h}{m_e\, v_n} = n\, \lambda_n,$$

amely éppen azt jelenthetné, hogy stacionárius állóhullámok (elektronhullámok) alakulnak ki az atomban. Másrészt – $Z\, e$ töltésű magot feltételezve az atom középpontjában – az a) feltételt az erők egyensúlyát kifejező

$$m_e \frac{v_n^2}{r_n} = k\, \frac{Z\, e^2}{r_n^2}\, , \;\; (k = 1/(4\pi\varepsilon_0), \quad \varepsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}\, AsV^{-1} m^{-1} \text{ diel.konst})$$

képlettel ötvözve, kiszámíthatjuk az $n-$edik pályán keringő elektron v_n sebességét, ill. a pálya r_n sugarát:

$$v_n = k\, \frac{Z\, e^2}{\hbar\, n},$$
$$r_n = \frac{a_0}{Z}\, n^2,$$

ahol $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} = 5,3 \times 10^{-11} m$ egy állandót, az ún. Bohr sugarat jelöli.

Továbbá kiszámolható az $n-$dik pályán keringő elektron energiája:

$$E_n = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m_e v_n^2 - k\, \frac{Z\, e^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{m_e (kZe^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \tag{12}$$

A b) posztulátum segítségével kiszámolhatjuk az $n \to m$ átmenethez tartozó fény hullámhosszát (λ_{nm}, $n > m$) :

$$E_n - E_m = \frac{1}{2} \frac{m_e (kZe^2)^2}{\hbar^2} (\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}) = h\, \nu_{nm} = \frac{h\, c}{\lambda_{nm}} \to$$

$$\rightarrow \frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{1}{4\pi}\frac{m_e}{\hbar^3 c}(kZe^2)^2(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2})$$

Ezt a képletet összevetve a vonalas színképek c. fejezetben felírt képlettel, láthatjuk a b) hipotézis további erejét: a korábban csak a mérésekből meghatározható tapasztalati állandót, az R Rydberg-állandót visszavezette korábban megismert fizikai állandókra.

$$R = \frac{1}{4\pi}\frac{m_e}{\hbar^3 c}(ke^2)^2 = 10967775{,}9\,\mathrm{m}^{-1}.$$

Bár a (12)-es képlet nagy pontossággal megadja a hidrogénatom energiaszintjeit, s így spektrumának szerkezetét, a tizenhárom év múlva felfedezett kvantummechanika rávilágított a Bohr-féle atommodell tarthatatlanságára. Az első Bohr-féle posztulátum (a (10) egyenlet) szerint az impulzusmomentum értéke $n\,\hbar$, azaz a hidrogénatom alapállapotában is *van* impulzusmomentuma az elektronnak. Később látni fogjuk, hogy a kvantummechanika és a kísérletek szerint alapállapotban az impulzusmomentum értéke zérus. További hiányossága a Bohr-féle elméletnek, hogy többelektronos rendszerekre (pl. a He atomra) nem, vagy csak nagyon nehezen volt általánosítható (ellipszis pályák bevezetésével), de a szolgáltatott energiaspektrum kifejezések pontosságban kívánnivalót hagytak maguk után a (12) kifejezés pontosságához viszonyítva. Legfőbb baj azonban a Bohr-féle atommodellel kapcsolatban az, hogy az általa sugallt bolygórendszerhez hasonlatos atomkép teljesen tarthatatlan. A kvantummechanika megmutatta, hogy a pálya (tehát a sebesség és hely) fogalma a mikrovilágban nem értelmezhető, így az atomi elektronok mozgását a bolygók mozgásához hasonlítani nem lehetséges.