

### 1.3. A perdület és a mágneses momentum

#### 1.3.1. A pályaperdület

Eddig a koordináta, az impulzus és az energia voltak azok a dinamikai változók, amelyek kvantummechanikai tulajdonságaival megismertedtünk. Most egy újabb dinamikai változót, a pályamozgásból adódó perdületet fogjuk vizsgálni. A módszer a már megszokott lesz:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés "

Egy tömegpontnak egy adott pontra (legyen ez az origó) vett  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  perdülete vektor mennyiség. Ezért három skalár adattal, pl.: az  $(L_x, L_y, L_z)$  három Descartes komponenssel jellemezhető. A 2. axióma szabályai szerint a megfelelő operátorok könnyen képezhetők. Tekintsük az  $\hat{L}_z$  operátort! Bizonyítható, hogy gömbi koordináta rendszerben ez az operátor a  $\varphi$  szög szerinti első deriválttal arányos:  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ . Ez fizikailag

szemléletesen is értelmezhető. Gondoljunk csak arra, hogy pl. az x-irányú mozgásból adódó  $p_x$  impulzushoz rendelt operátor az x-szerinti deriválttal arányos, és ugyanez igaz az y és a z komponensekre is. Gömbi koordináta rendszerben  $L_z$  perdület csak a  $\varphi$  változásából adódó mozgásból adódik. Így joggal várjuk, hogy az  $L_z$  perdülethez rendelt operátor a  $\varphi$  szög szerinti deriválással legyen arányos.

Az  $\hat{L}_z \Phi = L_z \cdot \Phi$  sajátérték egyenlet matematikai megoldásai egyszerűen meghatározhatóak. Ezek közül a regularitási feltételek választják ki a fizikai megoldásokat (1. axióma). A  $\Phi(\varphi)$  sajátfüggvény egyértékű, ha  $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$ . Ez csak akkor teljesül, ha az  $L_z$  sajátérték a  $\hbar$  egész számú többszöröse, azaz  $L_z = m_l \hbar$ , ahol  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \dots$ . Tehát az  $L_z$  sajátértéke kvantált

#### 1.3.2. A (zárt) pályamozgás mágneses momentuma

Ha egy pontszerű elektron zárt pályán mozog (pl. a Bohr-féle atommodellben) akkor ez a mozgó elektromos töltés mágneses teret kelt. Ez a tér egy mágneses dipólus terével jellemezhető. Ez a mágneses dipólus egy újabb dinamikai változó. Vizsgáljuk meg ennek a kvantummechanikai tulajdonságait!

Az egyszerűség végett egy "r" sugarú körpályán mozgó elektron esetét fogjuk vizsgálni. A klasszikus fizika szerint, a pályamozgás során az elektron "m" tömegéből adódó  $\vec{L}$  perdülete és az "-e" elektromos töltéséből származó  $\vec{M}_L$  mágneses momentuma között szoros kapcsolat van. A perdületet már az előzőekben részletesen tárgyaltuk. A körpályán mozgó elektron egy kis áramhurokot jelent. Így a mágneses momentuma a már tanult módon ("áramerősség x felület") egyszerűen számítható:  $\vec{M}_L = I \cdot \vec{r}^2 \pi$ . Ezt összehasonlítva az  $L$  perdülettel eredményül az adódik, hogy a mágneses momentum vektor a pályaperdület vektorral arányos:

$\vec{M}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L}$ . Az arányossági tényező láthatóan univerzális állandókból áll, úgymint az elemi töltés és az elektron tömege.

A mágneses momentum vektor Descartes komponenseihez rendelt operátorok a perdület operátor ismeretében a 2. axióma szerint képezhetők. Tekintsük a z komponenshez rendelt  $\hat{M}_{L_z}$  operátort. Ez az  $\hat{L}_z$  operátortól csak egy konstans szorzóban különbözik. Ezért a 38. oldalon tanultak értelmében a két operátornak közösek a sajátfüggvényei és az operátorok közötti kapcsolatot a sajátértékek öröklik. Az adódik tehát, hogy az  $M_{L_z}$  mágneses momentum komponens kvantált. Azaz  $M_{L_z} = m_l \mu_B$  ahol  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  és érthető okokból mágneses kvantumszámnak hívjuk. A mágneses momentum kvantumát a  $\mu_B$ -t, Bohr-féle "magneton"-nak nevezzük és univerzális fizikai állandókból áll (beleértve a kvantummechanikára jellemző  $\hbar$ -t is). A

magneton szót a foton szó mintájára képeztük. (Általában egy jelenség elemi kvantumait az illető fizikai jelenség nevéből képezzük. Így születtek meg a: foton, magneton, fonon, magnon, exciton, polaron,... stb ... szavak, amelyeket a szilárdtest-fizikában használunk. Ezek közül mi csak az első hárommal fogunk a tárgy keretében találkozni.).

### 1.3.3. Mozgás centrális erőterben

#### 1.3.3.1. A pályaperdület meghatározása

Eddigi tárgyalásunkban a körpályán mozgó elektront kinematikailag adottnak vettük. Nem vizsgáltuk azt, hogy mik a létrejöttének a dinamikai feltételei. Ez pedig fontos, hiszen a valóságban egy elektron mozgásállapotát a környezetében lévő más testekkel való kölcsönhatásai határozzák meg. Csak az a mozgás létezhet, amelyet valamilyen erőhatás létrehoz. Mindig kell, hogy a kinematikának legyen dinamikai háttere is. A tárgyalásunk most is, mint mindig a szokásos sémán alapul:

"Klasszikus mechanika  $\rightarrow$  Operátorok  $\rightarrow$  Sajátérték egyenlet  $\rightarrow$  Fizikai értelmezés  $\rightarrow$  Mérés "

Először a klasszikus mechanikában tanultakat foglaljuk össze. Centrális erőter esetén az erő mindig egy pont felé (erőcentrum felé) irányul. Nagysága legyen arányos az " $r$ " sugárral, azaz a centrumtól mért távolsággal. Ezen erőterben egy  $r$ -től függő skalár potenciál definiálható, amelynek az ekvipotenciális felületei gömbök. Az erőterben mozgó tömegpont tehát egy  $V(r)$  potenciális energiával rendelkezik. Egy elektromos ponttöltés is egy centrális erőteret hoz maga körül létre (Coulomb törvény).

Centrális erő hatására mozgó tömegpont  $\vec{L}$  perdülete és az  $E$  összenergiája állandó. Mivel a pont sebessége mindig merőleges a perdület vektorra, így ha  $\vec{L}$  iránya állandó, akkor a mozgás az erre merőleges síkban történik. Centrális erőterben mozgó tömegpont tehát síkmozgást végez. Ezért a mozgás leírására célszerű a mozgás síkjában felvett polárkoordináta-rendszert választani. Centrális erőter lévén a tömegpont potenciális energiája csak az  $r$  sugártól függ. A  $H(\vec{r}, \vec{p})$  összenergia kifejezése (a Hamilton függvény) definíció szerint a kinetikus és a potenciális energia összegéből áll. A kinetikus energia a sugárirányú mozgásból ( $\vec{p}_r$ ) és a sugárra merőleges ( $\vec{p}_\phi$ ) mozgásból adódó kinetikus energiák összegeként írható fel. A sugárra merőleges mozgás

energiája pedig az állandó nagyságú perdülettel fejezhető ki, és csak az " $r$ " függvénye lesz:  $\frac{p_\phi^2}{2m} = \frac{L^2}{2mr^2}$ . Ezért

ez egy potenciális energiaként fogható fel. Az elnevezés jogosságának a fizikai háttere a következőkből érthető meg. Vizsgáljuk a tömegpont mozgását egy, a centrumot a tömegponttal összekötő egyeneshez rögzített, forgó vonatkoztatási rendszerben. Ekkor, ebben a koordináta rendszerben, a forgó mozgás következtében, tehetetlenségi erők is fellépnek. A tömegpont helyzetét ekkor az " $r$ " távolság egyértelműen meghatározza, tehát a mozgása most egydimenziós lesz. A fellépő tehetetlenségi erőből adódó potenciális energiát "centrifugális potenciálnak" hívjuk. (A továbbiakba is gyakran használjuk a potenciális energia helyett a rövidebb potenciál kifejezést. Ha tudjuk azt, hogy fizikailag miről van szó, akkor **ez a pongyolaság megengedhető!**) Nos pontosan ez az a potenciális energia, amelyet a perdület a fentebb leírt módon meghatároz. Tehát a tömegpont összenergiája a sugárirányú mozgásból adódó kinetikus és csak a sugártól függő ún. effektív potenciál(is energia)

összege. A  $V_{eff}(r)$  effektív potenciál pedig a  $V_{cf}(r) = \frac{L^2}{2mr^2}$  centrifugális és a  $V(r)$  centrális potenciál összege.

Az energia-megmaradás tétele miatt csak azok a pályák jöhetnek létre amelyek esetén a  $H(\vec{r}, \vec{p}) = E$  egyenlet teljesül.

A mint láttuk, centrifugális potenciál pozitív,  $L^2$ -től és  $1/r^2$ -től függ. A vonzó Coulomb potenciál negatív és  $1/r$ -től függ.

Ismeretes, hogy  $V = -\frac{\alpha}{r}$  -es vonzó potenciál esetén kúpszelet pályák adódnak. Az effektív potenciál

ismeretében a különböző típusú pályák a  $H(\vec{r}, \vec{p}) = E$  feltétel alapján energetikailag azonosíthatók. A kötött állapotot megvalósító zárt pályák (kör és ellipszis) összen energiája negatív. A nem kötött állapotot jelentő nyílt pályák (parabola és hiperbola) összen energiája nem negatív érték.

Két fontos egyenlőtlenséget lehet felírni.

Az egyik szerint az azonos perdületű pályák közül a körpálya energiája a legkisebb.

A másik szerint az azonos energiájú pályák közül a körpálya perdülete a legnagyobb.

OROSZ L. Kvantummechanika 56. oldal

Ezek után rátérhetünk a kvantummechanikai tárgyalásra.

Láttuk azt, hogy a centrális erőterben lévő részecske mozgása legegyszerűbben polárkoordináta-rendszerben írható le. A  $\hat{H}$  Hamilton operátort ezért most polárkoordinátákkal fogjuk megadni. Az eredményhez kétféle módon juthatunk el. Az egyik esetben felírjuk a klasszikus Hamilton függvényt polárkoordináta-rendszerben, majd a 2. axióma szerint megadjuk a Hamilton operátort. A másik módszer az, hogy megadjuk a Hamilton operátort Descartes koordinátákkal majd ezt az operátort átírjuk polárkoordináták alakjába. A feladat tulajdonképpen a Laplace operátor polárkoordinátákba való felírására redukálódik. Ez pedig matematikai kézikönyvekben megtalálható. Mindkét módon ugyanarra az eredményre kell jutnunk. Azaz ugyanannak az operátornak kétféle formában felírt alakját kapjuk. A két Hamilton operátor összehasonlításával a sugárirányú mozgás kinetikus energiájának az operátora és  $\hat{L}^2$  a perdület négyzetének az operátora kapható meg. Látható ugyanis, hogy a Laplace operátornak jól felismerhető struktúrája (felépítése) van, azaz sugártól és szögektől "független" részekből áll:  $\Delta_{r,\vartheta,\varphi} = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta,\varphi}$ . Ennek alapján a perdület négyzetének az operátorára az adódik,

hogy:  $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta,\varphi}$ . Látható, hogy ez magába foglalja a "z" irányú komponens négyzetének az  $\hat{L}_z^2$  operátorát is.

A megfelelő sajátértékegyenletek tehát a következők:

$$\hat{H}\Psi(r, \vartheta, \varphi) = E \cdot \Psi(r, \vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = L^2 \cdot Y(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = L_z \cdot \Phi(\varphi)$$

Ránézésre látható, hogy a  $\hat{H}$  Hamilton operátor, az  $\hat{L}^2$  perdület operátor és az  $\hat{L}_z$  perdület komponens operátor egymással páronként felcserélhető. A 38. oldalon tanultak szerint a három operátornak közös sajátfüggvény-rendszere van. Mivel az operátorok különböző változókra hatnak, ezért a közös sajátfüggvény a különböző változójú függvények szorzata lesz. Ezek szerint van az elektronnak olyan  $\Psi(r, \vartheta, \varphi)$  állapota, amelyben az E összen energiája, az  $L^2$  perdülete és  $L_z$  a perdület z irányú komponense adott pontos érték, azaz:

$$\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$$

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \cdot \Psi$$

$$\hat{L}_z \Psi = L_z \cdot \Psi$$

A továbbiakban ezeket az állapotokat fogjuk megkeresni.

Az  $\hat{L}_z$  perdület komponens sajátérték egyenletét már megoldottuk (52. oldal).

Az  $\hat{L}^2$  perdület operátor sajátérték egyenlete szeparálással oldható meg.

Az  $Y(\vartheta, \varphi)$  sajátfüggvény a  $\Theta(\vartheta)$  és a  $\Phi(\varphi)$  függvények szorzataként írható fel. A szeparálást a tanult módon hajtjuk végre (10 és 19. oldal). Közben kihasználjuk azt, hogy  $\hat{L}_z \Phi(\varphi) = \hbar m_l \cdot \Phi(\varphi)$ , azaz a  $\Phi(\varphi)$  függvény az  $\hat{L}_z$  operátor sajátfüggvénye adott sajátérték mellett. Végül is a  $\Theta(\vartheta)$  függvényre egy (az " $m_l$ "-t, mint paramétert tartalmazó) másodrendű differenciálegyenlet adódik, amelyik polinom módszerrel megoldható. A reguláris megoldások az ún. (asszociált) Legendre [kiejtése: "lőzsandr"] polinomok melyeknek a változója most a  $\cos(\vartheta)$ , és így erre a  $\Theta(\vartheta) = P_l^{m_l}(\cos \vartheta)$  jelölést vezetjük be.

Az  $L^2$  sajátértéket egy új kvantumszám (az ún. mellék kvantumszám) az " $l$ " határozza meg:  $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ , és ezért  $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ . A mellék-kvantumszám lehetséges értékei  $l = 0, 1, 2, \dots$  egész számok. A reguláris (polinom) megoldás feltétele az is, hogy az egyenletben lévő mágneses kvantumszám abszolút értékének a maximális értéke " $l$ " legyen. Tehát a mágneses kvantumszám lehetséges értékei  $m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm \dots \pm l$ . Ennek a fizikai tartalma igen szemléltető, azaz a perdület vektor " $z$ " komponense nem lehet nagyobb, mint a vektor hossza.

A szögektől függő  $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi) = P_l^{m_l}(\cos \vartheta) \cdot e^{jm_l \varphi}$  függvényt "gömbfüggvénynek" hívjuk. Az elnevezés oka a következő. Mint az ismeretes, a gömbfelület egy pontját egy  $(\vartheta, \varphi)$  szögpárral tudjuk kijelölni (ezt használjuk a földi helymeghatározáskor is). Így az  $Y(\vartheta, \varphi)$  függvény a gömbfelület egy pontjához egy komplex számot rendel.

A perdületvektor Descartes komponenseihez rendelt  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  operátorok nem cserélhetők fel egymással. A Heisenberg féle határozatlansági reláció szerint ez azt jelenti, hogy nincsen olyan elektronállapot amelyben mindhárom komponensnek pontos értéke van. Mindebből következik, hogy a fent meghatározott  $\Psi(r, \vartheta, \varphi)$  állapotban az  $L_z$  értéke egy adott érték, és így  $L_x$  és  $L_y$  értéke teljesen határozatlan lesz. Ezért nem kell foglalkoznunk ezzel két komponenssel.

Centrális erőterben mozgó elektron  $\vec{L}$  perdületvektorának a kvantálása egy vektorábrával szemléltethető. Csak olyan elektronállapotok léteznek, amelyben a perdület  $L$  nagysága és a " $z$ " irányú komponense  $L_z$  határozott érték, de az  $x$  és  $y$  komponensek teljesen határozatlanok.

Adott " $l$ " mellék-kvantumszám meghatározza a perdületvektor nagyságát:  $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ . A mágneses kvantumszám  $m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm \dots \pm l$  értékei pedig megadják a perdület " $z$ " irányú vetületét:  $L_z = \hbar m_l$ . Az  $l$  és  $m_l$  közötti kapcsolat fizikai tartalma tehát az, hogy egy vektor bármelyik komponense nem lehet nagyobb mint a vektor hossza. Látható az is, hogy fennáll az  $L_z < L$  reláció, azaz a perdületvektor soha nem lehet függőleges. Ez összhangban van a vízszintes komponensek közötti határozatlansági relációval.

Teljesen hasonló eredmények adódnak a pályamozgásból adódó mágneses momentumra is. Ennek nyilvánvaló oka az, hogy a perdület és a mágneses momentum csak egy konstans szorzótényezőben térnek el egymástól.

### 1.3.3.2. A sugárirányú (radiális) mozgás leírása

Centrális erőterben mozgó elektron energiája kötött állapotban negatív. A kvantált energiaszintek meghatározása  $\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$  a Schrödinger egyenletnek (a Hamilton operátor sajátérték egyenletének) a megoldását jelenti. A  $\Psi(\vec{r}, t) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$  állapotfüggvény szeparálható. A szögektől függő részét az

$Y(\vartheta, \varphi)$  gömbfüggvényeket már meghatároztuk. Ez tehát minden centrális potenciálnál ugyanolyan. A  $V(r)$  potenciális energia csak a sugártól függő  $R(r)$  függvényt meghatározó differenciálegyenletben jelenik meg. Ebben az egyenletben célszerű bevezetni a már jól ismert  $V_{\text{eff}}(r)$  effektív potenciális energiát.

OROSZ L. Kvantummechanika 59. oldal

A sugárirányú mozgás kinetikus energiájának az operátora, a  $\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r$ , elsőrendű deriváltakat is tartalmaz. Így az  $R(r)$  függvényt meghatározó differenciálegyenlet formailag nem egészen olyan, mint a már jól ismert egydimenziós Schrödinger egyenlet. Egy egyszerű transzformációval azonban ez a "hiányosság" kiküszöbölhető. Vezessük be ugyanis a  $R(r)$  helyett a  $P(r) = rR(r)$  függvényt. Ekkor  $P(r)$  függvényre már csak a sugár szerinti második deriváltat tartalmazó, formailag is a megszokott, egydimenziós Schrödinger egyenlet adódik. A sajátérték egyenletben az (egydimenziós) effektív potenciál szerepel.

Ezt az egyenletet az  $L$  perdület és a  $V(r)$  potenciális energia ismeretében már meg tudnánk oldani. Azonban a diszkrét energiaszintekhez tartozó  $P(r)$  egydimenziós sajátfüggvények alakját a 14-15 oldalakon tanultak szerint, a konkrét matematikai számítások nélkül is meg lehet jósolni.

OROSZ L. Kvantummechanika 60. oldal

A  $P(r)$  egy "valódi" egydimenziós Schrödinger egyenlet sajátfüggvénye és igen szemléletes fizikai jelentéssel rendelkezik.

A teljes hullámfüggvénnyel felírt  $|\Psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV$  kifejezés megadja az elektron megtalálási valószínűségét az  $\mathbf{r}$  pont  $dV$  környezetében. Számoljuk ki a tartózkodási valószínűséget, ha a  $dV$  térfogat egy  $r$  sugarú és  $dr$  vastagságú gömbhéj. Ez azt jelenti, hogy a tartózkodási valószínűség sűrűség szögektől függő részét összegezni kell a teljes gömbhéjra. Eredményül éppen a  $|P(r)|^2 dr$ -et kapunk. Tehát a  $P(r)$  függvény ismeretében meg tudjuk határozni annak a valószínűségét, hogy az elektront a centrumtól bármelyik irányban  $r$  távolságban találjuk meg.

### 1.3.3.3. A hidrogénszerű ion

Ha a centrális  $V(r)$  potenciál helyébe a vonzó Coulomb potenciált írjuk, akkor általános esetben a hidrogénszerű ion kvantummechanikai modelljéhez jutunk. Azért "hidrogénszerű", mert egyetlen elektront tartalmaz és azért "ion", mert a pontszerűnek képelt pozitív magtöltés az elemi töltés többszöröse, pl.  $+Ze$ .

A teljes hullámfüggvény szögektől függő  $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$  része általánosan ismert. Így csak a sugártól függő  $R(r)$  tényezőt kell meghatározni. Az effektív potenciál ismeretében a számítások elvégezhetők. A kapott egydimenziós Schrödinger egyenlet (ami egy sajátérték egyenlet) polinom módszerrel oldható meg.

A reguláris megoldások (a sajátfüggvények) ún. (asszociált) Laguerre [ejtése: "lager"] polinomok. A sajátértékek a kötött állapot lehetséges energiaszintjeit adják. A kvantált energiaszinteket egy újabb kvantumszámmal, az "n" főkvantum-számmal tudjuk kifejezni. Reguláris megoldások akkor adódnak, ha a mellék-kvantumszám kisebb, mint a főkvantum-szám, azaz  $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$ . Ennek a korlátozó összefüggésnek a fizikai tartalma a klasszikus fizikai tárgyalás során az 55. oldalon bemutatott egyik egyenlőtlenségi relációból adódik. Nevezetesen, adott energiájú (n) állapotok perdülete (l) felülről korlátozott.

OROSZ L. Kvantummechanika 61. oldal

Az eddigiek röviden az alábbiakban foglalhatók össze. A hidrogénszerű ionban a kötött elektron állapotfüggvényét három kvantumszám határozza meg  $(n, l, m_l)$ . Ezek ugyanakkor megadják az ebben az állapotban pontosan (nulla szórással) mérhető dinamikai változókat is. Úgy mint az  $E(n)$  összen energiát, az  $L(l)$  perdület nagyságát és  $L_z(m_l)$ -t a "z" irányú perdület komponenset.

Mint azt a történeti bevezetőben láttuk, a Bohr modell a hidrogén atom energiaszintjeit jól adja meg (hiszen pontosan ebből a célból készült). A körpályán keringő pontszerű elektron képe azonban a kvantummechanikai szemlélet szerint teljesen hamis. Célszerű megvizsgálni azt, hogy milyen módon adja vissza a korrekt kvantummechanika a fél-klasszikus Bohr pályákat. Azaz hogyan teljesül ebben az esetben a megkívánt "korrespondencia" elv?

A Bohr modell esetén a diszkrét energiaszinteket a perdület Bohr-féle kvantálási törvénye határozza meg. Ezt grafikus módszerrel a következőképpen lehet szemléltetni. Felrajzoljuk a Bohr féle  $(L = n \cdot \hbar)$  perdületkvantálásnak megfelelő effektív potenciál függvényeket  $(n = 1, 2, 3, \dots)$ . A körpálya feltétele az, hogy az  $E_n$  energiaszinteket jelentő egyenesek egy pontban (a minimumnál) érintsék az effektív potenciálokat ábrázoló görbéket. Az érintési pontok megadják a lehetséges körpályák  $r_n$  sugarait is.

A kvantummechanikai modell ennél jóval bonyolultabb. Ezért csak a Bohr modell szempontjából lényeges elemeit fogjuk figyelembe venni. Rajzoljuk fel itt is az effektív potenciálokat, de a perdületet a kvantummechanikai  $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$  kvantálásnak megfelelően adjuk meg  $(l=0, 1, 2, \dots)$ . Látható, hogy az effektív potenciálok "kissé" az  $E_n$  energiaszintek "alá lógnak". Így az  $l=0$  esetet kivéve két metszéspont adódik. Az 55. oldalon tanultak szerint, az adott energiaszinthez tartozó körpályának mindig a maximális perdületű állapot felel meg. Az  $n$ -ik energiaszint esetén a maximális perdületet pedig a mellék-kvantumszám  $l=n-1$  értéke határozza meg. Ez ugyanakkor azt is jelenti, hogy adott perdület esetén ebben az állapotban minimális az energia. Ezért ebben a (körpályának megfelelő) állapotban a sugártól függő  $P(r)$  állapotfüggvénynek csak "egy púpja van". Tehát az elektron, jó közelítéssel, egy gömbhéjban lokalizálódik. A maximális megtalálási valószínűséghez tartozó gömbnek a sugara éppen a Bohr-féle körpálya sugarával egyezik meg. A Bohr modell tehát csak a maximális valószínűségeket "látja" és azt is csak egy síkban.

#### 1.3.3.4. Az atomok elektronszerkezete

A hidrogénszerű ionnál tanultak azért fontosak, mert segítségével egy egyszerű általános atommodell alkotható, amely a periódusos-rendszer felépítésének a magyarázatául szolgál. Az egyedi atomok elektronszerkezetének pontosabb meghatározásához már bonyolultabb modellek szükségesek. Az elvekre még később visszatérünk.

Tételezzük fel, hogy az atomban lévő elektronok csak az atommag terét érzékelik, azaz az elektronok közötti kölcsönhatástól tekintünk el! Ekkor minden elektronállapot valamilyen hidrogénszerű ionállapot lesz. A kérdés az, hogy hány elektron veheti fel ugyanazt az állapotot az atomban. Az atomi elektronállapotok betöltésénél két szabályt kell követnünk. Mindkettőt fogadjuk most el tapasztalati ténynek. Az egyik az ún. Pauli elv. Ez azt állítja, hogy egy atomban egy  $(n, l, m_l)$  kvantumszám hármassal jellemzett atompályán maximum két elektron lehet. Az elv mélyebb okairól és a pontos megfogalmazásáról a későbbiekben lesz szó. A másik az ún. Hund szabály, amely az állapotok betöltési sorrendjét határozza meg. A részletekre még az elektronspin bevezetése után visszatérünk.

Az atomok elektronszerkezetének a grafikus ábrázolására egy ún. blokk-diagramot fogunk használni. Minden "□"-al jelölt blokk egy atompályát reprezentál. Az atompályákhoz rendelt kvantumszámok értéke határozza meg a blokk relatív helyét az ábrában. Egy adott főkvantum-számhoz tartozó állapotok alkotják a "héjakat" (ezek a blokk-diagram sorai). Az azonos mellékkvantum-számú állapotok pedig ugyanazon "alhéjhoz" tartoznak (ezek a blokk-diagram oszlopai). Az  $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$  alhéjakat  $s, p, d, f, g, \dots$  betűkkel is szoktuk jelölni. Mindezek a középiskolai tanulmányainkból már ismertek.

Mint már említettük, az elektronállapotok betöltési sorrendjét a Hund szabály rögzíti. Eszerint az állapotok betöltése alhéjanként történik. Az alhéjak sorrendjét pedig növekedő energiájuk határozza meg. Ha az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor az alhéjak energiáját csak a főkvantum-szám értéke határozza meg. Így az ugyanazon héjhoz tartozó alhéjak energiája megegyezik. Az elektronok közötti kölcsönhatás megváltoztatja az egyes alhéjak energiáját. Szemléletesen azt mondjuk, hogy az adott héjhoz tartozó energiaszint "felhasadt". A különböző héjakhoz tartozó alhéjak (felhasadt) energiaszintjei "összekeveredhetnek". (Például "3d" állapot energiája nagyobb lesz, mint a "4s" állapoté.) A felhasadt energiaszintek jól elkülönülő csoportokba rendeződnek.

Az egyes csoportosulásokhoz tartozó állapotok teljes betöltése az ún. nemesgázok elektronszerkezetét adja. Ezek meglehetősen stabil elektronszerkezetek, ami azt jelenti, hogy viszonylag nagy energia kell ahhoz, hogy egy elektront a lezárt héjból eltávolozzon. Ezért a "nemes gázok" a szokásos körülmények között nem alkotnak vegyületeket. Egyatomos gáz formájában találkozunk velük.

Az alhéjak betöltési sorrendje (nagyreszt) az ún. átlós diagramból határozható meg.

### 1.3.3.5. Az Állapotfüggvények (atompályák) grafikus ábrázolása

Az állapotfüggvények meghatározzák az elektron megtalálási valószínűségét az atommag körül a térben. Ezt szemléletesen "elektronfelhőnek" is szoktuk hívni. Ez az atomi elektronfelhő megadja az illető atom kémiai tulajdonságait. Ezért hasznos bevezetni egy olyan grafikus módszert, amely vizuálisan informál minket az elektronfelhő atomon belüli eloszlásáról.

Az állapotfüggvényt szeparált alakban határoztuk meg. Mivel az  $R(r)$  sugártól függő rész nyilvánvalóan gömbszimmetrikus, így az elektronfelhő anizotrópiáját az  $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$  szögektől függő gömbfüggvények határozzák meg. Ezek ábrázolása ún. polár diagrammal történik. Ekkor felrajzoljuk azt az  $Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi) = \text{állandó}$  felületet, amelyen belül az elektron közel egy valószínűséggel ("1-ε") található meg.

Az s-állapot gömbszimmetrikus. Ábrázolása úgy történik, hogy megadjuk azt a gömböt, amelyen belül az elektron, pl.: 90 % valószínűséggel tartózkodik.

A p-állapotban a mellékkvantumszám  $l = 1$  és a mágneses kvantumszám lehetséges értékei  $m_l = -1, 0, +1$ . Mint azt láttuk, ebben az állapotban az elektron perdülete  $L = \hbar\sqrt{2}$  és a "z" irányú vetülete  $L_z = -\hbar, 0, +\hbar$ . Láttuk, hogy az  $Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi)$ ,  $Y_1^{+1}(\vartheta, \varphi)$ ,  $Y_1^0(\vartheta, \varphi)$  függvények ugyanahhoz a perdületértékhez tartoznak, tehát degenerált állapotok, így ezek bármilyen lineáris kombinációja szintén lehetséges sajátfüggvények lesznek. Ezért a komplex függvények helyett azok lineáris kombinációjával képzett valós függvényeket használunk az ábrázoláskor.

Azaz tehát:

$$Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi) = \sin \vartheta \cdot e^{-j\varphi} \text{ helyett } \sin \vartheta \cdot \cos \varphi$$

$$Y_1^{+1}(\vartheta, \varphi) = \sin \vartheta \cdot e^{+j\varphi} \text{ helyett } \sin \vartheta \cdot \sin \varphi$$

$$Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \cos \vartheta$$

A kapott valós függvények Descartes koordinátákkal is kifejezhetők:

$$Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi) = \frac{x}{r}, \quad Y_1^0(\vartheta, \varphi) = \frac{z}{r}, \quad Y_1^{+1}(\vartheta, \varphi) = \frac{y}{r}.$$

Eredményül az adódott, hogy a p-állapotok mindegyike egy csomósíkkal rendelkezik, ezek rendre az  $x=0$ ,  $z=0$  és az  $y=0$  síkok. Csomósíknak nevezzük ugyanis azt a síkot, amely mentén a hullámfüggvény zérus. A gömbszimmetrikus állapot a csomósík mentén mintegy "befűződik" és egy hengerszimmetrikus állapot jön létre.

A geometriai ábrázolás során egy "kettős szivar" alakzatot kell felrajzolnunk (rendre az  $x$ ,  $z$ ,  $y$  tengelyek mentén).

A hullámfüggvény (+, -) előjelét is be szoktuk írni a megfelelő tartományokba.

## 1.4. Atomok mágneses térben

### 1.4.1. A mágneses tér hatása a pályamozgásból származó mágneses momentumra

Az, hogy a kvantummechanika axiómarendszere jó-e vagy sem magából az axiómákból természetesen nem derül (nem derülhet) ki! Erre a kérdésre a választ csak az elméleti számítások eredményeinek kísérleti ellenőrzése adhatja meg. A hidrogén atom Bohr-féle modelljében az energiaszintek helyes voltát közvetve a Balmer formula segítségével bizonyítottuk. Más kísérleti eredmény az idő tájt nem is volt ismeretes, így nem derült ki az, hogy a perdület Bohr-féle kvantálási törvénye vajon önmagában helyes-e vagy sem? A gyanú akkor ébredhet fel bennünk, amikor kiderül, hogy a kvantummechanika a perdületre más kvantálási szabályt ad meg. Felmerül tehát a perdület megmérésének a szükségessége. Ehhez pedig kölcsönhatásba kell lépni a perdülettel. Ez a hozzá szorosan csatolódó mágneses momentumon keresztül történhet. Ugyanis, ha a mágneses momentumot mágneses térbe helyezük, akkor arra a tér valamilyen hatást fog gyakorolni. A következőkben evvel a hatással foglalkozunk.

Először megint a klasszikus fizikai modellt vizsgáljuk meg. Homogén  $\vec{B}$  mágneses térben lévő  $\vec{M}_L$  mágneses momentumra egy  $\vec{M}_L \times \vec{B}$  forgatónyomaték hat. Mivel a mágneses momentumhoz egy  $\vec{L}$  perdületvektor csatolódik, a forgatónyomaték most a perdületre is hatni fog. A perdület megváltozásának a törvényét a newtoni mechanikából ismerjük. Eszerint a perdület pillanatnyi megváltozása a forgatónyomatékkal arányos. Mivel a (mágneses momentumra ható) forgatónyomaték merőleges a mágneses momentumra, így a perdület  $d\vec{L}$  megváltozásának is merőlegesnek kell lenni magára a perdületre. A perdületnek tehát csak az iránya változik meg, a nagysága állandó marad. A perdületvektor ún. precessziós mozgást fog végezni, azaz a perdületvektor végpontja egyenletes  $\omega_L$  szögsebességgel fog forogni a mágneses tér iránya körül. Ennek szögsebességnek a neve a Larmor-féle körfrekvencia. Nagysága univerzális állandókon kívül a mágneses tértől függ.

A kvantummechanikai tárgyalás során a homogén mágneses térbe helyezett atom Schrödinger egyenletét kell megoldanunk. Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy hidrogén atomot. A hidrogén atom valamely  $\psi_n$  állapotában az elektron a pályamozgásából adódó perdülettel és a hozzá csatolódó mágneses momentummal is rendelkezik. Ez a mágneses momentum a jelenlévő mágneses térrel kölcsönhatásba lép, amit a Schrödinger egyenletben egy potenciális energia(operátor) taggal kell figyelembe vennünk:  $\hat{W}_m = -\hat{M}_z \cdot B = \omega_L \cdot \hat{L}_z$  (2.axióma).

Közvetlen behelyettesítéssel bizonyítható, hogy az elektron  $\psi_n$  állapotfüggvénye nem változik meg, ha a hidrogén atomot homogén mágneses térbe helyezük. Ennek az az oka, hogy  $\hat{W}_m$  a fellépő új potenciális energia tag operátora az  $\hat{L}_z$  operátorral arányos. Mivel az  $\hat{L}_z$  operátor felcserélhető a mágneses tér nélküli



hidrogén atom  $\hat{H}_0$  Hamilton operátorával, ezért a sajátfüggvényeknek meg kell egyezni. Az  $E_n$  energiaszintek azonban  $\varepsilon_n = E_n + m_l \cdot \hbar \omega_L$ -re változnak. Ezt a megváltozást szemléletesen felhasadásnak nevezzük.

A pályaalapok energiaszintjeinek a felhasadása megváltoztatja a lehetséges elektronátmeneteket és így a kibocsátható fotonok lehetséges energiáit is. Ez pedig a spektrum vonalak felhasadását eredményezi, ami spektroszkópiailag mérésrel detektálható. A jelenséget Zeeman effektusnak nevezik. Helyesebben ennek a neve a "normális Zeeman effektus" (1896. Ekkor még csak a klasszikus Lorentz-féle pontszerű elektronmodell létezett. Ennek alapján is meg lehetett magyarázni ezt a jelenséget). A következő fejezetben látni fogjuk, hogy az elektronnak magának is van egy mágneses momentuma. Természetesen ez is kölcsönhatásba lép a külső homogén térrel. A kétféle eredetű, de azonos nagyságrendű mágneses momentumok hatása a valóságban együtt kell, hogy jelentkezzen. Ekkor beszélünk az "anomális Zeeman effektusról". Az ellentmondó elnevezésnek történeti okai vannak.

#### 1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin

Ez a tantárgy nem fizikatörténet! Ezért az egyes kísérleteket nem a megszületésük sorrendjében mutatjuk be. Mai, letisztult és egzakt ismereteink birtokában legrövidebb úton, a kísérlet és elmélet összekapcsolódásának logikus láncolata mentén szeretnénk eljutni az elektronspin fogalmához. A tudomány története azonban nem mindig olyan logikus, ahogyan azt mai didaktikai szemléletünk igényelné. Ezért a célunknak megfelelően „átrendezzük az eseményeket”. (Akár így is történhetett volna!)

Az atomok elektronszerkezetének a tárgyalásakor már láttuk azt, hogy az egyes alhéjak betöltése nem az egymást követő héjak sorrendjében, hanem attól eltérő módon történik. A betöltési sorrend ellenőrzése mérés útján lehetséges.

Tekintsük például a Z=47 rendszámú Ezüst atomot! A 46 elektron lezárt alhéjakban helyezkedik el. Azt kell mérésrel eldönteni, hogy a 47-ik elektron (4f), vagy (5s) állapotban van-e, azaz igaz-e a 63. oldalon bemutatott "átlós szabály"? A mérésre az ad lehetőséget, hogy a lezárt héjak pályamozgásból adódó eredő mágneses momentuma zérus kell, hogy legyen. Ennek oka az, hogy lezárt héj esetén az összes (+ és -) mágneses kvantumszámhoz tartozó pálya be van töltve, és így a mágneses momentumok kompenzálják egymást. Az ezüst atom eredő mágneses momentuma tehát csak a 47-ik elektron pályaalapotából adódhat. Ez pedig más az (5s) és más a (4f) állapotban. Azaz ha megmérjük az ezüst atom mágneses momentumát, akkor ennek alapján a feltett kérdés egyértelműen megválaszolható.

Az atomok illetve molekulák mágneses momentumának a meghatározására az ún. "atom-" vagy "molekulasugaras mérés" használható. Ennek elve a következő. Ha inhomogén mágneses térbe egy mágneses momentumot (mágneses dipólust) helyezünk, akkor arra a forgatónyomatékon kívül egy erő is fog hatni, amelyik a (a mágneses tér irányától függően) a nagyobb vagy a kisebb télerősség irányába gyorsítja a mágneses momentumot. Ha tehát atomokból álló sugárnyalábot inhomogén mágneses térbe vezetünk, akkor a kezdetben együtt mozgó különböző irányú mágneses momentumok a rájuk ható különböző nagyságú erők hatására szétválnak. A beeső dipólus nyaláb így több ágra szakad. A becsapódások helye detektálható. Például, ha ezüst atomokból álló nyalábot használunk, akkor (4f) állapotú elektron esetén hét nyalábot ( $m_l = 0 \pm 1 \pm 2$ ), (5s) állapot esetén egy nyalábot ( $m_l = 0$ ) kellene kapnunk. Az érdekesség azonban az, hogy a bemenő ezüst atom nyaláb kettő(!) ágra válik szét. A nyalábokban a mágneses momentum mágneses térre vett vetületének (ez legyen a "z" irányú vetület) az értéke a mérések szerint  $\pm \mu_B$  (Bohr magnetonnyi). Ez a meglepő kísérlet eredménye csak úgy magyarázható, ha feltesszük, hogy a 47-ik elektron (5s) pályaalapotban van (így ennek a mágneses momentuma zérus) és maga az elektron is rendelkezik egy (saját, ún. "belső") mágneses momentummal, amelynek "z" irányú vetülete csak  $\pm \mu_B$  lehet.

Magát, az imént vázolt molekulasugaras mérést 1920-ban Otto Stern a frankfurti egyetem magántanára dolgozta ki és a kísérleteit 1921-től W. Gerlach-al Rostockban folytatta. Ekkor még csak a Bohr-Sommerfeld atommodell létezett, ezért a mérések kiértékelése is csak ennek alapján történhetett. Mint tudjuk, e modell szerint a pályamozgás peridülete soha nem lehet zérus. Később a Schrödinger-féle elmélet megszületése után kiderült, hogy az elektron pályaperidületének legkisebb értéke valójában zérus ("s" állapot). Nyilvánvalóan ugyanezek érvényesek a pályamozgásból adódó mágneses momentumra is. A Stern-Gerlach féle (atom- illetve)

molekulasugaras mérésekkel el lehetett dönteni azt, hogy melyik modellnek van igaza. A mérés eredménye utólag természetesen Schrödinger elméletét igazolta és (pl. a fentiekben tárgyalt ezüst atom esetén) elvezetett az elektron saját mágneses momentumának a felfedezéséhez is.

Az 1943-as fizikai Nobel díjat Otto Stern kapta, az indoklás szerint: "a molekulasugár-módszer kifejlesztéséért és a proton mágneses momentumának a felfedezéséért."

Ha az elektronnak van saját mágneses momentuma, akkor joggal tételezhető fel, hogy van saját perdülete is. Ezt nevezzük spinnek. A bizonyítékot az a kísérlet szolgáltatja, amelyet Einstein javaslata alapján W.J.deHaas német fizikus végzett el. (Ma ezt Einstei-de Haas kísérletnek nevezzük.)

Eredetileg, 1915-ben, azt akarták ellenőrizni, hogy a ferromágnesség Ampere-féle elméletében feltételezett elemi köráramok azonosíthatók-e az atomokban keringő elektronokkal. Mivel a mérés nem a várt eredményt adta, ezért a jelenséget mágneses anomáliának nevezték el. A magyarázatra csak jóval később, az elektron saját mágneses momentumának és a spinjének a bevezetése után került sor. Mi már ennek a tudatában ismertettük a kísérletet.

A mérés lényege a következő. Áramjárta tekercs homogén mágneses terébe vékony torziós szálla felfüggesztett vasrudat helyezünk. A fémbe lévő, a ferromágnességért felelős(?) elektronok saját mágneses momentumai "beállnak" a tér irányába. Változtassuk meg az áram irányát a tekercsben! Ekkor megváltozik a mágneses tér iránya is. Az elektronok mágneses momentumai követik a tér irányváltozását. Ha az elektronnak van saját perdülete, akkor azok is megfordulnak. De a perdület megmaradási tétele miatt az egész fémhengernek is el kell fordulnia ahhoz, hogy a rendszer eredő perdülete továbbra is zérus maradjon. Ez az igen kicsiny kis makroszkopikus elfordulás rezonancia módszerrel felerősíthető. Ekkor az áram irányát éppen a mechanikai torziós rendszer rezonancia frekvenciájának az ütemében változtatjuk. A mérés eredménye az, hogy az elektron spinje, pontosabban a spinnek a mágneses tér irányára vett  $S_z$  vetülete, csak  $\pm \hbar / 2$  értéket vehet fel.

Mint már említettük, az eredeti elképzelés az volt, hogy a ferromágnességért az "atomi áramok", azaz az atomi elektronok pályaalapotában fellépő mágneses momentum a felelős. Ha ez így lenne, akkor a mért perdületre (a pályaalapotoknak megfelelően) a  $\hbar$  többszöröse adódott volna. Mivel nem ezt mérték, ezért nevezték az effektust "mágneses anomáliának".

A mérési eredmények szerint tehát az elektron saját mágneses momentumának és a spinjének az aránya kétszer akkora, mint a pályamozgásból adódó ugyanezen mennyiséké.

**Ez a nagyon fontos kísérleti eredmény azt bizonyítja, hogy a spin nem egy klasszikus dinamikai változó, jóllehet a mértékegysége ugyanaz, mint a klasszikus perdületé.**

Ezért a spin kvantummechanikai modelljének kidolgozásánál „bajban” leszünk! Mivelhogy nincsen klasszikus definíció, így a 2.axiómában előírt eljárás a "spin-operátor" definiálására nem alkalmazható.

Az eddig használt séma:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés."

helyett egy "fordított" utat kell követnünk. Ugyanis most a mért (kvantált) sajátértékek ismeretében kell "kitalálni" a dinamikai változót reprezentáló operátort és így annak kvantummechanikai tulajdonságait.

Az alkalmazandó séma tehát a következő:

**"Mérés→Fizikai értelmezés → Sajátérték egyenlet → Operátorok → Kvantummechanikai elmélet."**

Hasonló problémával a részecskefizikusok nap mint nap találkozhatnak. Az elemi részecskéknél ugyanis számos olyan tulajdonsága van, amelyeknek nincsen megfelelője a klasszikus fizikában. Valójában az elemi részecskéket éppen ezen tulajdonságaik alapján osztályozzuk. Ezeknek (hogy „beszélni tudjunk” róluk) valamilyen nevet kellett adni. Ezek csak „fantázia-nevek”, tehát ha esetleg van is eredeti jelentésük, azt nem abban az értelemben használjuk. Az elméleti fizikusok fantáziája itt is meglehetősen játékosnak és élénknek bizonyult. Az izospin, a barionszám, a ritkaság, a leptontöltés, a kvarkok "színe", és "íze" mind-mind olyan tulajdonságokat jelölnek, amelyek a klasszikus fizika szintjén nem "láthatók", így nem is alakult ki bennünk velük kapcsolatos "hétköznapi szemléletes" kép. Itt egyedül csak a matematikára támaszkodhatunk. A részecskefizikában ennek alapján alakítjuk ki azt a sajátos szemléleti rendszert amelyben gondolkozva próbáljuk "megérteni a Természet titkait". Itt a vezérfonal mindig valamilyen „megmaradási tétel” és azokat szűkítő „kiválasztási szabályok” felismerése. Mindezek mélyén a Természet valamilyen „szimmetria tulajdonsága” húzódik meg. Ezen szimmetriák olyan általános szabályszerűségek, absztrakt „mintázatok” amelyek leírására a „matematika”, mint a „mintázatok tudománya” egyedül alkalmas. Ez az a „királyi út” amely a Természet megértéséhez elvezethet. A „Nagy Bumm”-tól az „emberi értelemig”, amely megérti a „Nagy Bumm”-ot a

bonyolultság és a szervezethez hihetetlen gazdagságával találkozunk. Hát igen: „Felség ! A Világ Nagyon Bonyolult!”.

OROSZ L. Kvantummechanika 69. oldal

A spin, mint az elektronnak egy sajátos tulajdonságát, először S.A.Goudsmit és G.E.Uhlenbeck vezette be a kvantummechanikába 1925-ben. Az általuk kidolgozott spin-fogalom jelentősége messze túlmutat azon, amit a felfedezők gondoltak.

A spinre jellemző kvantumszám(ok) definiálása legegyszerűbben a pályamozgásból adódó perdület mintájára történhet. Tételezzük fel, hogy az elektron spinje és mágneses momentuma éppen olyan elemi tulajdonsága az elektronnak, mint a tömege vagy a töltése. A pályamozgásból adódó momentumok mintájára be kell vezetni az "s" (ami az "l" mellékkvantum-számmal analóg), és az "m<sub>s</sub>" (ami az "m<sub>l</sub>" mágneses kvantumszámmal analóg) kvantumszámokat valamint a "g<sub>s</sub>" (giromágneses) faktort. Ez utóbbi a perdület és a mágneses momentum arányát mérő pusztán szám.

Az elmélet helyességét az bizonyítja, hogy a saját mágneses momentum mért értékeit (Stern-Gerlach) beírva az elméletbe, az adja az elektronspin mért értékeit (Einstein-deHaas). Mivel az "s" csak egyetlen értéket vesz fel (1/2), ezért nem tekinthető igazi kvantumszámmal, hiszen minden elektronállapotban mindig ugyanaz az értéke. Új kvantumszám az "m<sub>s</sub> = ±1/2", amelyet találónak "spin kvantumszámmal" hívunk. Ezzel tulajdonképpen a Bohr-Sommerfeld féle (továbbfejlesztett) atommodell elektronjainál alkalmazott Pauli elv negyedik kvantumszámát „fedezték fel”.

A spin vektormodellje a pályamomentum mintájára készíthető el.

Ha az elektron spinjéről beszélünk, akkor mindig a spin "z" irányú vetületére az S<sub>z</sub>-re gondolunk. Tehát, ha azt mondjuk például, hogy az elektron spinje: „felfelé áll”, vagy „pozitív”, vagy „+1/2”, vagy „+ħ/2”, stb..., akkor ez mind azt jelenti, hogy az S<sub>z</sub> = + ħ/2.

OROSZ L. Kvantummechanika 70. oldal

#### 1.4.3. A spin-pálya kölcsönhatás

Láttuk azt, hogy nincsen olyan klasszikus mechanikai fogalom, amelyik az elektronspinnek felelne meg. Ezért a spin-operátor definiálására a 2. axiómában előírt módszer nem alkalmazható. Mint említettük, most egy inverz eljárást kell követnünk. Azaz a sajátértékek ismeretében kell megkonstruálni a spin "z" irányú komponenséhez rendelhető  $\hat{S}_z$  operátort és a sajátfüggvényeket. A klasszikus fogalom hiánya miatt csak a heurisztikus utat követhetjük. (Heuristica=görög szó, jelentése: feltalálás, valamire való rájövés.) Legyen a  $\chi(\xi)$  spin állapotfüggvény valamilyen  $\xi$  változó függvénye, amit "spin változónak" hívunk. A +ħ/2 sajátértékhez tartozzon az  $\alpha(\xi)$  sajátfüggvény, a -ħ/2 sajátértékhez tartozzon a  $\beta(\xi)$  sajátfüggvény. A továbbiakban mindig így fogunk ezekre hivatkozni.

Nem szükséges, hogy valamiféle konkrét klasszikus kép kapcsolódjon ezekhez, hiszen a dolgok lényegénél fogva ez amúgy is lehetetlen volna. Valamiféle támpontot nyújthat az, ha a spin egy adott nagyságú, klasszikus vektorként képzeljük el, de azzal a megszorítással, hogy a skalár komponensei eleget tesznek a kvantummechanikai törvényeknek. Jelen esetben a "z" irányú komponens csak kétféle ("fel" vagy "le") lehet, valamint az "x" és az "y" vetület teljesen határozatlan. A  $\xi$  változó, némi fantáziával, a vektor  $\vec{\nu}$  polárszögéből absztrahálható.

OROSZ L. Kvantummechanika 71. oldal

Egy elektron fizikai viselkedését az atomban nem csak az őt reprezentáló elektronfelhő szabja meg, hanem az elektron spinje is. Mindezen tulajdonságokat együttesen megadó állapotfüggvényt "spin-pályának"

nevezzük. A spin-pálya állapotot az atomban négy kvantumszám fogja megadni  $(n, l, m_l, m_s)$  és az állapotfüggvény négy változónak  $\{x, y, z, \xi\}$  a függvénye. Az elmondottak miatt az elektron állapot jelölésére a  $\Phi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \xi)$  szimbólumot fogjuk használni. Ez a jelölés azt is kifejezi, hogy az elektronfelhő eloszlása (azaz a megtalálási valószínűség!) függ az elektron spinjétől is. Ennek oka az úgynevezett "spin-pálya" kölcsönhatás. Ennek szemléletes fizikai tartalma az, hogy az elektronnak a pályamozgásból származó  $\vec{M}_L$  és a saját  $\vec{M}_S$  mágneses momentuma (hasonlóan, mint két mágneses dipólus) kölcsönhatásba lép egymással. Az ebből adódó  $V_{SL} = -a \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$  potenciális energia jellemzi a spin-pálya kölcsönhatást. Ha ezt elhanyagoljuk, azaz ha ez a (kölcsönhatásra jellemző) operátor nem szerepel a Hamilton operátorban, akkor a teljes  $\Phi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \xi)$  állapotfüggvény szeparálható lesz és előállítható egy  $\Psi_{n,l,m_l}(\vec{r})$  pálya állapotfüggvény és egy  $\chi_{m_s}(\xi)$  spinfüggvény szorzataként. A pályaállapotokat most már csak "külső" tényezők határozzák meg, az elektron spinjétől független lesz.

Ezek után pontosíthatjuk a már ismertetett Pauli elvet. Eszerint egy elektronrendszerben (pl: egy atomban) nem lehet két elektron ugyanabban a spin-pálya állapotban. Illetve (ha a spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor) egy pályaállapotban maximum két ellentétes spinű elektron lehet  $[\uparrow\downarrow]$ . Az atomok elektronszerkezetét szemléltető blokk diagramban egy  $\square$  blokk egy pályaállapotot reprezentál. A Hund szabály szerint az alhéjak betöltése úgy történik, hogy a pályaállapotokban egyedül lévő elektronok (ún. "nem kompenzált spinek") száma mindig a lehető legnagyobb legyen.

**FOLYTATÁSA: FIZ32MC**