

1. Bevezetés az atomfizikába

A XIX. század végén és a XX. század elején számos, az anyag szerkezetével kapcsolatos, új tényt fedeztek fel. Kiderült például, hogy az atomok elektronokból és magból állnak, hogy az atom elektronjainak viselkedése, illetve az elektromágneses sugárzás és az atomok kölcsönhatása a korábban univerzálisnak hitt fizikai törvényekkel számos esetben nem értelmezhető. Ezeknek a tapasztalatoknak a magyarázata kezdetben még sikerült különféle önkényes feltevések elfogadásával, de az értelmezés nehézségei jelezték, hogy az anyag szerkezetének megértése a fizikai szemlélet komoly változását teszi szükségessé. Végül sikerült a jelenségeket egy egységes elmélet keretében értelmezni, amely – mint várható volt – a "klasszikus" fizika szemléletmódjától gyökeresen eltérő elemeket tartalmaz. Ez az új elmélet a *kvantumelmélet*. Itt magával az elmélettel részletesen nem foglalkozunk, az alábbiakban inkább azokat a jelenségköröket vizsgáljuk, ahol klasszikus fizika érvényét veszíti, megismerkedünk továbbá a kvantumelmélet új fogalmaival, mennyiségeivel, alaptörvényeivel és eredményeivel, amelyek a jelenségek megértéséhez szükségesek.

1.1 A mikrorészecskék viselkedése

A klasszikus fizika törvényei három területen mutatkoztak elégtelennek a jelenségek értelmezésében. Az egyik problémát az okozta, hogy az elektromágneses sugárzás az anyaggal való kölcsönhatása során megmagyarázhatatlan tulajdonságokat mutat, a másik probléma az anyag fénykibocsátásának és fényelnyelésének értelmezésénél lépett fel, a harmadik probléma forrása pedig az atomi méretű részecskék, az ún. *mikrorészecskék* sajátos viselkedése volt. Először ezekkel a problémákkal foglalkozunk, majd kitérünk arra, hogy hogyan lehet a mikrorészecskék sajátos viselkedését kvantitatív módon leírni.

1.1.1 Elektromágneses sugárzás a klasszikus fizikában

A klasszikus fizika törvényeinek ellentmondó tények egy része azzal az ismert tapasztalattal függ össze, hogy az anyagok elektromágneses hullámokat – más néven elektromágneses sugárzást bocsátanak ki magukból, és a rájuk eső elektromágneses sugárzást képesek elnyelni. Ezért először röviden összefoglaljuk az elektromágneses sugárzásra vonatkozó alapvető klasszikus ismereteket.

Az elektromos töltéssel rendelkező testeknek a töltésük miatt fellépő kölcsönhatását az elektromos és mágneses erőtér segítségével írhatjuk le. A kölcsönhatás úgy működik, hogy egyrészt minden töltés maga körül elektromos és/vagy mágneses teret, másnéven elektromágneses teret hoz létre, másrészt az elektromágneses erőtér a töltésekre erőt fejt ki. Így azt mondhatjuk, hogy két töltött test kölcsönhatása az elektromágneses erőtér közvetítésével valósul meg. Egy kiszemelt töltésre ható erő megadásához így tulajdonképpen nincs szükség a másik kölcsönható partner sajátosságainak ismeretére, csupán az általa létrehozott elektromágneses teret kell ismernünk. Ha pl. egy Q töltés \mathbf{v} sebességgel mozog valamilyen más töltések által létrehozott \mathbf{E} térerősségű elektromos és \mathbf{B} indukciójú mágneses erőtérben, akkor a rá ható \mathbf{F}_Z erő, az ún. *Lorentz-erő*, az ismert

$$\mathbf{F}_L = Q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1)$$

kifejezéssel adható meg (itt a "x" jel vektorszorzatot jelöl).

Az elektromágneses erőtér létrehozásához (pl. azonos mennyiségű pozitív és negatív töltésből álló semleges test töltéseinek szétválasztásához) munkát kell végezni, amely munka révén a létrehozott *elektromágneses erőtérben energia* halmozódik fel.

Tudjuk, hogy az elektromágneses erőtér időbeli változása a térben meghatározott sebességgel (ez a fénysebesség, amely vákuumban $c=3 \cdot 10^8$ m/s) tovaterjed, *elektromágneses hullám* jön létre. Az elektromágneses hullám energiát visz magával, vagyis létrejötté az elektromágneses erőtér energiájának sajátos transzportját teszi lehetővé. Az elektromágneses hullám energiaszállító képességére utal az *elektromágneses sugárzás* elnevezés.

Egy hozzánk képest nyugvó elektromos töltés elektromos teret, egyenletesen mozgó töltés elektromos és mágneses teret hoz létre maga körül. Kimutatható, hogy a fenti két esetben az erőtér és a benne felhalmozott energia a töltéstől nem szakítható el, mintegy hozzá van láncolva. Ha azonban a töltés gyorsul, akkor a körülötte kialakuló, időben változó elektromágneses erőtér elektromágneses hullámot kelt, amely a töltésről leszakadva a térben tovaterjed, és energiát visz magával: a *gyorsuló töltés elektromágneses sugárzást bocsát ki* magából. Természetesen a hétköznapi értelemben lassulónak nevezett töltés is sugároz, aminek közismert megnyilvánulása a fékezési röntgensugárzás létrejötté: nagysebességű elektronok egy fémtömbbe ütközve lefékeződnek és elektromágneses sugárzást (röntgensugárzást) bocsátanak ki (ezt a jelenséget használják ki a röntgensugárzás létrehozására a röntgenkészülékekben).

Elektromos töltéssel rendelkező testek azonban nemcsak sugározni képesek, hanem a rájuk eső elektromágneses sugárzást el is nyelhetik. Ha ugyanis az anyag egy töltött részecskéjét elektromágneses sugárzás éri, akkor a sugárzás elektromágneses tere az (1) Lorentz-erő miatt a részecskét felgyorsítja, miáltal a test a ráeső sugárzás egy részét elnyeli (abszorbeálja).

A fenti két folyamat teszi lehetővé, hogy két test kölcsönhatásba léphet egymással úgy is, hogy az egyik a másiknak elektromágneses sugárzás formájában energiát ad át. Ennek a jelenségnek számos konkrét példáját ismerjük.

Az elektromágneses sugárzás útján történő energiaátadás közismert példája az elektromágneses hullámokkal megvalósított távközlés (rádió, TV): egy rádióadóban pl. a továbbítandó elektromos jellel (váltakozó áram) rezgőmozgásba (gyorsuló mozgás) hozzák az adóantenna elektronjait, amelyek ennek megfelelő elektromágneses sugárzást bocsátanak ki. Ennek a sugárzásnak egy része eléri a vevőkészülék antennáját, és a benne lévő elektronokat a sugárzás elektromos tere a Lorentz erő révén rezgésbe hozza. Az elektronoknak ez a rezgőmozgása (váltakozó áram) azután a vevőkészülékben létrehozza a leadott jelnek megfelelő elektromos jelet.

A sugárzásos energiaátadás másik, közismert példája a korábban már említett *hőmérsékleti sugárzás* kibocsátása és elnyelése. Tapasztalati tény, hogy az anyagok a hőmérsékletüktől függően különböző hullámhosszú elektromágneses sugárzást bocsátanak ki magukból, s a rájuk eső sugárzás egy részét elnyelik. A klasszikus, de már bizonyos anyagszerkezeti ismereteket is felhasználó elgondolás szerint ez az elektromágneses sugárzás úgy jön létre, hogy az atomokat vagy molekulákat alkotó töltött részecskék a hőmozgás hatására rezgésbe jönnek, s a töltéseknek ez a (gyorsuló) mozgása kelti az elektromágneses sugárzást. Az ilyen sugárzás frekvenciája a rezgő rendszer frekvenciájával azonos. Ha ez a sugárzás egy másik testre esik, akkor a sugárzás elektromágneses tere rezgésbe hozza a töltött részecskéket, és így a sugárzásban terjedő energia egy része a rezgés energiájává alakul: az anyag elnyeli azt.

Az életünkben teljesen természetesnek számító látható fény, az orvosi gyakorlatból ismert röntgensugárzás és a sokat emlegetett veszélyforrás, a gamma sugárzás ugyancsak elektromágneses sugárzás. A különböző körülmények között létrejött elektromágneses sugárzások lényegében a kibocsátott hullám hullámhosszában (frekvenciájában) térnek el egymástól, és ez eredményezi azt, hogy az anyaggal való kölcsönhatásaik, az anyagra gyakorolt hatásaik is eltérők.

A fentiek alapján a sugárzás elnyelése és kibocsátása töltéssel rendelkező atomi rezgő rendszerek, un. *atomi oszcillátorok* rezgéseivel hozható kapcsolatba. Egy adott oszcillátor a rendszer sajátosságainak megfelelő frekvenciákon rezeghet, adott frekvencián pedig energiája csak a rezgés amplitúdójától függ. Ez azt jelenti, hogy a klasszikus oszcillátor energiája tetszőleges értékeket vehet fel, s a gerjesztő hatástól függően folytonosan változhat.

1.1.2 Az elektromágneses sugárzás részecske-sajátságai

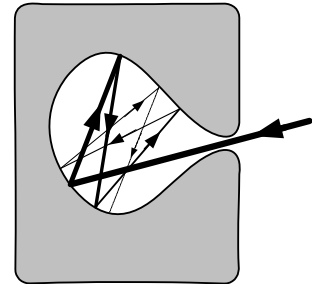
Évszázadokkal ezelőtt Newton, a fényvisszaverődést magyarázva feltételezte, hogy a fényben valamiféle golyócskák terjednek, amelyek a tükörrel rugalmasan ütközve, arról visszaverődnek. A fényinterferencia jelensége viszont rámutatott ennek az elképzelésnek a hiányosságaira, és egyben bizonyítékot szolgáltatott a fény hullámtermészete mellett. A hullámelmélet sikerei révén azután a "részecske modell" feledésbe merült. A XX. század elején azonban számos tapasztalat gyűlt össze, amelyeknek értelmezésére a hullámelmélet nem volt képes, és újra elő kellett venni a részecske-hipotézist.

1.1.2.1 A fekete test sugárzása

Az elektromágneses sugárzás és anyag kölcsönhatására vonatkozó klasszikus fizikai elképzelések első látványos kudarcához annak a kérdésnek a tanulmányozása vezetett, hogy egy üreges test belsejében kialakuló hőmérsékleti sugárzás energiája hogyan

oszlik el a különböző frekvenciájú összetevők között, és ez az eloszlás hogyan függ a hőmérséklettől. A kísérletek tanúsága szerint mind a sugárzás összenergiáját, mind pedig az energia frekvencia szerinti eloszlását az üreges test hőmérséklete szabja meg (ezért kapta a hőmérsékleti sugárzás nevet).

Hogy a kapott mérési eredményeket értelmezni tudjuk, először vizsgáljuk meg, hogy milyen módon lehet az üregben kialakult sugárzásról információt szerezni. A vizsgálati módszer elvben igen egyszerű: az üreg falán egy kis lyukat alakítanak ki, ezen át kiengedik a sugárzás egy kis részét (annyit, hogy az egyensúlyi állapot kialakulását ez ne zavarja) és ennek tulajdonságait vizsgálják. Az üregegy nyitott lyuk jellegzetessége, hogy a ráeső sugárzást gyakorlatilag teljesen elnyeli, hiszen a bejutott sugárzás a belső falon ide oda verődik, és igen kicsi a valószínűsége, hogy a lyukon újra kijut (ábra). Az ilyen, a ráeső sugárzást teljesen elnyelő testet (*abszolút fekete testnek*) nevezik, és az üregből a lyukon át kijövő egyensúlyi sugárzás ezért a *fekete test sugárzása* elnevezést kapta. (Az elnevezés magyarázata az, hogy nem túl magas hőmérsékleten – így például szobahőmérsékleten is – egy üregben a sugárzási energia döntően infravörös sugárzás formájában van jelen, így az általa kibocsátott sugárzás nem látható: a lyuk teljesen feketének látszik.)



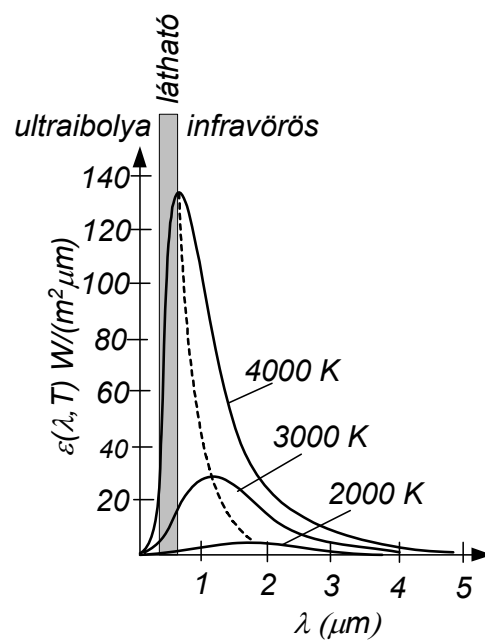
A fekete test sugárzásának hullámhossz (vagy frekvencia) szerinti eloszlását úgy tanulmányozzák, hogy a sugárzás különböző hullámhosszú (frekvenciájú) összetevőit optikai ráccsal vagy prizmával különböző helyekre térítik el, és megméri az egyes összetevőkben terjedő energiát.

A gyakorlatban természetesen egy adott λ hullámhosszú összetevő intenzitását nem lehet megmérni (ehhez pontszerű érzékelőre lenne szükség). A mérés során a mérési eljárástól és a vizsgált hullámhossztól függő λ és $\lambda+d\lambda$ közé eső hullámhossz-intervallumban kisugárzott $dI(\lambda, T)$ intenzitást határozzák meg, állandó T hőmérsékleten. Hogy a különböző λ hullámhosszakon, különböző $d\lambda$ hullámhossz-intervallumokkal végrehajtott mérések eredményei összehasonlíthatók legyenek, az egységnyi hullámhossz-intervallumban kisugárzott

$$\varepsilon(\lambda, T) = \frac{dI(\lambda, T)}{d\lambda}$$

intenzitást számítják ki¹. A mérést különböző hullámhosszaknál elvégezve megkapható az $\varepsilon(\lambda, T)$ eloszlási függvény, amelynek jellegzetes menetét különböző hőmérsékleteken az ábra mutatja.

Az $\varepsilon(\lambda, T)$ függvény definíciójából következik, hogy adott hőmérsékleten a teljes hullámhossz-intervallumban kisugárzott intenzitás a megfelelő eloszlási



¹ A frekvencia szerinti eloszlás hasonló módon jellemezhető az $\varepsilon(\nu, T) = \frac{dI(\nu, T)}{d\nu}$ mennyiséggel.

görbe alatti területtel ($I = \int_0^{\infty} \varepsilon(\lambda, T) d\lambda$) egyenlő. Az ábráról ennek alapján

megállapítható, hogy a kisugárzott összintenzitás a hőmérséklet emelkedésével nő.

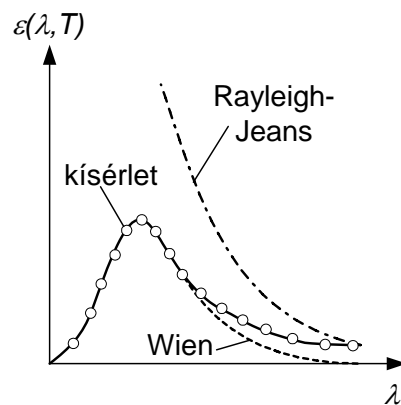
A kísérleti eredmények további jellegzetessége az, hogy az intenzitáseloszlásnak minden hőmérsékleten maximuma van egy meghatározott hullámhosszon (frekvencián), és minél magasabb a hőmérséklet, annál alacsonyabb ez a hullámhossz (és annál magasabb a maximumfrekvencia). Ez azt jelenti, hogy a hőmérséklet emelésével az üreg sugárzási energiájának egyre nagyobb hányada jelenik meg rövidebb hullámhosszú (magasabb frekvenciájú) sugárzás formájában. A maximum-hullámhossz változását az ábrán szaggatott vonal mutatja.

Ez az eredmény a hétköznapi tapasztalattal is egyezik: pl. egy vasdarabot egyre magasabb hőmérsékletre hevítve először vörösen izzik, azután a színe a rövidebb hullámhosszú sárga felé tolódik el, majd a még rövidebb hullámhosszú sugárzás megjelenésével fehéren izzik, végül kékes árnyalatú lesz.

A fenti ábrán bemutatott kísérleti eredményeket természetesen megpróbálták a klasszikus fizika törvényei alapján megmagyarázni. A klasszikus elképzelés szerint a sugárzás elnyelése és kibocsátása töltéssel rendelkező atomi rezgő rendszerek, ún. *atomi oszcillátorok* rezgéseivel hozható kapcsolatba. Egy adott oszcillátor a rendszer sajátosságainak megfelelő frekvenciákon rezeghet, adott frekvencián pedig energiája csak a rezgés amplitúdójától függ. Ez azt jelenti, hogy a klasszikus oszcillátor energiája tetszőleges értékeket vehet fel, és a gerjesztő hatástól függően folytonosan változhat.

A klasszikus gondolatmenet szerint az üreg falát alkotó atomok és molekulák egymással kölcsönhatásban állnak, és mivel a hőmozgás miatt állandó mozgásban vannak, az őket alkotó töltött részecskék is állandó rezgőmozgást végeznek. Eközben természetesen, mint oszcillátorok sugároznak. Az ilyen módon létrejött elektromágneses sugárzás intenzitását alapvetően a hőmozgás átlagos "intenzitása", azaz a test hőmérséklete szabja meg.

Az üreg belsejében a fal egyik része által kibocsátott sugárzást a fal más részei elnyelik, és ha az üreg hőmérséklete állandó, akkor az üregben kialakul egy dinamikus egyensúly: a fal által adott idő alatt kisugárzott energia megegyezik az általa ugyanezen idő alatt elnyelt energiával. Az így kialakult egyensúlyi elektromágneses sugárzás sajátosságait megpróbálták a klasszikus fizika módszereivel meghatározni, és elméleti úton levezették az $\varepsilon(\nu)$ függvényt. A kapott eredmények azonban a tapasztalati görbével nem egyeztek. A nagy hullámhosszak tartományában a kísérletekkel jól egyező összefüggést kapott J.W.S. Rayleigh és J.H. Jeans, de összefüggésük szerint növekvő frekvenciákhoz egyre nagyobb és nagyobb energia tartozik, ami végtelen nagy összenergiát eredményezne (ábra). Egy másik $\varepsilon(\nu)$ formulát vezetett le W. Wien, ami már nem vezet végtelen összenergiára, de csak nagy frekvenciákon egyezik a tapasztalattal. A problémát végül M. Planck oldotta meg, lényegében úgy, hogy megkereste annak matematikai feltételét, hogy a Rayleigh-Jeans törvény a frekvenciával ne divergáljon, hanem egy véges maximumon áthaladva a Wien-törvénybe menjen át. Az ehhez szükséges feltevések azonban igen meglepőek voltak, amelyeket a klasszikus fizika sugárzásról alkotott képével nem lehetett összeegyeztetni.



- A kísérletekkel egyező formula levezetésénél Plancknak fel kellett tételeznie, hogy
- az atomi oszcillátorok energiája nem változhat folytonosan, hanem csak meghatározott diszkrét ΔE értékekkel,
 - egy ν frekvenciájú oszcillátor energiájának ez a diszkrét megváltozása a frekvenciával arányos

$$\Delta E = h\nu,$$

ahol h a kísérleti eredményekkel való összehasonlításból meghatározandó konstans. Ez azt jelenti, hogy egy ν frekvenciájú atomi oszcillátor energiája csak az

$$E_n = nh\nu + \text{állandó}$$

diszkrét, értékeket veheti fel (n egész szám).

A fentiekből az is következik, hogy az üregben jelenlévő sugárzás energiája is csak a fenti összefüggésnek megfelelő $h\nu$ adagokban, *kvantumokban* változhat.

A klasszikus fizika törvényeinek ellentmondó fenti feltevésekkel Planck az

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{I}{e^{kT} - 1} \quad \text{illetve az ezzel egyenértékű} \quad \varepsilon(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{I}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

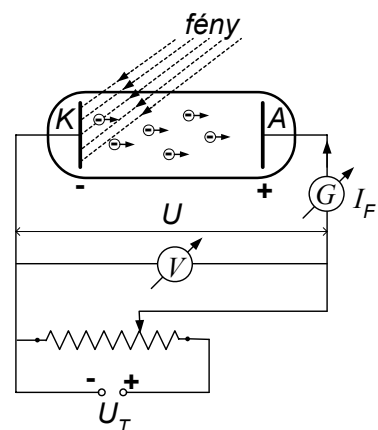
összefüggést kapta, ami a $h=6.62 \cdot 10^{-34}$ Js érték választásával a kísérleti eredményekkel igen jól egyezik (itt c a fénysebesség, T az abszolút hőmérséklet, k a Boltzmann-állandó. Az összefüggést *Planck-féle sugárzási törvénynek*, a benne szereplő, és a modern fizikában alapvető szerepet játszó h számot pedig *Planck-állandónak* nevezik. A meghatározott energiaadagok léte látszólag ellentmond annak a tapasztalatnak, hogy a sugárzási energia folytonosan változik. Az ellentmondás megoldása az, hogy a $h\nu$ érték a vizsgált esetekben olyan kicsi, hogy a használt mérőeszközökkel ilyen energiaeltérések nem mutathatók ki.

1.1.2.2 A fotoeffektus

A fekete test sugárzásának vizsgálatából elsősorban az derül ki, hogy az atomi oszcillátorok csak diszkrét energiákon rezeghetnek, magáról a sugárzásról azonban nem kapunk közvetlen információt. Az atomos szerkezetű anyaggal kölcsönhatásba lépő sugárzás viselkedését közvetlenebb módon ismerhetjük meg a *fotoeffektus* tanulmányozása útján.

Fotoeffektusnak nevezzük azt a jelenséget, hogy bizonyos anyagok (pl. alkáli fémek) felületéről fénybesugárzás hatására elektronok lépnek ki. A jelenséget az alábbi ábrán látható elrendezéssel vizsgálhatjuk. Egy fotoeffektust mutató fémlapot (K) elektromos kivezetéssel ellátva vákuumcsőbe helyezünk, amelyben egy másik, ugyancsak kivezetéssel ellátott – a K lappal nem érintkező – fémlap (A) is van. A két kivezetést egy külső áramkörbe kapcsoljuk, amely az elvégzendő vizsgálatról függően változhat. Az elektronok keltéséhez a kísérletben olyan fényforrást alkalmazunk, amelynek fénye közelítőleg monokromatikus (azaz csak egy szűk frekvenciasávba eső fényt bocsát ki).

Az ábra elrendezésében maga az effektus és az annak során kilépő elektronok mennyisége vizsgálható. Külső behatás nélkül az árammérő nem mutat áramot, hiszen a vákuumcsőben nincsenek töltéshordozók. Ha a K lapot megvilágítjuk, akkor a tapasztalat szerint a körben áram jön létre. A jelenséget csak úgy értelmezhetjük, hogy a fény hatására a fémből elektronok lépnek ki, és ezek szolgáltatják az áramot, amely



arányos az időegység alatt kilépő elektronok számával. Az ily módon kilépő elektronokat *fotoelektronoknak*, a létrejött I_F áramot pedig *fotoáramnak* nevezik.

A jelenség tanulmányozásának egyik módszere az lehet, hogy megvizsgáljuk a fotoáramnak a különböző paraméterektől (idő, fényintenzitás, a fény frekvenciája) való függését.

A jelenség vizsgálatára egy másik lehetőséget az elektronkilépés energetikai viszonyainak tanulmányozása ad. A klasszikus fizikai kép szerint a fémekben az elektronok kötött állapotban vannak, ezért maguktól nem hagyják el a fémeket. Az elektront a fémről egy az anyagtól függő W_0 munka (energiaközlés) árán tudjuk kiszakítani, amit *kilépési munkának* nevezünk. A kísérletben a szükséges energiát a fény adja át az elektronnak. Ha a beeső fénysugárzásból egy elektron E energiát nyel el, akkor ez egyrészt fedezheti a kilépési munkát, másrészt az elektronnak E_m mozgási energiát adhat:

$$E = W_0 + E_m$$

Ha $E = W_0$, akkor létrejön a fotoeffektus, az $E > W_0$ esetben pedig a kilépő elektronnak kinetikus energiája is lesz.

A legnagyobb kinetikus energiára szert tett elektronok E_m^{max} kinetikus energiája az ábrán látható berendezéssel vizsgálható. Itt az alkalmazott külső feszültség a K lapról kilépő elektronokat fékezi, így a fékező feszültség növelésével elérhető, hogy még a legnagyobb sebességgel (kinetikus energiával) induló elektronok sem érik el az A lemezt, hanem visszafordulnak, s így fotoáramot nem észlelünk. A fotoáram megszűnése annál az U_0 feszültségnél következik be, amelynél az elektromos ellentér eU_0 munkája éppen egyenlő a maximális kinetikus energiával (e az elektron töltése).

$$eU_0 = E_m^{max}$$

Ebből az összefüggésből az U_0 feszültség (az ún. *lezárási feszültség*) mérése útján meghatározható az E_m^{max} maximális kinetikus energia.

A fenti berendezésekkel elvégezhető mérések közül többnek az eredménye is olyan, amit a klasszikus fizika nem tud értelmezni. Ilyenek a következők.

- 1.) Ha van fotoeffektus, akkor a fotoáram a fénybesugárzást követően általában igen gyorsan (kb. 10^{-9} s-on belül) megindul (ábra). Ez a tapasztalat ellentmondásban van a klasszikus képpel. Ha ugyanis a beérkező fény energia-áramsűrűsége Φ , és az a felület amelyből az elektron begyűjtheti a fényenergiát A_e , akkor Δt idő alatt az elektronra

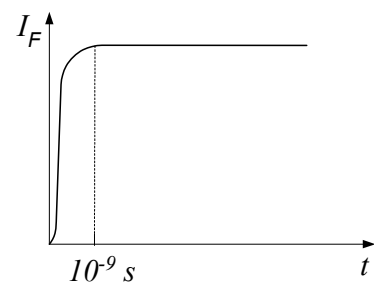
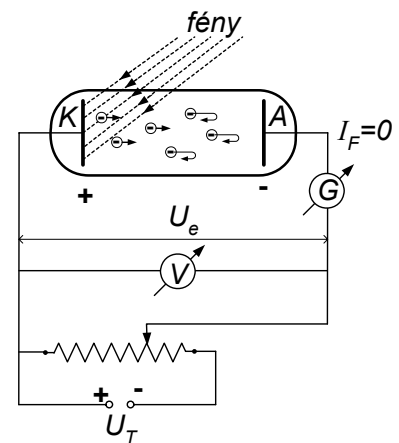
$$\Delta E = \Phi A_e \Delta t$$

energia esik. Ebből az összefüggésből következik: ahhoz, hogy egy elektron a kilépéséhez szükséges W_0 energia összegyűljön legalább

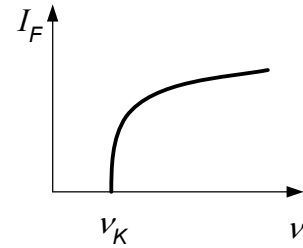
$$\Delta t = \frac{W_0}{\Phi A_e}$$

idő szükséges. A kísérletek során általában

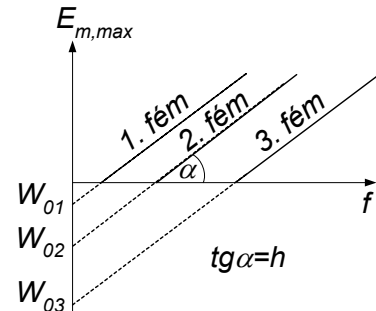
használt fémek és fényforrások esetén a szereplő mennyiségek nagyságrendje: $W_0 \approx 10^{-19}$ J, $\Phi \approx 10^{-5}$ W/m², $A_e \approx 10^{-19}$ m², amiből $\Delta t \approx 10^5$ s ≈ 28 óra, szemben a tapasztalt 10^{-9} s-mal.



- 2.) A besugárzó fény frekvenciáját állandó intenzitás mellett változtatva azt találjuk, hogy van egy kritikus ν_k frekvenciaérték (az ún. *küszöbfrekvencia*), amely alatt a fotoeffektus nem jön létre (ábra). Ez a klasszikus kép alapján teljesen érthetetlen, hiszen a kilépési energia fedezésére alkalmas, a $W_0 = konst \cdot \Phi$ feltételnek megfelelő sugárzási intenzitás bármilyen



- frekvencián biztosítható.
- 3.) Végül, ha a maximális kinetikus energiát (ami a lezárási feszültséggel arányos) mérjük a beeső fény frekvenciájának függvényében, akkor az ábrán látható lineáris összefüggést kapjuk. Ez ugyancsak nem érthető, mert a klasszikus számítások szerint a frekvenciától való függés nem lineáris.



Mindezekre a problémákra a magyarázatot A. Einstein adta meg. Feltételezte, hogy a Planck féle sugárzási törvény levezetésénél "matematikai kényszerűségből" bevezetett $h\nu$ energiaadag nemcsak a sugárzó oszcillátor diszkrét energiaváltozásait adja meg, hanem az energia magában a sugárzási térben is ilyen adagokban van jelen. Ezek az energiaadagok Einstein szerint tömeggel (vö. relativitáselmélet) és impulzussal is rendelkeznek, tehát valamiféle *részecskéknek* tekinthetők. Ezeket a részecskeszerű energiacsomagokat ma *fotonoknak* nevezzük.

A sugárzásra vonatkozó fenti elképzelés szerint a fotoeffektus elemi folyamata az, hogy egy, a fénysugárban haladó foton nekiütközik a besugárzott anyag egy elektronjának, és ha energiája legalább akkora, mint a kilépési munka, akkor az elektron a foton energiaadagját elnyeli és kilép az anyagból. Az energiaadag elnyelésével a foton eltűnik.

A kilépés energiaviszonyait megszabó összefüggés most az elemi folyamatra felírt energia-megmaradási tétel alkalmazásával és az $E=h\nu$ fotonenergia beírásával így alakul

$$h\nu = W_0 + E_m$$

Ennek az egyszerű kifejezésnek a segítségével egy csapásra megoldható a fotoeffektusra vonatkozó összes probléma.

A fotoáram azonnali megindulása (1. tapasztalat) a fotonkép alapján természetes, hiszen az energia már a sugárzásban adagokba koncentráltan terjed, és ha az adag (a foton energiája) elég nagy, akkor annak elnyelése után az elektron azonnal kilép.

A küszöbfrekvencia léte (2. tapasztalat) következik a fenti egyenletből, hiszen az elektronkilépés feltétele $h\nu \geq W_0$, amiből következik, hogy fotoeffektus csak a

$$\nu_k = \frac{W_0}{h}$$

küszöbfrekvencia felett van.

Az Einstein-féle összefüggés megmagyarázza a maximális kinetikus energia és a frekvencia közti arányosságot (3. tapasztalat) is, és az is látszik, hogy a lineáris összefüggés meredeksége éppen a h Planck-állandó. Ez lehetőséget ad a modell ellenőrzésére, hiszen a Planck állandónak így meghatározott értékét össze lehet hasonlítani a fekete test sugárzásának vizsgálatánál kapott értékkel. A két esetben h -ra a mérési hibán belül ugyanazt az értéket kapjuk.

1.1.2.3 A Compton-effektus

Az elektromágneses sugárzás részecskeszerű viselkedését legmeggyőzőbben az ún. Compton-effektus mutatja. Ennek lényege a következő.

Ha lazán kötött (gyakorlatilag szabad) elektronokat tartalmazó anyagrétegre (pl. gáz) λ hullámhosszú röntgensugárzást bocsátunk, akkor a sugárzás az elektronokkal való kölcsönhatás során szóródik, és az anyagból egy megváltozott λ' hullámhosszú sugárzás lép ki. Az A.H.Compton által elvégzett mérések szerint a λ' hullámhossz függ attól, hogy milyen irányban szóródott sugárzást vizsgálunk, más szóval λ' függ az ábrán látható ϑ szórási szögtől. A kísérletileg tapasztalt összefüggés szerint

$$\lambda - \lambda' = \lambda_c (1 - \cos \vartheta),$$

ahol λ_c egy a kísérletekből meghatározható állandó, amelyet Compton-hullámhossznak neveznek.

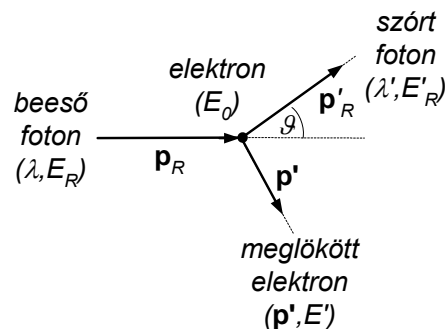
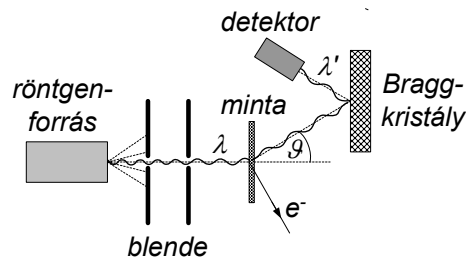
A jelenség klasszikusan értelmezhetetlen, hiszen a klasszikus oszcillátormodell szerint a szórt sugárzás hullámhossza (frekvenciája) nem lehet más, mint a beérkezőé, s a tapasztalt szögfüggés sem érthető.

A magyarázathoz ismét az elektromágneses sugárzás részecske-képét kell segítségül hívni. Ha ugyanis a sugárzást mint részecskék áramát fogjuk fel, akkor az "elektromágneses részecskék" irányváltozását (azaz a szóródást) egy ütközés eredményeként foghatjuk fel, és az ütközésben megváltozhat a beérkező részecske energiája is.

Ha a részecskét $h\nu$ energiájú fotonnak tekintjük, akkor az energiaváltozás frekvencia- (és hullámhossz-) változással is jár.

Az ütközési folyamatra az energia (E)-megmaradás- és az impulzus (p)-megmaradás tételét felírva (figyelembe véve hogy nagysebességű objektumok esetén a relativitáselmélet összefüggéseit kell használni), a kísérletileg tapasztalt összefüggés valóban levezethető.

A Compton-effektus magyarázatát tehát ismét azzal a feltételezéssel tudjuk megadni, hogy egy ν frekvenciájú elektromágneses sugárzásban (hullámban) $E=h\nu$ energiájú, részecskeszerűen viselkedő fotonok terjednek.



1.1.3 Színképvonalak és diszkrét atomi energiák

A hőmozgás által keltett hőmérsékleti sugárzás, amellyel az előző pontban foglalkoztunk, folytonos spektrumú sugárzás. Ez azt jelenti, hogy a sugárzás energiája gyakorlatilag folytonosan oszlik el a különböző frekvenciákon, a sugárzásban kisebb-nagyobb arányban mindenféle frekvencia képviselve van. Ez, mint később látni fogjuk, szorosan összefügg az ilyen sugárzást kibocsátó anyag szerkezetével: ezek az anyagok sok atomot tartalmazó molekulákból, vagy egymással erős kölcsönhatásban álló atomokból állnak (pl. szilárd anyagok vagy folyadékok). A tapasztalat azt mutatja, hogy olyan anyagok esetén, amelyek egymással gyenge kölcsönhatásban álló atomokból állnak (ilyenek a gázok) külső energiaközlés hatására másfajta elektromágneses sugárzás is létrejöhet. Ha egy ilyen anyaggal, például egy gázzal, energiát közlünk (pl. úgy, hogy elektromos erőterrel gázkisülést hozunk létre benne), akkor olyan sugárzást észlelünk, amelyben csak meghatározott, a

kibocsátó atomtól függő, és egymástól jól elkülöníthető, $\nu_1, \nu_2, \nu_3 \dots$, *diszkrét frekvenciák* fordulnak elő. Ez azt jelenti, hogy ha egy ilyen sugárzás energiáját frekvencia (hullámhossz) szerint szétbontjuk, azaz pl. egy prizma segítségével egy ernyő különböző helyeire eltérítjük, akkor csak a diszkrét frekvenciaértékeknek megfelelő helyeken lesz sugárzás. Ha ezt a felbontást a látható fény tartományában végezzük el, akkor tehát folytonosan változó színeloszlás helyett különböző színű, elkülönült vonalakat, *vonalas színeképet* látunk.

Ugyancsak tapasztalati tény, hogy egy atom az őt érő sugárzásból éppen azokon a frekvenciákon képes energiát elnyelni, amelyeket maga is kisugároz.

A klasszikus felfogás szerint mindez azt jelenti, hogy a különálló atomok, mint oszcillátorok, csak meghatározott, és egymástól többnyire jól elkülöníthető frekvenciákon képesek rezegni. Ez elvileg elképzelhető, hiszen egy klasszikus mechanikai rendszernek különböző rezonanciafrekvenciái lehetnek. A jelenség magyarázata azonban rögtön problematikusá válik, ha a pozitív magból és negatív elektronokból felépülő atom rezgéseit valamilyen mechanikai jellegű modellel próbáljuk értelmezni.

A különféle klasszikus atommodellek közül a legnevezetesebb az volt, amely szerint (a Nap és a körülötte keringő bolygók mintájára) az atom egy pozitív magból és a Coulomb-vonzás miatt körülötte keringő elektronokból áll. Ha azonban a keringő elektront szigorúan a klasszikus fizika alapján írjuk le, akkor könnyen beláthatjuk, hogy a diszkrét sugárzási frekvenciákkal, vagyis az atomok vonalas színeképevel ez a modell nem egyeztethető össze. Tegyük fel, hogy az elektron adott frekvenciával kering a mag körül. Ekkor elvileg ugyanilyen frekvenciával sugároz, közben azonban energiája folytonosan csökken, ami együtt jár a pályasugár csökkenésével és a frekvencia folytonos növekedésével. Így egyrészt a kibocsátott sugárzásnak éppen, hogy folytonos frekvencia-eloszlásúnak kellene lennie, másrészt az elektronnak bele kellene esnie a magba, vagyis egy ilyen atom nem lehet stabil.

1.1.3.1 A Bohr-féle atommodell alapfeltevései

Az atommodell problémájának egyfajta megoldásához N. Bohr jutott el, úgy, hogy a klasszikus "naprendszer" modellt a klasszikus fizikától idegen feltevésekkel egészítette ki. Bohr feltételezte, hogy az atomok által kibocsátott sugárzás fotonokból áll, amelyeknek frekvenciáját azonban nem valamilyen klasszikus rezonancia állapotból próbálta származtatni, hanem a foton $h\nu$ energiáját az atom energiaváltozásaival hozta kapcsolatba. Ily módon a vonalas színeképek létezését könnyen meg tudta magyarázni, az alábbi feltételezésekkel:

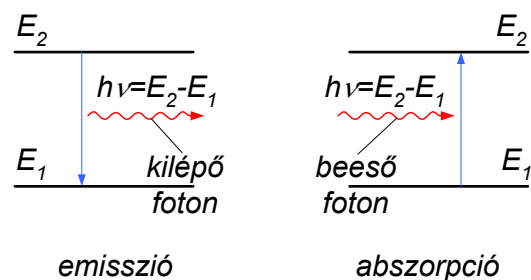
- az atom csak meghatározott diszkrét E_1, E_2, E_3 stb. energiájú állapotokban létezhet,
- ha az atom egy E_i energiájú állapotból alacsonyabb E_j energiájú állapotba megy át, akkor az energiafelesleget foton formájában adja le, és a keletkező foton frekvenciáját az

$$E_i - E_j = h\nu_{ij}$$

egyenlet szabja meg.

Ezekkel a feltevésekkel automatikusan megoldódik a vonalas színekép problémája, hiszen a fenti egyenlet csak meghatározott frekvenciájú fotonok kibocsátását teszi lehetővé.

Az a tapasztalat, hogy az atom ugyanolyan frekvenciájú sugárzást nyel el, mint amilyent kisugároz ugyancsak könnyen érthetővé válik, mert az atom csak olyan fotonot nyelhet el, amely a kiinduló energiaállapotából valamelyik lehetséges magasabb energiaállapotába



viszi át, vagyis amelyre teljesül a fenti egyenlet.

A sugárzás kibocsátásának és elnyelésének ezt a mechanizmusát szemlélteti a következő ábra. Itt az atom két lehetséges energiaszintjét különböző magasságban rajzolt vízszintes vonalak szimbolizálják, és a magasabban rajzolt vonal nagyobb energiát jelent. Az atom energiaváltozását a függőleges nyíl mutatja.

A mag körül keringő elektront feltételező klasszikus atommodellbe Bohr a következőképpen építette be a diszkrét energiákat. Feltételezte, hogy valamilyen okból léteznek olyan – ún. *stacionárius elektronpályák*, amelyeken a keringő elektron nem sugároz. Ezeknek a pályáknak a sugarát (r) Bohr azzal az *önkéntesen választott feltétellel* adta meg, hogy az elektron $L=rmv$ impulzusmomentuma csak a

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

érték egészszámú (n) többszöröse lehet, azaz

$$L = n\hbar$$

(A \hbar jelölés bevezetését az indokolja, hogy az atomi rendszerekkel kapcsolatos megfontolásokban az impulzusmomentum elemi "adagjának" szerepét játssza, és ezért gyakran előfordul.)

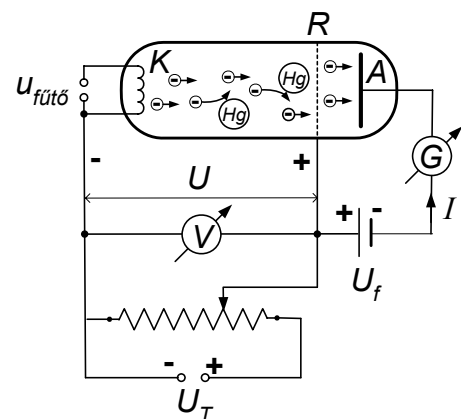
Ha a mag Coulomb erőterében körmozgást végző elektrorra felírjuk a mozgásegyenletet, majd alkalmazzuk a fenti Bohr-féle *kvantumfeltételt*, akkor kiderül, hogy ilyen feltételek mellett az elektron csak meghatározott sugarú pályákon mozoghat, és az egyes pályákon meghatározott, diszkrét energiaértékkel rendelkezik.

A Bohr modell alapján számított energiaértékekkel a H atom színeke meglepő pontossággal magyarázható, de a stacionárius pályák és az ezeknek megfelelő diszkrét energiaszintek létezése ismét olyan feltevés, amely a klasszikus fizika törvényeivel nem értelmezhető.

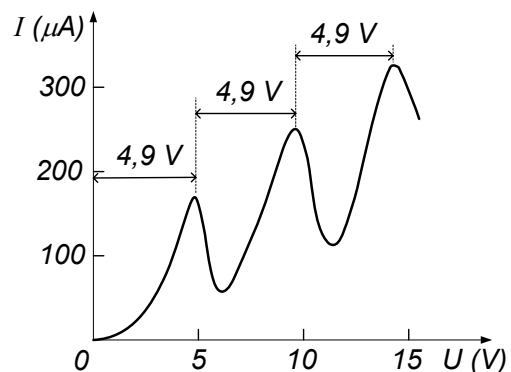
1.1.3.2 Franck--Hertz-kísérlet

Bármilyen furcsa is, hogy egy kötött részecske energiája nem változhat folytonosan, a diszkrét energiaszintek létezését el kell fogadnunk, hiszen azt a spektroszkópai tapasztalatok mellett számos közvetlen kísérleti tény is igazolja. Az egyik ilyen kísérletet J. Franck és G. Hertz végezte el először, és ennek lényege a következő. Egy edényben (ábra), amelyben kisnyomású Hg-gőz van, fémzárlat (K) izzítása útján elektronokat keltünk, majd ezeket a fémzárlat és egy az elektronok számára átjárható rács (R) közé kapcsolt U feszültséggel felgyorsítjuk. Az elektronok útjuk során ütközhetnek a Hg-atomokkal, és ha ezután átjutnak a rácson, akkor egy gyenge fékező elektromos erőterbe kerülnek, amelynek célja az, hogy a nagyon kis energiájú elektronok ne érjék el az A elektródot. Az A elektródra eljutott elektronok mennyiségét a körben folyó I áram nagysága mutatja. Az I áramot az U gyorsítófeszültség függvényében mérve az alábbi ábrán látható eredményt kapjuk. A feszültség növelésével az I áram kezdetben nő, ami megfelel a várakozásnak. Egy bizonyos U_1 gyorsítófeszültség elérésekor, azaz az e töltésű elektronok ennek megfelelő

$$E_{m1} = eU_1$$



mozgási energiájánál azonban az áram hirtelen leesik. Ez azt jelenti, hogy ennél a mozgási energiánál megváltozik az elektronok és a Hg-atomok kölcsönhatásának jellege: a kisebb mozgási energiáknál az ütközés rugalmas, az E_{m1} értéknél azonban rugalmatlanná válik, vagyis az ütközés során az elektronok elveszítik mozgási energiájukat, és nem tudnak átjutni a gyenge fékező erőterén. A feszültséget tovább növelve, megint nő az áram, majd az $U_2 \approx 2U_1$ feszültségnél újabb áramcsökkenés következik be. Ennek oka a fentiek szerint az lehet, hogy a $2E_m$ mozgási energiára felgyorsult elektronok két ütközéssel ismét teljesen elveszítik az energiájukat és nem jutnak el az A elektródra. A további maximumok helyének magyarázata hasonló.



A kísérlet tehát egyértelműen mutatja, hogy a Hg-atom csak meghatározott nagyságú energiát tud a vele ütköző elektrontól felvenni, vagyis az energiája csak meghatározott értékkel változhat.

A kísérlet alapján meg lehet állapítani a két lehetséges állapot energiakülönbségét is. A Hg-atom esetén $U_1 = 4.86$ V, ami azt jelenti, hogy a kérdéses energiakülönbség $E_2 - E_1 = 4.86$ eV $= 7.84 \cdot 10^{-12}$ J (Az eV egység az atomfizikában gyakran előfordul: azt az energiát jelenti, amelyre egy elektron 1 V potenciálkülönbség hatására tesz szert. Így a fenti esetben a 4.86 V-os gyorsító feszültség az elektront 4.86 eV energiára gyorsítja fel).

A kísérletek során sikerült azt is kimutatni, hogy az áram lecsökkenésével (az elektronok lefékeződésével) egyidejűleg a Hg $\lambda = 2.54 \cdot 10^{-7}$ m hullámhosszú, azaz $\nu = 1.18 \cdot 10^{15}$ s⁻¹ frekvenciájú sugárzást bocsát ki. Ez újabb bizonyíték a diszkrét energiaszintek létezésére mellett: a magasabb E_2 energiájú állapotból az alacsonyabb E_1 energiájú állapotba való visszatérés közben a Hg-atom energiáját egy foton formájában adja le. Ezt számszerűen is alátámasztja az a tény, hogy a fenti frekvenciának megfelelő fotonenergia $h\nu = 4.86$ eV, azaz megegyezik az ütközés során létrejött energiaváltozással.

A fenti kísérlet tökéletesített változatával később sikerült kimutatni a Hg-atom számos más diszkrét energiaállapotának létezését is.

1.1.4 A részecskék hullámszerű viselkedése

Láttuk, hogy az elektromágneses sugárzás (pl. a fény) amelynek hullámszerű viselkedése jól ismert (pl. fényinterferencia) bizonyos körülmények között úgy viselkedik, mintha részecskék árama lenne. Az elektromágneses sugárzás e kettős viselkedésének tanulmányozása vezette L. de Broglie-t arra a gondolatra, hogy feltételezze, ez a kettősség érvényes az általunk részecskének ismert objektumokra is. De Broglie szerint tehát a sugárzásnál tapasztalt részecske-hullám kettősség általánosítható, az a mikrovilág általános törvényszerűségének tekintendő. A kérdés az, hogy milyen hullám rendelhető egy klasszikus részecskéhez, és mit mond a tapasztalat ezzel a különös feltevessel kapcsolatban.

1.1.4.1 „Anyaghullámok”, a de Broglie-hullámhossz

A részecskéhez rendelt hullám, vagy egy másik szokásos elnevezéssel „anyaghullám” megtalálásához a foton-analógia adhat támpontot, ezért először foglalkozunk a fotonnak megfelelő, fénysebességgel haladó, tehát nulla nyugalmi tömegű részecské

esetével. A relativitáselméletből tudjuk, hogy egy ilyen részecske energiája és impulzusa között az

$$E = p c$$

összefüggés áll fenn. Másrészt a foton energiája

$$E = h \nu,$$

tehát impulzusa (felhasználva a $\nu = c/\lambda$ hullámtani összefüggést)

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

Ez az összefüggés szigorúan véve csak a fotonra érvényes, de Broglie azonban feltételezte, hogy általános érvényű, és a klasszikus részecskékre is alkalmazható. Így a fenti összefüggés megadja, hogy egy m tömegű, v sebességű, $p = mv$ impulzusú részecskéhez milyen hullámhosszt kell hozzárendelni:

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

Ez a részecskék ún. *de Broglie-hullámhossza*.

A részecskék hullámszerű viselkedését később sikerült közvetlen kísérletekkel igazolni (C. Davisson és L. Germer illetve G.P. Thomson). E kísérletek alapelve a következő. Ha egy hullám a hullámhosszával összemérhető, de annál nagyobb rácsállandójú rácson halad át, akkor az áthaladt hullámban jellegzetes, maximumok és minimumok sorozatából álló intenzitás-eloszlást észlelünk. Ha tehát a fenti összefüggés igaz, akkor várhatóan egy elektronnaláb a de Broglie-hullámhosszával közel azonos rácsállandójú "rácson" történő áthaladás után a hullámoknál tapasztalt periodikus intenzitás-eloszlást mutat.

Ha az e töltésű elektronokat U feszültséggel gyorsítjuk fel, akkor az elektronok p impulzusa, illetve λ hullámhossza az

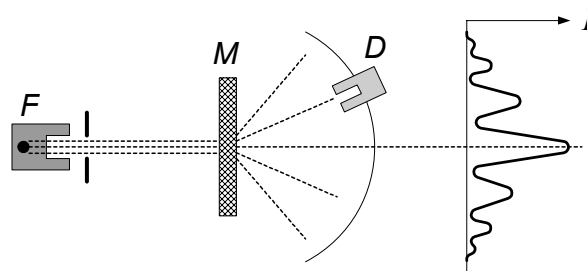
$$eU = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

összefüggésből kapható meg. A gyakorlatban könnyen megvalósítható, 100 V nagyságrendű feszültséget alkalmazva, az elektronok de Broglie-hullámhossza 10^{-10} m nagyságrendű lesz, vagyis a "diffrakciós" kísérlethez nagyságrendben ilyen rácsállandójú rácstra van szükség. Ilyen rácst készíteni nem tudunk, de szerencsére a kristályos anyagok használhatók ilyen rácsként, hiszen ezekben az atomok (vagyis a rács nem áteresztő tartományai) nagyságrendileg ilyen távolságban ismétlődnek.

A kísérletet többféle elrendezésben elvégezték. Ezek egyikében Thomson polikristályos kristálylemezen áthaladó elektronnalábot vizsgált. Az ábrán a mérés elvi vázlatja látható. Egy elektronforrásból (F) megfelelő sebességre felgyorsított elektronnaláb esik a vékony polikristályos mintára (M). A nyaláb a mintán áthaladva szóródik, és a különböző szögek alatt szórt intenzitás fluoreszkáló lemezen közvetlenül megfigyelhető, fotolemezen rögzíthető vagy megfelelő detektorral (D) letapogatható.

Ha egy detektort körbemozgatunk, akkor olyan intenzitáseloszlást (I)

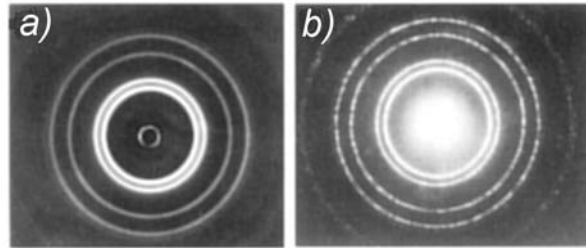
tapasztalunk, ami egy optikai rácson áthaladó fénycsugárra jellemző. A vizsgálat eredménye a polikristályos minta sajátosságai miatt kissé bonyolultabb, az azonos intenzitású nyalábrészek ugyanis kúpfelületek mentén haladnak, így ha az intenzitáseloszlást fotolemezen rögzítjük, akkor a maximális és minimális intenzitású helyek körök alakjában jelennek meg (a röntgendifrakciónál erről már volt szó: ez a



Debye–Scherrer-módszer megfelelője). A fenti vázlatos ábra lényegében a térbeli elrendezés egy síkmetszetét mutatja, a térbeli eloszlás az ábrának a szimmetriatengelye körül történő körbeforgatásával kapható meg.

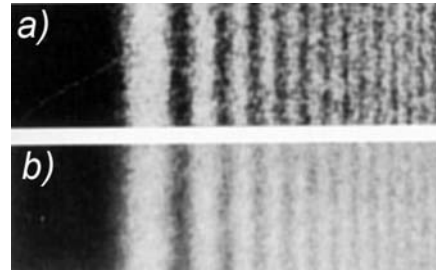
A kísérletek azt mutatják, hogy a maximumok és minimumok helye ugyanazokkal az összefüggésekkel kapható meg, mint pl. fényhullámoknak optikai rácson- vagy röntgensugaraknak kristályrácson történő elhajlásánál, csak itt a hullámhossz helyébe az elektronok de Broglie hullámhosszát kell behelyettesíteni.

A mellékelt ábrán bemutatunk egy ilyen kísérletnél kapott elektron-intenzitáseloszlást (a) ábra), és összehasonlításként ugyanilyen mintán kapott röntgendiffrakció eredményét (b) ábra) is.



A kísérlet elemzése során felmerült az is, hogy a diffrakciós képet az elektronsugár által keltett röntgensugarak okozzák, ezt azonban elvetették, mert a diffrakciós kép mágneses tér hatására megváltozik (röntgensugaraknál ez nem következik be).

Egy másik egy kísérletben az elektronnyalábnak akadály szélén történő elhajlását vizsgálták meg. Tudjuk, hogy ha egy fényhullám egy akadály széle mellett halad el, akkor elhajlás lép fel, és jellegzetes diffrakciós kép jön létre. Ezt a kísérletet elektronnyalábbal is elvégezték. A mellékelt ábrán egy egykristályból készült hasáb éle mellett elhaladó elektronnyaláb intenzitáseloszlása (a) ábra) és az ugyanitt bekövetkező fényelhajlás intenzitáseloszlása (b) ábra) látható. (A két intenzitáseloszlás ilyen egyezése a hullámhosszak és a forrás-akadály távolság megfelelő megválasztásával érhető el.)



Elhajlási kísérleteket végeztek neutronokkal és különféle ionnyalábokkal is, és mindenütt igazolódott a részecskenyalábok hullámszerű viselkedése.

A kísérletek tehát egyértelműen igazolják, hogy a részecskenyalábok a hullámokhoz hasonló elhajlásjelenségeket mutatnak. Emellett számszerűen is beigazolódott a részecskék „hullámhosszát” megadó de Broglie-féle összefüggés, vagyis az a furcsa tény, hogy nyugalmi tömeggel rendelkező részecskékhez egy sajátos „anyag hullám” rendelhető.

1.1.4.2 A hullámfüggvény

A részecskediffrakciós kísérlet eredménye a fentiek szerint értelmezhető, ha a rács felé haladó részecskékhez egy haladó síkhullámot rendelünk, ami a

$$\psi(x, t) = A \sin(\omega t - kx + \alpha)$$

valós, vagy a

$$\psi(x, t) = A \exp\{i(\omega t - kx + \alpha)\}$$

komplex hullámfüggvénnyel adható meg (itt i a képzetes egység, $k=2\pi/\lambda$ a hullámszám, ω a körfrekvencia, A az amplitúdó, a hullám a $+x$ tengely irányában halad).

Ha közönséges mechanikai hullámról van szó, akkor tudjuk, hogy a $\psi(x, t)$ hullámfüggvény elmozdulást, elektromágneses hullám esetén pedig elektromos vagy mágneses térerősséget jelent. Ha egy ilyen klasszikus hullám egy réssel vagy rácscsal kölcsönhatásba lép, akkor a hullámfüggvény megváltozik (síkhullámból bonyolult ($\psi(\mathbf{r}, t)$) háromdimenziós hullámmá alakul), de fizikai jelentése ugyanaz marad: a

kölcsönhatás után változatlanul érvényes, hogy a hullám intenzitása (I), ami a hullám által szállított energiára jellemző, arányos a megváltozott, a rács vagy rés által módosított hullámfüggvény amplitúdójának négyzetével, illetve a komplex alakba írt hullámfüggvény abszolút értékének négyzetével:

$$I = A^2 = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2.$$

Kérdéses azonban, hogy mit jelent részecskék esetén a hullámfüggvény, illetve a fenti összefüggéssel megadott, a klasszikus hullámoknál intenzitásnak nevezett mennyiség? A kérdés megválaszolásánál ismét a fotonképet kell segítségül hívnunk. Tudjuk, hogy elektromágneses sugárzás esetén a szállított energia a fotonok számával arányos, vagyis adott helyen az intenzitás arányos lesz az oda beérkező fotonok számával. Így a résen vagy rácson való elhajlásnál az intenzitás – és így közvetve a hullámfüggvény – azt határozza meg, hogy a réssel vagy ráccsal való kölcsönhatás után a fotonoknak milyen hányada térül el az egyes irányokba: bizonyos jól meghatározott irányokban sok foton repül, tehát ott intenzitásmaximum lesz, a közbülső irányokban kevés foton halad, tehát ott intenzitásminimumot kapunk.

A hullámfüggvény ilyen értelmezése a részecskék esetén is lehetséges, hiszen ez megfelel a rácson való elhajlásnál szerzett kísérleti tapasztalatoknak (a részecskenyaláb intenzitása a mérésnél az időegység alatt beérkező részecskék számát jelenti). Vagyis a részecskékhez rendelt hullámfüggvényt értelmezhetjük úgy, hogy annak abszolút érték négyzete az adott helyre eltérülő részecskék számával arányos. Annak okát, hogy a részecskék miért éppen a tapasztalt elhajlási képnek megfelelő irányokba repülnek, részleteiben nem ismerjük, de a fenti feltevés szerint a folyamat végeredményét a hullámfüggvény megmutatja.

Kísérleti vizsgálatok alapján azt is tudjuk, hogy a sajátos intenzitás-eloszlás akkor is kialakul, ha egy résre egyenként bocsátjuk a részecskéket. Ezt szemlélteti egy résen való áthaladás esetén a mellékelt ábra. Ilyenkor az egyes részecskék látszólag szabálytalanul érkeznek az ernyőre (a) ábra), de nagyon sok részecske áthaladása után kialakul a jellegzetes intenzitás-eloszlás (b) ábra).

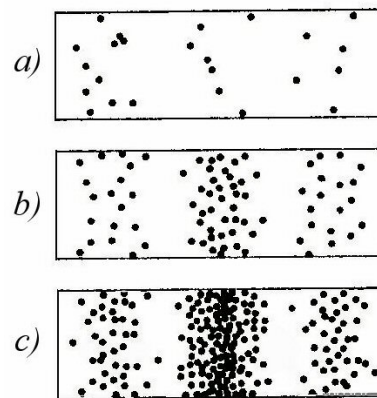
Ennek alapján helyesebbnek látszik azt mondani, hogy a hullámfüggvény abszolút értékének négyzete egy-egy konkrét részecske haladási irányára vonatkozóan nem ad pontos tájékoztatást, csupán azt mondja meg, hogy a részecskék milyen valószínűséggel haladnak egyik vagy másik irányban, vagy másként fogalmazva, milyen valószínűséggel jelennek meg az ernyő egyik vagy másik helyén.

A fenti gondolatmenet általánosításaként azt mondhatjuk tehát, hogy egy részecskéhez rendelt *hullámfüggvény abszolút értékének négyzete a részecske adott helyen való előfordulásának valószínűségével arányos*.

A hullámfüggvény valószínűségi értelmezése matematikailag pontosabban is megfogalmazható: $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ valószínűségi sűrűséget jelent, vagyis annak valószínűségét adja meg, hogy a részecske az \mathbf{r} hely körüli egységnyi térfogatban található. Így annak dP valószínűsége, hogy az \mathbf{r} hely körüli dV térfogatban van a részecske

$$dP = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$$

Egy V térfogatban való előfordulás P_V valószínűsége eszerint



$$P_V = \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$$

A hullámfüggvény ismertetett értelmezéséből következik, hogy az valamilyen módon a részecske viselkedését jellemzi, ezért a részecskével kapcsolatos folyamatok leírásához szükségünk van rá. A kérdés az, hogy hogyan lehet adott körülmények között lévő részecske hullámfüggvényét megtalálni, és a tartózkodási valószínűségeken kívül milyen további részecskejellemzők határozhatók meg a hullámfüggvény segítségével. Mielőtt azonban ezt a kérdést megvizsgálánk, foglalkozzunk még a részecske-hullám kettősség egy fontos következményével.

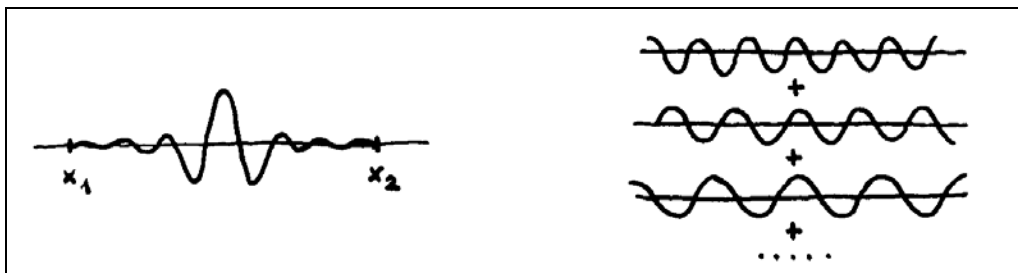
1.1.4.3 "Hullámszerű részecske hullámcsomag modellje: a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés

A hagyományosan részecskének tekintett atomi méretű objektumok (mikroobjektumok) hullámszerű viselkedését de Broglie szerint úgy írhatjuk le, hogy a mozgó részecskékhez hozzárendelünk egy határozott hullámhosszú (frekvenciájú) haladóhullámot. Egy ilyen hullám azonban térben végtelen kiterjedésű, így nem ad számot a részecske térben lokalizált voltáról. Ha azonban ezt a hullámot nem végtelen kiterjedésű haladóhullámként, hanem egy térben többé kevésbé lokalizált hullámvonulatként, ún. *hullámcsomagként* képzeljük el, akkor egy olyan objektumot kapunk, amely egyrészt hullám, másrészt térben lokalizált lehet, mint egy részecske. Ilyen hullámvonulatot kapunk például, ha egy rugalmas kötél vagy egy vízfelület egy pontjában nem folyamatos rezgőmozgást, hanem csak egy- vagy néhány kitérést hozunk létre. De hullámcsomagot kapunk akkor is, ha egy hangszórót vagy egy elektromágneses sugárzást kibocsátó adót rövid ideig működtetünk. Az így kapott hullámcsomag a pontszerű részecske és a határozott hullámhosszú (frekvenciájú) végtelen síkhullám kompromisszuma: térben lokalizált ugyan, de nem pontszerű, hullám ugyan, de nem rendelkezik egyetlen jól meghatározott hullámhosszal (frekvenciával).

Vizsgáljuk meg most ennek a sajátos hullámjelenségnek, a hullámcsomagnak a tulajdonságait. A tárgyalás során célszerűségi okokból a hullám jellemzésére nem a hullámhosszt használjuk, hanem a $k=2\pi/\lambda$ összefüggéssel definiált hullámszámot.

A matematikából tudjuk, hogy egy periodikus függvény előállítható különböző periódusú harmonikus (szinusz és koszinusz) függvények összegeként (Fourier tétel), egy nem periodikus függvény pedig folytonosan változó periódusú harmonikus függvények integráljaként. Ennek alapján egy hullámcsomag hullámfüggvénye is előállítható folytonosan változó hullámszámú harmonikus hullámok integráljaként.

Ha például az ábrán látható, adott t időpillanatban ábrázolt hullámcsomagot (véges hullámvonulat) akarjuk előállítani, akkor ehhez elvileg végtelen sok, megfelelően megválasztott amplitúdójú, különböző hullámszámú hullámot kell összeadni



pontosabban szólva, integrálni.

Az összegzésnél a különböző hullámszámú összetevők amplitúdóit úgy kell megválasztani, hogy a hullámok az $x < x_1$ és az $x > x_2$ tartományokban egymást

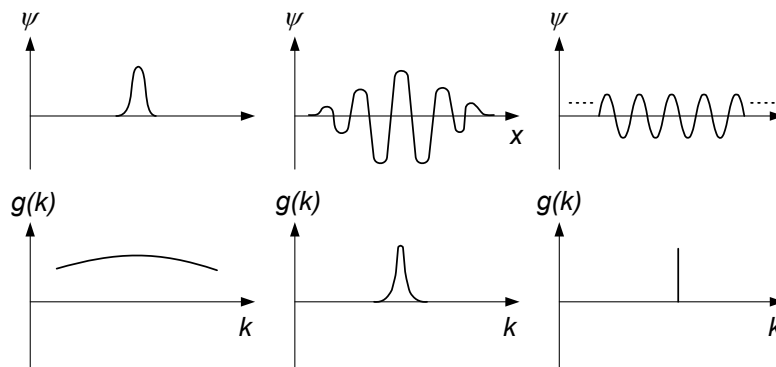
kioltás, a közbülső tartományban pedig éppen a kívánt függvényt állítsák elő. Meghatározott t időpillanatban a hullámcsomag $\psi(x)$ hullámfüggvényét egy

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) \cos kx dk$$

típusú integrál adja meg, ahol $g(k)$ az egységnyi hullámszám-intervallumra vonatkozó amplitúdó-függvény, amely az előállítandó $\psi(x)$ hullámfüggvény ismeretében matematikai úton meghatározható. A kérdés részletes matematikai tárgyalásával itt nem foglalkozunk, az alábbiakban csupán a matematikai elemzés végeredményeit foglaljuk össze.

Amint az a fenti kifejezésből látszik, az integrálás során a hullámszám $-\infty$ és ∞ között változik. Ha azonban egy véges Δx hosszúságú hullámcsomag esetén megvizsgáljuk a $g(k)$ függvényt, akkor azt találjuk, hogy az amplitúdó rendszerint csak egy véges Δk tartományban különbözik jelentősen nullától, tehát a hullámcsomag előállításához gyakorlatilag elegendő véges hullámszám-tartományból vett harmonikus hullámok összegzése.

Különböző hosszúságú hullámcsomagokat megvizsgálva az is kiderül (ábra), hogy minél rövidebb tartományra akarjuk korlátozni a hullámvonulatot, annál többféle hullámszámú hullámot kell összeadnunk, azaz annál szélesebb az előállításához



szükséges hullámszám intervallum. Más szóval, a véges hosszúságú hullámcsomag előállításához szükséges Δk hullámszám-intervallum és a hullámcsomag Δx hosszúsága nem független egymástól. Egy igen rövid impulzus például csak széles hullámszám-tartomány alkalmazásával állítható elő, míg egy végtelen kiterjedésű harmonikus hullám csupán egyetlen hullámszámot tartalmaz.

A részletesebb matematikai számítások szerint a két mennyiség között fennáll a

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

összefüggés. Ez valóban azt jelenti, hogy a csomag térbeli kiterjedésének csökkentése csak az alkalmazott hullámszám-tartomány szélesítésével, vagyis a hullámszám (és így a hullámhossz) definiálatlanságának növelésével lehetséges. Ha viszont jól definiált hullámszámú, közel harmonikus hullámot akarunk előállítani, vagyis csak igen kis hullámszám-tartományból vett hullámokat alkalmazunk, akkor a fenti összefüggés szerint a hullámcsomag szélessé válik, térbeli lokalizáltsága romlik.

Próbáljuk meg most alkalmazni a fenti eredményeket egy mikrorészecske leírására. Ehhez használjuk fel a mikrorészecskékre vonatkozó

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k$$

összefüggést. Ennek segítségével átírhatjuk a hullámszám-intervallum és a hosszúság között fennálló összefüggést az alábbi formába

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Az egyenletben Δx a részecskét megtestesítő hullámcsomag kiterjedését jelenti, így egy ilyen hullámcsomaggal megadott részecske helye csak Δx bizonytalansággal adható meg. A hely határozatlansága az összefüggés szerint együtt jár egy megadott Δp impulzusbizonytalansággal, vagyis egy mikrorészecske helye és impulzusa egyidejűleg csak az egyenlet által megadott mértékben lehet határozott. Ha a részecske jól lokalizált, vagyis a Δx érték kicsi, akkor az impulzusa határozatlanná válik (Δp nagy), ha viszont jól meghatározott impulzussal (sebességgel) mozog, akkor térben "szétkenődik", azaz a helye válik határozatlanná.

A fenti eredmény természetesen annak a matematikai következménye, hogy a hullámcsomagot hullámok szuperpozíciójával állítottuk elő. Kiderült azonban, hogy a fenti összefüggés és a hozzá rendelt fizikai kép a tapasztalattal összhangban van, a mikrorészecskék viselkedésének alapvető jellegzetességeit tükröző törvényszerűség. Azt fejezi ki, hogy a mikroobjektumok viselkedése nem felel meg sem a klasszikus részecske, sem pedig a klasszikus hullám viselkedésének, legfeljebb bizonyos esetekben ezekkel közelíthető. A mikroobjektum helye és impulzusa egyidejűleg nem határozható meg pontosan, tehát a klasszikus mechanika számos fogalma (pl. pontosan megadható pálya, sebesség) itt értelmét veszíti. Az összefüggést először W. Heisenberg vezette le, ezért *Heisenberg-féle határozatlansági összefüggésnek* nevezik.

1.1.4.4 Az energiára és élettartamra vonatkozó határozatlansági összefüggés, a természetes vonalszélesség

Kimutatható, hogy a klasszikus hullámcsomagra vonatkozóan egy másik összefüggés is felírható. Ha adott helyen állva megfigyeljük a hullámcsomagot és annak elhaladási ideje (vagyis időbeli hosszúsága) Δt , akkor a hullámcsomag előállításához szükséges körfrekvencia-intervallum ezzel az időbeli hosszúsággal a

$$\Delta t \cdot \Delta \omega \geq \frac{1}{2}$$

összefüggésben van. Ez az összefüggés tartalmát tekintve azonos a csomag hosszúságára és hullámszám-intervallumára vonatkozó összefüggéssel, csak más mennyiségekkel fejeztük ki: minél kisebb a hullámcsomag adott helyen való elhaladásához szükséges idő (vagyis minél rövidebb a hullámcsomag), annál nagyobb frekvenciaintervallumból vett hullámokkal tudjuk előállítani, vagyis annál határozatlanabb a hullám frekvenciája.

Írjuk át ezt az összefüggést is „mikroobjektumokra érvényes” alakba. A $\Delta E = \hbar \Delta \omega$ összefüggést felhasználva, az alábbi egyenlőtlenséget kapjuk:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Ezt az összefüggést úgy értelmezhetjük, hogy ha egy részecske valamilyen állapota véges Δt ideig áll fenn, akkor energiájában a fenti összefüggésnek megfelelő

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t}$$

bizonytalanság lép fel. Ezt az értelmezést a tapasztalat alátámasztja.

Konkrét példa lehet egy fénykibocsátási folyamat, amelynek során egy atomi elektron egy magasabb energiájú (gerjesztett) állapotból véges τ idő után az alapállapotba visszatér, és energiáját egy foton formájában adja le. Mivel a gerjesztett állapot élettartama véges, a gerjesztett állapot energiája legalább $\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\tau}$ mértékben

határozatlan. Ez azt eredményezi, hogy egy atomi elektron magasabb energiaszintről alacsonyabbra történő átmenete során nem mindig pontosan ugyanolyan frekvenciájú foton keletkezik, vagyis egy azonos atomokból álló atomsokaság színekében a vonalak kiszélesednek (ábra). A

kiszélesedés mértékét a *gerjesztett állapot* ($\Delta\tau$ véges) összefüggéssel

$$\Delta\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1}{4\pi\tau}$$

becsülhetjük meg.

Ez a jelenség a spektrumvonalak *természetes kiszélesedése*, $\Delta\nu$ pedig a *természetes vonalszélesség*, ami röntgensugarak esetén megfigyelhető.

Ez a határozatlansági összefüggés is a mikrorészecskékből álló rendszerek sajátos tulajdonságainak következménye, ami ismét arra figyelmeztet, hogy ezeknek az objektumoknak a viselkedése klasszikus fogalmakkal és klasszikus törvényekkel nem írható le.

