

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 a klasszikus fizika érvényét veszíti, megismerkedünk továbbá a kvantumelmélet alapvető fogalmaival, alaptörvényeivel és néhány eredményével.

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 a klasszikus fizika keretei között 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.

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 az elektromos töltésük miatt fellépő kölcsönhatását az elektromos és mágneses erőter segítségével írhatjuk le. A kölcsönhatás úgy működik, hogy egyrészt minden töltés maga körül elektromos és/vagy mágneses erőteret, más néven elektromágneses erőteret hoz létre, másrészt az elektromágneses erőter a töltésekre erőt fejt ki. Ezért azt mondhatjuk, hogy két töltött test kölcsönhatása az elektromágneses erőter közvetítésével valósul meg. Egy kiszemelt töltésre ható erő megadásához így tulajdonképpen nincs szükség a másik kölcsönható partner sajátságainak 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 erőterben, akkor a rá ható $\mathbf{F}_L$ erő, az ún. *Lorentz-erő*, az ismert

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

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

Az elektromágneses erőter létrehozásához (pl. azonos mennyiségű pozitív és negatív töltésből álló semleges test töltéseinek szétválasztásához vagy elektromos áram keltéséhez) munkát kell végezni, amely munka révén a létrehozott *elektromágneses erőterben energia* halmozódik fel.

Tudjuk, hogy az elektromágneses erőter 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 erőter 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 erőter 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 erőter 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 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 a Lorentz-erő miatt a részecskét felgyorsítja, miáltal a test a ráeső sugárzás egy részét elnyeli (abszorbeálja).

A sugárzás- és a sugárzás elnyelésének képessége 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 kölcsönhatás 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 azután a vevőkészülékben létrehozza a leadott jelnek megfelelő elektromos jelet (váltakozó áram).

A sugárzásos energiaátadás másik, közismert példája a *hőmérsékleti sugárzás* kibocsátása és elnyelése. Tapasztalati tény, hogy az anyagok a hőmérsékletüktől függően (innen az elnevezés) 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 gammasugárzás ugyancsak elektromágneses sugárzás. A különböző körülmények között létrejött elektromágneses sugárzások lényegében a kibocsátott hullám hullámhosszában (frekvenciájában) térnek el egymástól, és ennek a következménye az, hogy az anyaggal való kölcsönhatásaik, az anyagra gyakorolt hatásaik is eltérők.

A fentiek alapján a sugárzás elnyelése és kibocsátása töltéssel rendelkező atomi rezgő rendszerek, ún. *atomi oszcillátorok* rezgéseivel hozható kapcsolatba. Egy adott oszcillátor a rendszer sajátságainak 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.

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. Ennek az elképzelésnek a hiányosságaira a fényinterferencia jelensége mutatott rá, 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.

A fekete test sugárzása

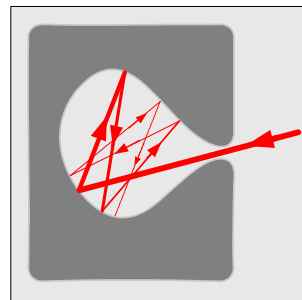
Az elektromágneses sugárzás és anyag kölcsönhatására vonatkozó klasszikus fizikai elképzelések első látványos kudarcához a hőmérsékleti sugárzás tanulmányozása vezetett.

Az ismeretes volt, hogy egy test által kibocsátott hőmérsékleti sugárzás intenzitása a test hőmérsékletével nő, de arról keveset tudtak, hogy a hőmérsékleti sugárzás energiája hogyan oszlik el a különböző hullámhosszú (frekvenciájú) összetevők között, és ez az eloszlás hogyan függ a hőmérséklettől. Ennek tanulmányozásához olyan testre volt szükség, amely a sugárzást jól ellenőrizhető körülmények között, termikus egyensúlyban bocsátja ki.

A vizsgálat céljaira egy üreges test belsejében kialakuló sugárzást választották, mert itt valóban kialakul termikus egyensúly, és a sugárzó test (az üreg belső fala) hőmérséklete jól szabályozható. Az egyensúly kialakulásának alapvető oka az, hogy a hőmérsékleti sugárzás intenzitása a kibocsátó test hőmérsékletével nő, az elnyelt sugárzás viszont lényegében csak a testre eső intenzitástól függ. Ezért az üreg falának magasabb hőmérsékletű részei több energiát sugároznak ki, mint amennyit elnyelnek, az alacsonyabb hőmérsékletű részek pedig több energiát nyelnek el, mint amennyit kisugároznak: a hidegebb falrészek melegeknek, a melegebbek pedig hűlnek. Ha tehát az üreges test állandó hőmérsékletű környezetben van, akkor az üregben kialakul egy dinamikus egyensúly: a belső fal által adott idő alatt kisugárzott energia megegyezik az általa ugyanezen idő alatt elnyelt energiával. Az így kialakult egyensúlyi sugárzás vizsgálatával próbálták a hőmérsékleti sugárzás tulajdonságait meghatározni.

Felmerül a kérdés, hogy hogyan lehet az üreg belsejében kialakult sugárzásról kísérleti módszerekkel 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 ez az egyensúlyi állapot kialakulását ne zavarja), és ennek tulajdonságait vizsgálják. Ha sikerül megmérni a kijövő sugárzás intenzitását, akkor az üregben kialakult energiasűrűség is megkapható, hiszen ez arányos az intenzitással.

Az üregeken 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 (frekvencia) szerinti eloszlását úgy tanulmányozzák, hogy az üreges test hőmérsékletét nagyon pontosan állandó értéken tartják, és az üregből kijövő sugárzás különböző hullámhosszú (frekvenciájú) összetevőit optikai rácscsal vagy prizmával szétválasztják. Ezután a különböző hullámhosszú, különböző helyre eltérített összetevők intenzitását megméri.

A méréssel kapcsolatban megjegyezzük, hogy a sugárzás kibocsátása szempontjából az alapvető mennyiség a frekvencia, hiszen – a klasszikus elképzelés szerint – a sugárzást atomi oszcillátorok bocsátják ki. Méréstechnikai okok miatt azonban általában a hullámhosszt határozzák meg, ami függ attól a közegtől, amelyben a hullám terjed. Adott közegben (ez rendszerint levegő) azonban a

hullámhossz arányos a frekvenciával ($\lambda = \frac{c}{f}$), így a hullámhossz szerinti eloszlás könnyen átszámítható frekvencia szerinti eloszlássá, és viszont. Később látni fogjuk, hogy az elméleti megfontolásokban az atomi oszcillátorok frekvenciája játssza a meghatározó szerepet.

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 görbe alatti területtel ($I = \int_0^\infty \varepsilon(\lambda, T) d\lambda$)

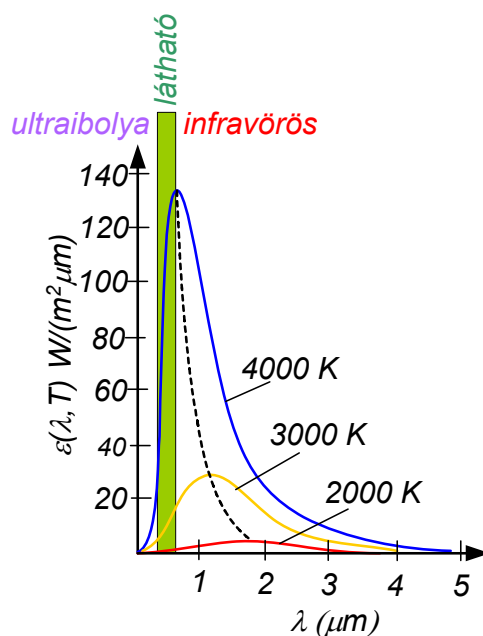
egyenlő. Az ábráról ennek alapján megállapítható, hogy a kisugárzott összintenzitás a hőmérséklet emelkedésével nő.

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 megpróbálták a klasszikus fizika törvényei alapján megmagyarázni.

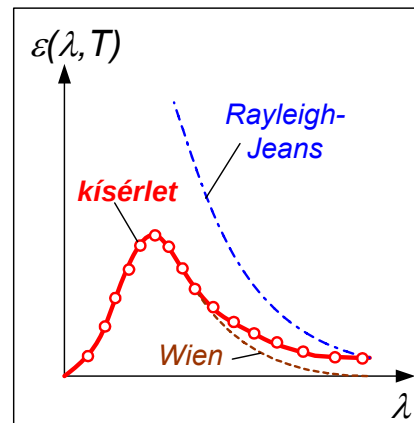
A klasszikus gondolatmenet szerint az üreg falát alkotó atomok és molekulák egymással kölcsönhatásban állnak, és mivel a hőmozgás miatt állandó mozgásban



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

vannak, az őket alkotó töltött részecskék is állandó rezgőmozgást végeznek. Eközben, mint atomi oszcillátorok sugároznak. Egy adott oszcillátor a 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. Az ilyen módon létrejött elektromágneses sugárzás intenzitását alapvetően a hőmozgás átlagos "intenzitása", azaz a test hőmérséklete szabja meg.

A klasszikus fizika módszereivel elméleti úton levezetett $\varepsilon(\lambda, T)$ függvények azonban nem egyeznek a kísérleti görbékkel. Az ábrán sematikusan bemutatjuk a körökkel jelzett mérési eredmények és két elméleti görbe jellegzetes eltéréseit ugyanazon a hőmérsékleten. A nagy hullámhosszak (kis frekvenciák) tartományában a kísérletekkel jól egyező összefüggést kapott *J.W.S. Rayleigh*¹ és *J.H. Jeans*², de csökkenő hullámhosszakhoz (növekvő frekvenciákhoz) egyre nagyobb és nagyobb intenzitás tartozik, ami végtelen nagy összenergiát eredményezne (ábra). Egy másik $\varepsilon(\lambda, T)$ formulát vezetett le *W. Wien*³, ami már nem vezet végtelen összenergiára, de csak kis hullámhosszaknál (nagy frekvenciákon) egyezik a tapasztalattal.



A problémát végül *M. Planck*⁴ 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 a változás csak meghatározott, diszkrét ΔE lépésekben következhet be,
- egy f frekvenciájú oszcillátor energiájának ez a diszkrét megváltozása a frekvenciával arányos

$$\Delta E = hf,$$

ahol h a kísérleti eredményekkel való összehasonlításból meghatározandó konstans.

Ez azt jelenti, hogy egy f frekvenciájú atomi oszcillátor energiája csak az

$$E_n = nhf + \text{állandó}$$

diszkrét, értékeket veheti fel (n egész szám), vagyis az üregben jelenlévő sugárzás energiája csak a fenti összefüggésnek megfelelő hf adagokban, kvantumokban változhat.

A klasszikus fizika törvényeinek ellentmondó fenti feltevésekkel Planck az

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

¹ John William Strutt RAYLEIGH (1842-1919) Nobel-díjas (1904) angol fizikus.

² James Hopwood JEANS (1877-1946) angol fizikus, matematikus és csillagász.

³ Wilhelm WIEN (1864-1928) Nobel-díjas (1911) német fizikus.

⁴ Max PLANCK (1858-1947) Nobel-díjas (1918) német fizikus.

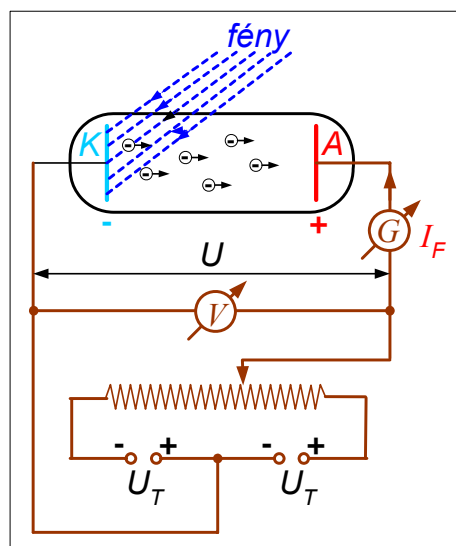
összefüggést kapta (T az abszolút hőmérséklet, k a Boltzmann-állandó), ami a $h=6.62\cdot 10^{-34}$ Js érték választásával a kísérleti eredményekkel igen jól egyezik. Az összefüggést *Planck-féle sugárzási törvénynek*, a benne szereplő, és a modern fizikában alapvető szerepet játszó h számot pedig *Planck-állandónak* nevezik.

A meghatározott energiaadagok léte látszólag ellentmond annak a tapasztalatnak, hogy a sugárzási energia a frekvenciával folytonosan változik. Az ellentmondás megoldása az, hogy a hf érték a vizsgált esetekben olyan kicsi, hogy a használt mérőeszközökkel ilyen energiaeltérések nem mutathatók ki (látható fény esetén pl. $E_{\text{foton}} = hf \approx 6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1} = 6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$).

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 ábrán látható elrendezéssel vizsgálhatjuk.

Egy fotoeffektust mutató fémlemezt (K) elektromos kivezetéssel ellátva vákuumcsőbe helyezünk, amelyben egy másik, ugyancsak kivezetéssel ellátott – a K fémlemezrel nem érintkező – elektród (A) is van. A két kivezetést egy külső áramkörbe kapcsoljuk, amelyben egy változtatható feszültséget (U) adó feszültségforrás, egy feszültségmérő (V) és egy érzékeny árammérő (G galvanométer) található. Az ábrán látható elrendezésben az A elektród potenciálja a K -hoz képest (U) egy negatív és egy pozitív érték között folyamatosan változtatható. Az elektronok keltéséhez a kísérletben olyan fényforrást alkalmazunk, amelynek fénye közelítőleg monokromatikus (azaz csak szűk frekvenciasávba eső fényt bocsát ki).



Külső behatás nélkül az árammérő nem mutat áramot, hiszen a vákuumcsőben nincsenek töltéshordozók. Ha a K fémlemezt megvilágítjuk, akkor a tapasztalat szerint a körben az U feszültség értékétől függő áram (I_F) jön létre.

A jelenséget a következőképpen értelmezhetjük. Egy fémbe az elektronok kötött állapotban vannak, ezért maguktól nem hagyják el a fémöt, az elektronokat a fémbe csak egy az anyagtól függő W_0 *kilépési munka* árán lehet kiszakítani. Ha a fémöt megvilágítjuk, akkor a beérkező fény szolgáltatja a kilépéshez szükséges energiát, a fémbe elektronok lépnek ki, és a csőben áram jön létre. A létrejött áram arányos az időegység alatt kilépő elektronok számával.

Ha a beeső fénysugárzásból egy elektron E energiát kap, akkor ez egyrészt fedezheti a kilépési munkát, másrészt az elektronnak E_m mozgási energiát adhat:

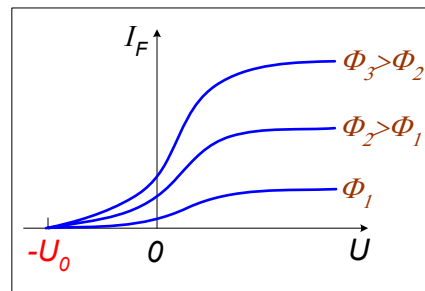
$$E = W_0 + E_m$$

Ha $E \geq W_0$, akkor létrejön a fotoeffektus, az $E > W_0$ esetben pedig a kilépő elektronnak mozgási energiája is lesz.

A fény hatására kilépő elektronokat *fotoelektronoknak*, a létrejött I_F áramot pedig *fotoáramnak* nevezik.

A jelenség mechanizmusát úgy tanulmányozhatjuk, hogy megvizsgáljuk a fotoáramnak különböző paramétereiktől (feszültség, idő, fényintenzitás, a fény frekvenciája) való függését. Ezek közül a mérések közül többnek az eredménye is olyan, amit a klasszikus fizika nem tud értelmezni. Ilyenek a következők:

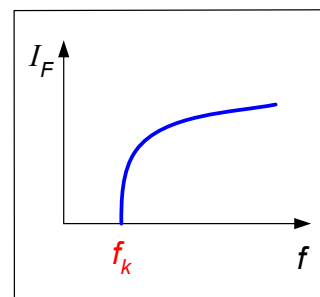
- Ha a fotoáramot az alkalmazott feszültség (U) függvényében vizsgáljuk, akkor azt tapasztaljuk, hogy fotoáram az elektronokat fékező (az ábrán negatív) feszültség esetén is fellép, majd a feszültséggel nő, és telítésbe megy (ábra). A kis fékező feszültségnél fellépő áram oka az, hogy az elektronok a fémlemezről nullától különböző sebességgel lépnek ki, és a fékező teret legyőzve eljutnak az A elektródra.



- Egy bizonyos nagyságú fékező feszültség (az U_0 *lezárási feszültség*) felett azonban az áram megszűnik, mert az ellenfeszültség megakadályozza az elektronoknak az A elektródra való eljutását. Ez a klasszikus fizika alapján is érthető. Az is magyarázható klasszikusan, hogy a fotoáram nő a feszültséggel és a besugárzó fény Φ intenzitásával, az azonban nem, hogy az U_0 lezárási feszültség (vagyis a kilépő elektronok maximális sebessége) nem függ a besugárzó fény Φ intenzitásától.
- Ha van fotoeffektus, akkor a fotoáram a fénybesugárzást követően igen gyorsan (kb. 10^{-9} s-on belül) megindulhat. Ez a tapasztalat ellentmondásban van a klasszikus képpel. Ha ugyanis a beérkező fény energia-áramsűrűsége j , és az a felület amelyből az elektron begyűjtheti a fényenergiát A_e , akkor Δt idő alatt az elektronra $\Delta E = jA_e\Delta t$ energia esik. Ebből az összefüggésből következik: ahhoz, hogy egy elektronon a kilépéséhez szükséges W_0 energia összegyűljön, legalább $\Delta t = \frac{W_0}{jA_e}$ idő szükséges. A

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

- A besugárzó fény frekvenciáját állandó intenzitás mellett változtatva azt találjuk, hogy van egy kritikus f_k *küszöbfrekvencia*, amely alatt a fotoeffektus nem jön létre (ábra). Ez a klasszikus kép alapján teljesen érthetetlen, hiszen a W_0 kilépési munka fedezésére alkalmas $j = \frac{W_0}{A_e\Delta t}$ sugárzási intenzitás bármilyen



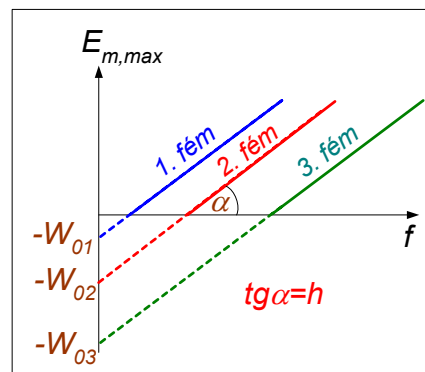
frekvencián biztosítható.

- Fékező feszültséget alkalmazva a K fémlapról kilépő elektronokat az elektromos erőter fékezi, így a feszültség növelésével elérhető, hogy még a legnagyobb sebességgel (mozgási energiával) induló elektronok sem érik el az A elektródát, hanem visszafordulnak, és 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 mozgási energiával (e az elektron töltése):

$$eU_0 = E_m^{\max}.$$

Ebből az összefüggésből az U_0 lezárási feszültség mérése útján meghatározható az $E_m^{\max}$ maximális mozgási energia. Ennek vizsgálata ismét meglepő eredményt ad. Ha a maximális mozgási energiát mérjük a beeső fény frekvenciájának függvényében, akkor a mellékelt ábrán látható lineáris összefüggést kapjuk. Ez klasszikusan nem érthető, mert a számítások szerint a frekvenciától való függés nem lineáris.



Mindezekre a problémákra a magyarázatot *Einstein* adta meg. Feltételezte, hogy a Planck-féle sugárzási törvény levezetésénél "matematikai kényszerűségből" bevezetett hf energiaadagnak sajátos fizikai értelme van: 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 nyugalmi tömeggel nem, de impulzussal rendelkeznek (vö. relativitáselmélet), 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 az elemi folyamatra felírt energiamegmaradási tétel alkalmazásával és az $E=hf$ fotonenergia beírásával kaphatjuk meg:

$$hf = W_0 + E_m.$$

A fotonhipotézis segítségével egy csapásra megoldható a fotoeffektusra vonatkozó összes probléma.

- Az, hogy a lezárási feszültség nem függ a fényintenzitástól, érthető, hiszen a kilépő elektron sebessége a foton energiájától függ és független a beérkező fotonok számától (az intenzitástól).
- A fotoáram azonnali megindulása 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 következik a fenti egyenletből, hiszen az elektronkilépés feltétele $hf \geq W_0$, amiből következik, hogy fotoeffektus csak az $f_k = \frac{W_0}{h}$ küszöbfrekvencia felett van.
- Az Einstein-féle összefüggést az $E_m = hf - W_0$ alakba átírva, azonnal érthetővé válik a maximális kinetikus energia és a frekvencia közti arányosság, és az is látszik, hogy a lineáris összefüggés meredeksége éppen a h Planck-állandó. Emellett az egyenletbe az $f=0$ értéket behelyettesítve $E_m = -W_0$, tehát az egyenesek tengelymetszete megadja az

adott fémre vonatkozó kilépési munkát is (az ábrán ezt is bejelöltük). Mindez lehetőséget ad a modell ellenőrzésére, hiszen a Planck-állandót és a kilépési munkát is meg tudjuk határozni más módszerrel. Az itt kapott értékek jól egyeznek a más mérésekből kapott eredményekkel.

A Compton-effektus

Az elektromágneses sugárzás részecskeszerű viselkedését legmeggyőzőbben a *Compton-effektus*¹ 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.

A Compton által elvégzett mérés vázlatát az ábra mutatja. A szórt sugárzás hullámhossza egy kristályon (Bragg-kristály) történt elhajlás alapján a Bragg-formulával határozható meg.

A 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 mérések azt mutatják, hogy a hullámhosszváltozás nem függ sem az alkalmazott anyagtól, sem a röntgensugárzás intenzitásától, ami a klasszikus fizika törvényeivel nem magyarázható. Nem értelmezhető a kapott szögfüggés sem.

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. Az ütközésben megváltozik a beérkező részecske energiája, és ha a részecskét $E=hf$ energiájú fotonnak tekintjük, akkor az energiaváltozás frekvencia- (és hullámhossz-) változással is jár.

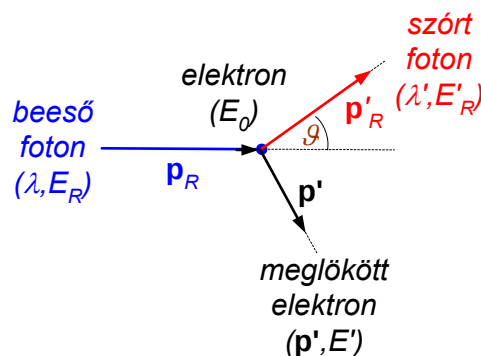
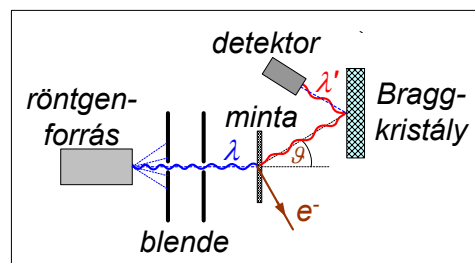
Az ütközési folyamatra az energia-megmaradás- és az impulzus-megmaradás tételét felírva (figyelembe véve hogy nagysebességű objektumok esetén a relativitáselmélet összefüggéseit kell használni), a kísérletileg tapasztalt összefüggés valóban levezethető.

Mielőtt a levezetést megmutatnánk, írjuk a fenti egyenletet a fénysebességgel (c) való osztás és a hullámokra vonatkozó $\lambda=c/f$ egyenlőség felhasználásával a számunkra hasznosabb

$$\frac{1}{f'} - \frac{1}{f} = \frac{\lambda_C}{c} (1 - \cos \vartheta),$$

alakba.

A levezetésnél egyelőre ne tételezzük fel, hogy fotonokról van szó, csupán abból induljunk ki, hogy a sugárzás fénysebességgel halad (és így nulla nyugalmi tömegű) részecskékből áll. Egy ilyen sugárzási



¹ Arthur Holly COMPTON (1892-1962) Nobel-díjas amerikai fizikus.

részecske és az elektron ütközési folyamatára (ábra) felírhatjuk az impulzus- és energiamegmaradás törvényét. Ha az elektron kezdetben nyugalomban van és nyugalmi energiája E_0 , ütközés utáni impulzusa és energiája $\mathbf{p}'$ és E' , az elektromágneses részecske impulzusa és energiája az ütközés előtt $\mathbf{p}_R$ és E_R , utána pedig $\mathbf{p}'_R$ és E'_R , akkor

$$\mathbf{p}_R = \mathbf{p}'_R + \mathbf{p}',$$

$$E_R + E_0 = E'_R + E'$$

Mivel nagy sebességgel mozgó részecskéket vizsgálunk, a relativitáselmélet összefüggéseit kell alkalmaznunk. Az m_0 nyugalmi tömegű elektronra

$$E_0 = m_0 c^2$$

$$E' = \left(m_0^2 c^4 + p'^2 c^2 \right)^{1/2}$$

A nulla nyugalmi tömegű részecskére

$$E_R = p_R c$$

ahol $p_R = |\mathbf{p}_R|$.

Feladatunk az, hogy az első két egyenletből eltüntessük az elektron mozgását jellemző adatokat, és így megkapjuk a beérkező és szórt részecske (azaz a beérkező és szórt sugárzás) adatai közti összefüggést.

Felhasználva a fenti egyenleteket, először alakítsuk át, és emeljük négyzetre az E' -re felírt egyenletet

$$m_0^2 c^4 + p'^2 c^2 = \left(E_R - E'_R + m_0 c^2 \right)^2,$$

majd fejezzük ki az elektron impulzusának négyzetét

$$p'^2 = \frac{E_R}{c^2} + \frac{E'_R}{c^2} - \frac{2E_R E'_R}{c^2} + 2E_R m_0 - 2E'_R m_0.$$

Ezután az első egyenletből is fejezzük ki az elektron impulzusának négyzetét

$$p'^2 = \frac{E_R}{c^2} + \frac{E'_R}{c^2} - \frac{2E_R E'_R}{c^2} \cos \vartheta$$

(itt a nulla nyugalmi tömegű részecske impulzusára alkalmaztuk a fent felírt relativisztikus összefüggést).

Az utolsó két egyenlet jobb oldalának egyenlőségéből kapott egyenletet c^2 -tel szorozva, rendezés után az alábbi egyenletet kapjuk

$$E_R E'_R (1 - \cos \vartheta) = m_0 c^2 (E_R - E'_R).$$

Ebből egyszerű átalakítások után végül az

$$\frac{1}{E'_R} - \frac{1}{E_R} = \frac{1}{m_0 c^2} (1 - \cos \vartheta)$$

eredményre jutunk. Ennek az egyenletnek a jobboldala már hasonlít a levezetés elején felírt – kísérletileg kapott – Compton-formulára, a baloldalon azonban E_R és E'_R helyett a frekvenciáknak kellene állni. Ha a beeső elektromágneses sugárzás részecskéjét $E_R = hf$ energiájú fotonnak, a szórt részecskét pedig $E'_R = hf'$ energiájú fotonnak tekintjük, akkor az

$$\frac{1}{f'} - \frac{1}{f} = \frac{h}{m_0 c^2} (1 - \cos \vartheta)$$

egyenletet kapjuk. Ha most az egyenletben a frekvenciát kifejezzük a hullámhosszal ($\frac{1}{f} = \frac{\lambda}{c}$), akkor a

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \vartheta)$$

kifejezést kapjuk, ami a kísérletileg tapasztalt összefüggéssel azonos alakra hozható, ha bevezetjük a

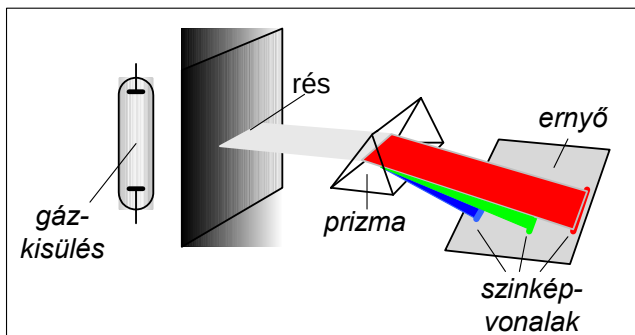
$$\lambda_C = \frac{h}{m_0 c}$$

jelölést. Az így kapott λ_C Compton-hullámhossz a hibahatáron belül egyezik a kísérletekből kapott értékkel.

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

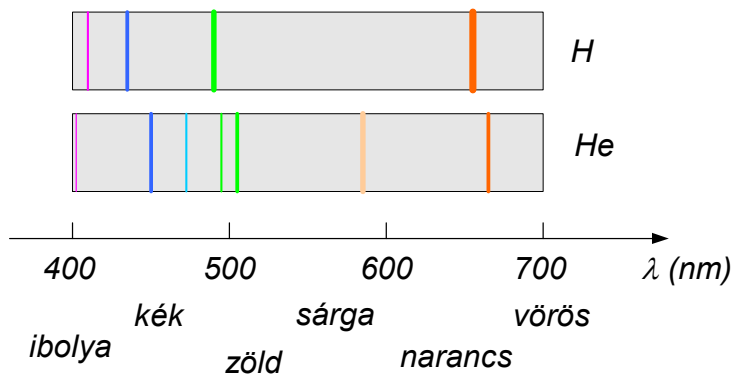
Színképvonalak és diszkrét atomi energiák

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 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).

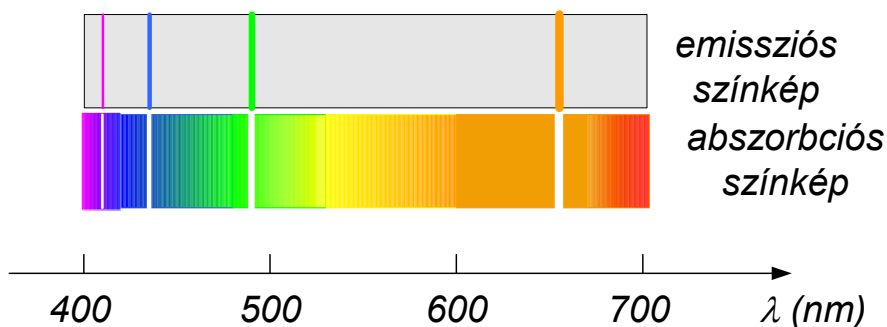


A tapasztalat azt mutatja, hogy olyan anyagok esetén, amelyek egymással gyenge kölcsönhatásban álló atomokból állnak (ilyenek a gázok) külső energiaközlés hatására másfajta elektromágneses sugárzás is létrejöhet. Ha egy ilyen anyaggal, például egy gázzal, energiát közlünk úgy, hogy elektromos erőterrel gázkisülést hozunk létre benne, akkor olyan sugárzást észlelünk, amelyben csak meghatározott, a kibocsátó atomtól függő, és egymástól jól elkülöníthető, $f_1, f_2, f_3 \dots$, *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 folytonosan változó színeloszlás helyett különböző színű, elkülönült vonalakat, *vonalas színképet*, gyakran használt kifejezéssel *vonalas spektrumot* látunk. A színképek felvételére szolgáló *spektrométerek* működésének elvi vázlatát mutatjuk be az ábrán. Megjegyezzük, hogy a valódi berendezés ennél jóval bonyolultabb, és prizma helyett gyakran optikai rácst használnak.

A következő, vázlatos ábrán a H és a He atomok vonalas spektrumának fő vonalai láthatók.



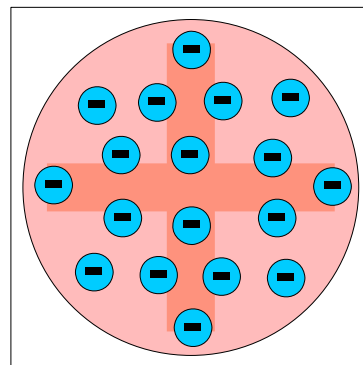
Ugyancsak tapasztalati tény, hogy egy atom az őt érő sugárzásból éppen azokon a frekvenciákon képes energiát elnyelni, amelyeket maga is kisugároz. Ezért, ha egy gázon fehér fényt bocsátunk át, akkor a folytonos spektrumból éppen azok a hullámhosszak hiányoznak, amelyeket az adott gáz képes kisugározni. Egy ilyen, ún. *elnyelési (abszorpciós) színekép* elvi vázlatát mutatja a következő ábra a H gáz esetén.



Az atomok tulajdonságai, az atomi fénykisugárzás és fényelnyelés folyamatai csak úgy érthetők meg, ha ismerjük az atom szerkezetét és „működésének” mechanizmusát. Az atomok viselkedésének magyarázatára különböző atommodelleket dolgoztak ki, amelyek közül a legfontosabbakkal foglalkozunk.

A Thomson-féle atommodell

Miután kiderült, hogy az atom pozitív és negatív töltésű részecskékből tevődik össze, *J.J. Thomson*¹ egy olyan atommodellt dolgozott ki, amely szerint az atomnak egyenletesen eloszló pozitív töltése van, amelyben ugyancsak egyenletes sűrűséggel elhelyezett negatív töltésű elektronok vannak („mazsolás kalács” modell). A rendszert az elektrosztatikus vonzás tartja össze. Az atom kifelé semleges, tehát a pozitív- és negatív töltések mennyisége az atomban megegyezik. A modell az atommal kapcsolatos számos jelenség kvalitatív magyarázatára alkalmas, többek között fénykibocsátást és fényelnyelést is képes modellezni (a pozitív és negatív töltések egymáshoz képest elmozdulhatnak, és így a rendszerben rezgések jöhetnek létre). Azon kívül, hogy a modell szerinti fénykibocsátás a tapasztalattal nem egyezik, van a modellel kapcsolatban egy elvi probléma: kimutatható, hogy egy pusztán elektrosztatikus erőkkel összetartott rendszer nem lehet stabil.



A Rutherford-féle atommodell

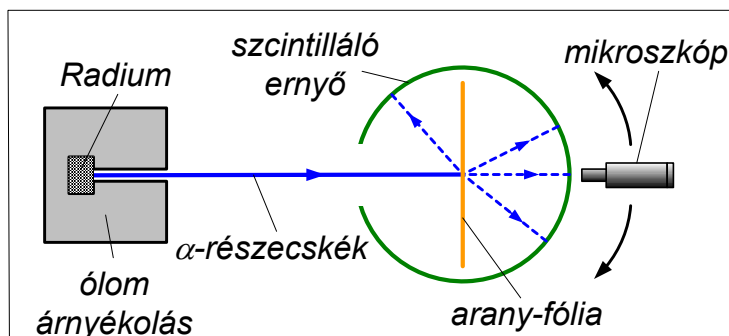
Mivel a Thomson-féle sztatikus atom nem lehet stabil, az atom belső szerkezetének kérdése továbbra is nyitott maradt. Az atomok töltéseloszlásának vizsgálatára *E. Rutherford*² dolgozott ki egy kísérleti eljárást, amelyben töltött részecskéknak az atomokon bekövetkező eltérülését vizsgálta.

A kísérletben radioaktív anyag (R) bomlásából származó, pozitív töltésű α -részecskéket (He^{2+} ionokat) bocsátott egy fémfóliára (F), és egy körbeforgatható

¹ Joseph John THOMSON (1856-1940) Nobel-díjas (1906) angol fizikus.

² Ernest RUTHERFORD (1871-1937) Nobel-díjas (1908) újzélandi születésű, angol fizikus.

detektorral (D) megmérte, hogy a fématomokkal való kölcsönhatás után milyen a szórt részecskék irány szerinti eloszlása (ábra). A kísérlet meglepő eredményt hozott, mert – a többségükben kis szögű eltéréssel áthaladt részecskék mellett – voltak



olyan α -részecskék, amelyek $\vartheta \approx 180^\circ$ -os szögben térültek el, vagyis úgy viselkedtek, mintha egy tömör, áthatolhatatlan falról verődtek volna vissza. Ebből Rutherford azt a következtetést vonta le, hogy az atomban kell lennie egy kisméretű, az α -részecskékhez képest nagy tömegű, pozitív töltésű „mag”-nak. Ismerve az α -részecskék és a mag kölcsönhatását és az α -részecskék sebességét, megbecsülhetjük, hogy mekkora a részecskéket visszalökő pozitív töltésű mag.

A mag és az α -részecskék között elektrosztatikus taszítás lép fel, amelyet a Coulomb-törvény ad meg. Ez a taszító erő fékezi le a részecskéket, így felírhatjuk, hogy a visszafordulás b távolságánál a részecske

$$E_h^\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2eZe}{b} \text{ helyzeti energiája}$$

$$\text{meg egyezik a részecske } E_{m0}^\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2$$

kezdeti mozgási energiájával: $E_h^\alpha = E_{m0}^\alpha$ (ábra). A helyzeti energia kifejezésének behelyettesítésével azt kapjuk, hogy

$$\frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{b} = \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2,$$

amiből a minimális távolságra azt kapjuk, hogy

$$b = \frac{Ze^2}{\pi\epsilon_0 m_\alpha v_\alpha^2}.$$

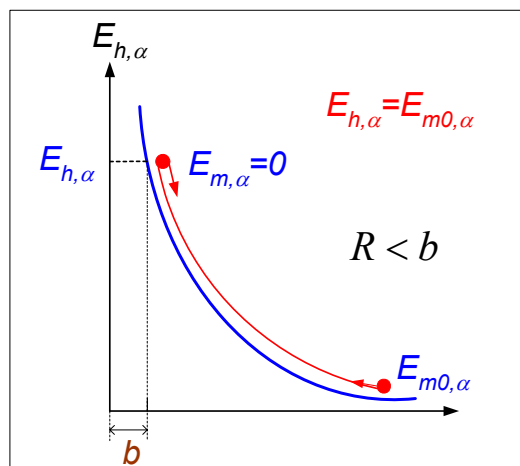
Ennél a pozitív mag sugara csak kisebb lehet, tehát a mag R sugarára az

$$R < b = \frac{Ze^2}{\pi\epsilon_0 m_\alpha v_\alpha^2}$$

becslést kapjuk.

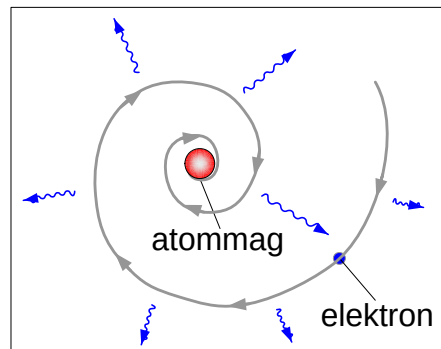
Behelyettesítve a konstansokat, a kísérletben használt ezüst atom $Z = 47$ rendszámát, az $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ elemi töltést, az α -részecske $m_\alpha = 6,6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ tömegét és $v_\alpha \approx 10^7 \text{ m/s}$ sebességét, azt kapjuk, hogy $R < 6 \cdot 10^{-14} \text{ m}$. Tudjuk, hogy az atomok mérete nagyságrendben $r_{\text{atom}} \approx 10^{-10} \text{ m}$, a mag sugara tehát mintegy 4-5 nagyságrenddel kisebb, mint az atomé.

A kísérletek alapján megalkotott modell szerint az atom tömege lényegében egy kisméretű, pozitív töltésű *atommagban* van összesűrítve, és a mag körül helyezkednek el az ehhez képest elhanyagolható tömegű, negatív töltésű elektronok. A pozitív- és negatív töltések mennyisége azonos, $Q = Ze$, ahol Z az atom rendszáma, e az elemi töltés (az elektron töltésének nagysága).



Rutherford a modell alapján részletesen kiszámította a szórt részecskék szögeloszlását, majd azt kísérletekkel ellenőrizték. A kísérletek a modell helyességét igazolták.

Az atom szerkezetére vonatkozó eredmények mellett Rutherford megkísérelte a modellt kiterjeszteni az atom működésére is. Mivel a Thomson-féle sztatikus atom nem stabil, azt tételezte fel, hogy az elektronok az atommag körül keringenek, és a keringéshez szükséges centripetális erőt a Coulomb-vonzás biztosítja. Ez lényegében egy naprendszer-modell, ahol az atommag felel meg a Napnak, az elektronok a bolygóknak, az atomot összetartó Coulomb erő pedig a tömegvonzásnak. A probléma az, hogy az atomban mozgó elektronoknak elektromos töltése van, ezért a klasszikus fizika szerint elektromágneses sugárzást kell kibocsátaniuk (a körmozgás gyorsuló mozgás). Emiatt egy ilyen atom sem lehet stabil, mert a sugárzás miatt az elektron energiája fogy, így egyre kisebb sugarú pályára kerül, és spirális pályán beleesik a magba.



A Bohr-féle atommodell

Az atommodell problémájának egyfajta megoldásához N. Bohr¹ jutott el, úgy, hogy a Rutherford-féle 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 oszcillátor rezgéseiből próbálta származtatni. Ehelyett a fénykibocsátást az atom energiaváltozásaival hozta kapcsolatba, és feltevése szerint egy hf energiájú foton megjelenése az atom energiacsökkenésének rovására történik. Ahhoz, hogy a vonalas színeképeket értelmezni tudja, további feltevésekre volt szükség.

Az egyik feltevés az volt, hogy az atom csak meghatározott diszkrét $E_1, E_2, E_3, \dots, E_m, \dots, E_n, \dots$ energiájú állapotokban létezhet, és ha az atom egy E_m energiájú állapotból alacsonyabb E_n energiájú állapotba megy át, akkor az energiafelesleget foton formájában adja le, és a keletkező foton illetve a kisugárzott elektromágneses hullám) f_{mn} frekvenciáját az

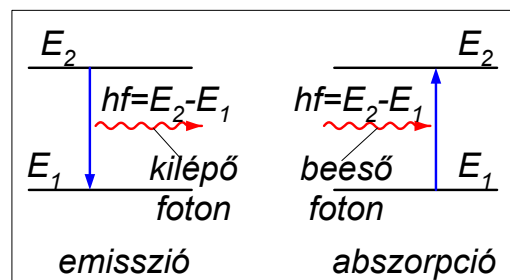
$$E_m - E_n = hf_{mn}$$

egyenlet szabja meg. Ez a Bohr-féle frekvenciafeltétel.

Ezzel a feltevéssel 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 fotont nyelhet el, amely a kiinduló energiaállapotából valamelyik lehetséges magasabb energiaállapotába viszi át, vagyis amelyre teljesül a fenti egyenlet.

A sugárzás kibocsátásának (emisszió) és elnyelésének (abszorpció) ezt a mechanizmusát szemlélteti a mellékelt



¹ Niels BOHR (1885-1962) Nobel-díjas (1922) dán fizikus.

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. Az emisszió úgy jön létre, hogy az atom egy magasabb energiájú állapotból alacsonyabb energiájú állapotba kerül, és az energiafelesleget egy foton – tehát elektromágneses sugárzás – formájában adja le. Az abszorpció során az atom elnyel egy foton – tehát elektromágneses sugárzást – és ennek következtében egy alacsonyabb energiájú állapotból magasabb energiájú állapotba kerül. Mivel az atom csak meghatározott energiával rendelkezhet, csak olyan foton (sugárzást) képes elnyelni, amelynek frekvenciája megfelel az $f = \frac{E_2 - E_1}{h}$ feltételnek.

Könnyen belátható, hogy ha egy atomnak meghatározott, diszkrét energiaállapotai vannak, akkor ezek megfelelő megválasztásával bármilyen vonalas színekép értelmezhető. A kérdés az, hogy hogyan lehet ezeket a diszkrét energiaállapotokat értelmezni és meghatározni. Ezzel kapcsolatos a modell második alapvető feltételezése.

Bohr a Rutherford-féle – az atommag körül keringő elektront feltételező – atommodellbe építette be a diszkrét energiákat, ehhez azonban ismét a klasszikus fizikától idegen feltételezést kellett elfogadnia. Feltételezte, hogy valamilyen okból léteznek olyan *stacionárius* elektronpályák, amelyeken a keringő elektron nem sugároz. Mivel a körpályán mozgó elektron energiája különböző sugarú pályákon más és más, ezzel a diszkrét energiák megjelennek az elméletben. A megfelelő pályasugarak (tehát megfelelő diszkrét energiák) kiválasztása csak úgy történhet, hogy ezek a vizsgált atom színeképében megjelenő frekvenciákat szolgáltatassák. A hidrogén atom színeképének tanulmányozása azt mutatta, hogy a megfelelő pályasugarak (r_n) azzal az önkényesen választott feltétellel kaphatók meg, hogy a pályán keringő elektron $L_n = r_n m_0 v_n$ perdülete (impulzusmomentuma) csak a $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ érték¹ egészszáma (n) többszöröse lehet, azaz

$$L_n = n\hbar.$$

Ez azt jelenti, hogy a perdület csak diszkrét lépésekben változhat – idegen szóval: *kvantált* – ezért ezt az összefüggést *Bohr-féle kvantumfeltételnek* nevezik.

Ha a H atomban a mag Coulomb-erőterében körmozgást végző elektronra felírjuk a mozgásegyenletet, és alkalmazzuk a Bohr-féle kvantumfeltételt, akkor a H -atom lehetséges energiaértékeit viszonylag egyszerűen meghatározhatjuk.

Egy r sugarú körpályán v sebességgel mozgó elektron sugárirányú gyorsulása az $a_{cp} = \frac{v^2}{r}$ centripetális gyorsulás. Mivel ezt a pozitív töltésű mag és a negatív töltésű

elektron Coulomb-kölcsönhatása hozza létre, a sugárirányú erő $F_{cp} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$. A

mozgásegyenlet $F_{cp} = m_0 a_{cp}$ sugárirányú komponense ezekkel a kifejezésekkel az

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m_0 \frac{v^2}{r}$$

alakba írható.

¹ A $\hbar$ (kiejtése: há vonás) jelölés bevezetését az indokolja, hogy ez a mennyiség az atomi rendszerekkel kapcsolatos megfontolásokban a perdület (impulzusmomentum) elemi "adagjának" szerepét játssza, és ezért gyakran előfordul.

Ha r -rel egyszerűsítünk, és beírjuk a Bohr-féle kvantumfeltételből kapható az $r_n = \frac{n\hbar}{m_0 v}$ kifejezést, akkor megkapjuk az elektron lehetséges sebességértékeit:

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}.$$

Szorozzuk meg és osszuk el a fenti egyenletet a c fénysebességgel, akkor a

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \frac{c}{n}$$

alakot kapjuk. Ha bevezetjük az atomfizikában használatos $\alpha_f = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ dimenzió nélküli *finomszerkezeti állandót*¹, akkor a sebességekre azt kapjuk, hogy

$$v_n = \alpha_f \frac{c}{n}.$$

Helyettesítsük vissza ezt a v_n értéket az $r_n = \frac{n\hbar}{m_0 v}$ egyenletbe. Ekkor megkapjuk, hogy a Bohr-modell szerint a H atom elektronja milyen sugarú körpályákon mozoghat:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar}{\alpha_f m_0 c}.$$

Látható, hogy a legkisebb sugarú pálya az $n=1$ esetben jön létre, és értéke

$$r_1 = a_B = \frac{\hbar}{\alpha_f m_0 c} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

Ezt a pályasugarat *Bohr-sugárnak* nevezik, és jelölésére rendszerint az a_B szimbólumot használják. A Bohr-sugár felhasználásával a lehetséges pályasugarak az

$$r_n = n^2 a_B$$

alakban írhatók fel.

Az elektron (pontosabban a kölcsönhatásban álló elektron-atommag rendszer) lehetséges energiái ezek után könnyen meghatározhatók:

$$E_n = \frac{1}{2} m_0 v_n^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} = \frac{1}{2} m_0 c^2 \alpha_f^2 \frac{1}{n^2} - m_0 c^2 \alpha_f^2 \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} m_0 c^2 \alpha_f^2 \frac{1}{n^2}.$$

Ha visszahelyettesítjük a finomszerkezeti állandó kifejezését, akkor a korábban már felírt

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

kifejezést kapjuk.

Az energia kifejezését egyszerűsíteni lehet, ha az $n=1$ értékhez (az alapállapothoz) tartozó energiára bevezetjük az $R_y = \frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$ jelölést. Ezzel a H atom lehetséges energiaértékei:

¹ A finomszerkezeti állandó – mint az elnevezése is utal rá – az atomi energiaszint-rendszerek finomabb részleteinek meghatározásánál játszik szerepet. Értéke $\alpha_f = \frac{1}{137,036}$.

$$E_n = -R_y \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

Az alapállapot energiájának nagyságát megadó $R_y = 13,605 \text{ eV}$ ¹ mennyiséget *Rydberg-energiának*² nevezik.

Az energia negatív előjele a vonzó kölcsönhatás, a rendszer kötött állapota miatt jelenik meg. Eszerint a rendszer energiája nulla, ha az elektron és a mag egymástól igen nagy távolságra került, vagyis az elektron kilépett az atomból, és negatív ha kölcsönhatásban állnak egymással. A kvantált energiaértékek csak kötött állapotban lépnek fel, a kiszabadult elektron energiája folytonosan változhat. Az alapállapotban lévő elektronnak a H atomból történő kilépéséhez $1R_y = 13,605 \text{ eV}$ energiára van szükség.

Ha a kapott energiaértékeket a Bohr-féle frekvenciafeltételbe behelyettesítjük

$$hf_{mn} = E_m - E_n = -R_y \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

akkor megkapjuk a kisugárzott elektromágneses hullámok lehetséges frekvenciáit:

$$f_{mn} = \frac{E_m - E_n}{h} = \frac{R_y}{h} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m, n \text{ egész szám, } m > n \geq 1.$$

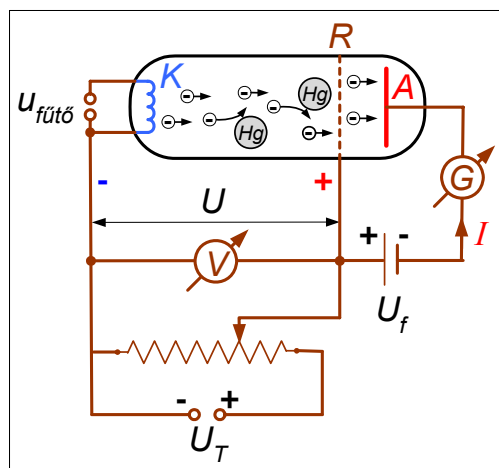
Ebből az összefüggésből valóban a H atom által kisugárzott frekvenciákat kapjuk, vagyis a Bohr-moddell a H atom vonalas színeképét meglepő pontossággal magyarázni tudja.

A Bohr-moddell komoly lépést jelentett az atom viselkedésének megértésében, de ebben az esetben is csak önkényes feltevésekkel (sugárzásmentes, stacionárius pályák, önkényesen kvantált energiaértékek), és csak speciális esetekben (H atom illetve a hozzá hasonló, ún. hidrogénszerű atomok esetében) sikerült a kísérleti eredmények értelmezése.

A Franck–Hertz-kísérlet

A Bohr-moddell az atomok fénykibocsátására és fényelnyelésére vonatkozó spektroszkópiai eredmények alapján született. Ezért fontos megvizsgálni, hogy a diszkrét atomi energiák létezése más jellegű folyamatokban is megnyilvánul-e. A legnevezetesebb kísérlet, amit ennek a kérdésnek a tisztázása érdekében elvégeztek, J. Franck³ és G. Hertz⁴ nevéhez fűződik. A kísérlet lényege a következő.

Egy edényben (ábra), amelyben kisnyomású Hg -gőz van, fémzárlat (K) izzítása útján elektronokat keltettek, majd ezeket a fémzárlat és egy az elektronok számára átjárható rács (R) közé kapcsolt U



¹ Az eV energiaegység az atomfizikában gyakran előfordul: azt az energiát jelenti, amelyre egy elektron 1 V potenciálkülönbség hatására tesz szert: $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1 \text{ V} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

² Janne Robert RYDBERG (1854-1919) svéd fizikus.

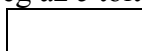
³ James FRANCK (1882-1964) Nobel-díjas (1925) német származású amerikai fizikus.

⁴ Gustav Ludwig HERTZ (1887-1975) Nobel-díjas (1925) német fizikus.

feszültséggel felgyorsították.

Az elektronok útjuk során ütközhetnek a Hg -atomokkal, és ha ezután átjutottak a rácson, akkor egy gyenge fékező elektromos erőterbe (U_f) kerültek, amelynek célja az, hogy a nagyon kis energiájú elektronok ne érhessek 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 a mellékelt ábra görbéjéhez hasonló eredményt kaptak. A feszültség növelésével az I áram kezdetben nő, ami megfelel a várakozásnak. Az $U_1 = 4,9 V$ gyorsítófeszültség elérésekor azonban az áram hirtelen leesik. Ez a gyorsítófeszültség az e töltésű elektronok



mozgási energiájának felel meg. Ez azt

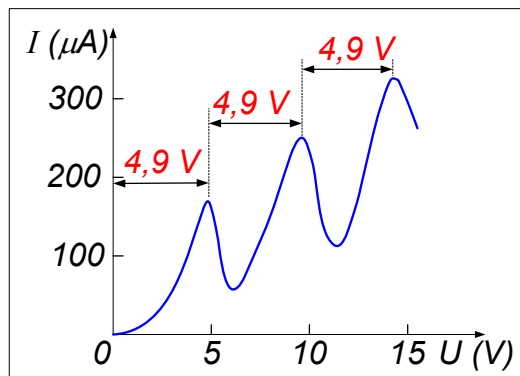
jelent, hogy ennél a mozgási energiánál megváltozik az elektronok és a Hg -atomok kölcsönhatásának jellege: a kisebb mozgási energiáknál az ütközés rugalmas, az E_{m1} értéknél azonban rugalmatlanná válik, vagyis az ütközés során az elektronok elveszítik mozgási energiájukat, és nem tudnak átjutni a gyenge fékező erőterén. A feszültséget tovább növelve, megint nő az áram, majd az $U_2 \approx 2U_1 = 9,8 V$ feszültségnél újabb áramcsökkenés következik be. Ennek oka a fentiek szerint az lehet, hogy a $2E_{m1}$ 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 $U_1 = 4,9 V$, ami azt jelenti, hogy a kérdéses energiakülönbség $E_2 - E_1 = 4,9 eV = 7,8 \cdot 10^{-19} J$.

A kísérletek során sikerült azt is kimutatni, hogy az áram lecsökkenésével (az elektronok lefékeződésével) egyidejűleg a Hg -atomok $\lambda = 2,54 \cdot 10^{-7} m$ hullámhosszú, azaz $f = 1,18 \cdot 10^{15} s^{-1}$ frekvenciájú sugárzást bocsátanak 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 az energiáját egy foton formájában adja le. Ezt számszerűen is alátámasztja az a tény, hogy a fenti frekvenciának megfelelő fotonenergia $hf = 4,9 eV$, azaz megegyezik az ütközés során létrejött energiaváltozással.

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



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*-t¹ arra a gondolatra, hogy feltételezze, ez a kettősség érvényes az általunk részecskéknek ismert objektumokra is. De Broglie szerint tehát az elektromágneses 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.

„Anyaghullámok”, a de Broglie-hullámhossz

A részecskéhez rendelt hullám, vagy egy másik szokásos elnevezéssel „anyaghullám” megtalálásához a foton-analógia adhat támpontot, ezért először foglalkozzunk a fotonnak megfelelő, fénysebességgel haladó, tehát nulla nyugalmi tömegű részecske esetével. A relativitáselméletből tudjuk, hogy egy ilyen részecske energiája és impulzusa között az

$$E = pc$$

összefüggés áll fenn. Másrészt a foton energiája

$$E = hf,$$

tehát impulzusa (felhasználva az $f = \frac{c}{\lambda}$ 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_0 tömegű, v sebességű, $p = m_0 v$ impulzusú részecskéhez

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 v}$$

hullámhosszt kell hozzárendelni. Ez a részecskék *de Broglie-hullámhossza*.

A részecskék hullámszerű viselkedését később sikerült közvetlen kísérletekkel igazolni. Ezeknek a kísérleteknek az 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 igaz az, hogy a mozgó részecskék hullámként tudnak viselkedni, akkor várhatóan egy elektronnaláb a de Broglie-hullámhosszával közel azonos rácsállandójú "rácson" történő áthaladás után a hullámnál tapasztalt periodikus intenzitás-eloszlást mutat.

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

$$eU = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{h^2}{2m_0 \lambda^2}$$

összefüggésből kapható meg:

¹ Louis Victor de BROGLIE (1892-1981) Nobel-díjas (1929) francia fizikus.

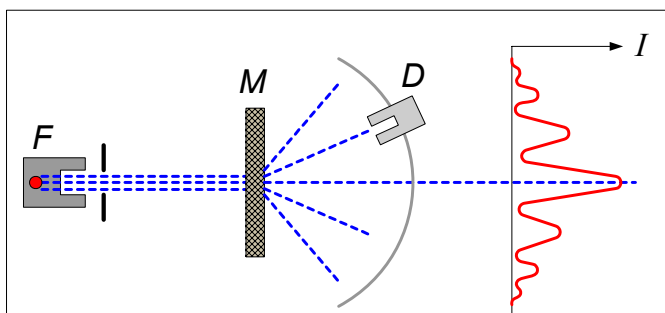
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eU}}.$$

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 rácsra van szükség. Ilyen rácsot 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.

Thomson¹ polikristályos kristálylemezen² áthaladó elektronnyalábot vizsgált. Az ábrán a mérés elvi vázlata látható.

Egy elektronforrásból (F) megfelelő sebességre felgyorsított elektronnyaláb esik a vékony polikristályos mintára (M). A nyaláb a mintán áthaladva szóródik, és a különböző szögek alatt szórt intenzitás fluoreszkáló lemezen közvetlenül megfigyelhető,

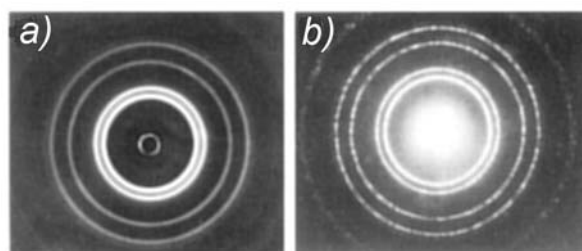


fotolemezen rögzíthető vagy megfelelő detektorral (D) letapogatható.

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 röntgendiffrakciónál 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. fénycsugárok optikai rácson- vagy röntgensugaraknak kristályrácsra 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).

Más elrendezést használt Davisson³ és Germer¹. Ők az elektronoknak egykristályról való visszaverődését vizsgálták, és azt találták, hogy a visszavert elektronnyaláb

¹ George Paget THOMSON (1892-1975) Nobel-díjas (1937) angol fizikus.

² A polikristályos anyag rendezetlenül elhelyezkedő, szabályos atomelrendeződésű kristályszemcsékből áll.

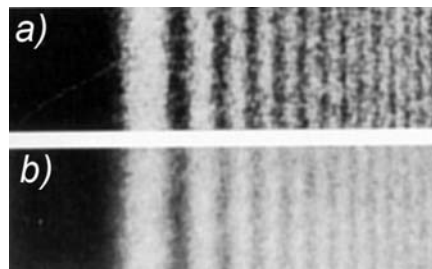
³ Clinton Joseph DAVISSON (1881-1958) Nobel-díjas (1937) amerikai fizikus.

intenzitáseloszlása a hullámok diffrakciójának megfelelő intenzitáseloszlást mutat. A kristály felületére különböző ϑ_n szögek alatt beeső sugarak közül azoknak az intenzitása volt maximális, amelyekre teljesült a röntgensugaraknál megismert Bragg-feltétel:

$$2d \sin \vartheta_n = n\lambda$$

(itt d az atomi rácssíkok távolsága, λ az elektronnyalábhoz rendelt deBroglie-hullámhossz, n egész szám).

Végül még egy kísérletet említünk meg, amely szintén az elektronnyaláb hullámszerű viselkedését mutatja. Tudjuk, hogy ha egy fénycsugár 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 „hullámhosszá” megadó de Broglie-féle összefüggés, vagyis az a furcsa tény, hogy nyugalmi tömeggel rendelkező részecskékhez egy sajátos „anyagcsuga” rendelhető.

A hullámfüggvény

A részecske-diffrakciós 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, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ a hullámszám, ω a körfrekvencia, A az amplitúdó, a hullám a $+x$ -tengely irányában halad).

Ha közönséges rugalmas 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 ráccsal kölcsönhatásba lép, akkor a hullámfüggvény megváltozik (pl. 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

¹ Lester Halbert GERMER (1896-1971) amerikai fizikus.

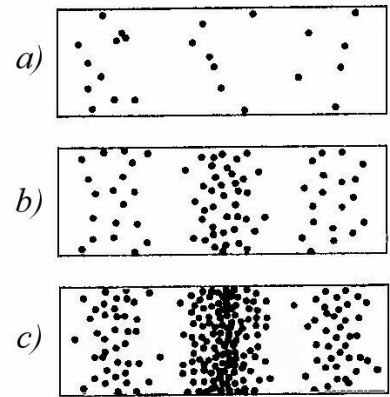
módosított hullámfüggvény amplitúdójának négyzetével, illetve a komplex alakba írt hullámfüggvény abszolút értékének négyzetével,

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

Kérdés azonban, hogy mit jelent részecskék esetén a hullámfüggvény, illetve a fenti összefüggéssel megadott, a klasszikus hullámoknál intenzitásnak nevezett mennyiség? A kérdés megválaszolásában segít, ha de Broglie gondolatmenetét felidézve a fotonképet hívjuk segítségül.

Elektromágneses sugárzás esetén a szállított energia a fotonok számával arányos, vagyis adott helyen az intenzitás arányos az oda beérkező fotonok számával. 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, egységnyi felületre 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)-c) 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: a $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ mennyiség *valószínűségi sűrűséget* jelent, vagyis annak valószínűségét adja meg, hogy a részecske a t időpillanatban 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 véges V térfogatban való előfordulás P_V valószínűsége eszerint

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

A hullámfüggvény ilyen értelmezéséből rögtön kapunk egy megszorítást is a hullámfüggvényre vonatkozóan. Annak a valószínűsége ugyanis, hogy a részecske a teljes térben valahol megtalálható, nyilván I , vagyis

$$\int_{\text{teljes térre}} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = 1.$$

Ezt az összefüggést a hullámfüggvényre vonatkozó *normálási feltételnek* nevezzük, és fontos szerepe van a hullámfüggvény megtalálásában.

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.

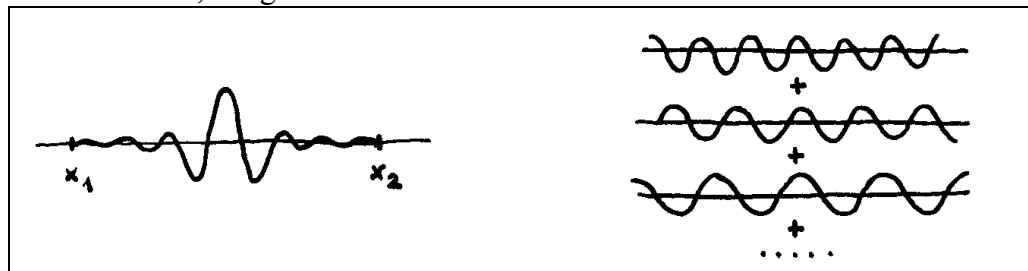
"Hullámszerű részecske" hullámcsomag modellje: a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés

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 előállításhoz 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

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

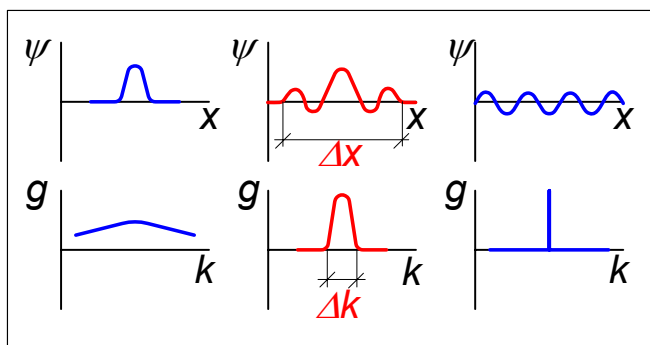
összefüggés. Ez valóban azt jelenti, hogy a csomag térbeli kiterjedésének csökkentése csak az alkalmazott hullámszám-tartomány szélesítésével, vagyis a hullámszám (és így a hullámhossz) definiálatlanságának növelésével lehetséges. Ha viszont jól definiált hullámszámú, közel harmonikus hullámot akarunk 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. Heisenberg¹ vezette le, ezért *Heisenberg-féle határozatlansági összefüggésnek* nevezik.

Az energiára és élettartamra vonatkozó határozatlansági összefüggés, a természetes vonalszélesség

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 frekvencia-intervallumból 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:

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

Formailag ugyanilyen összefüggés vezethető le a kvantummechanika segítségével (perturbációszámítás) is, és ebből a levezetésből kiderül az összefüggés jelentése is. Ennek alapján az összefüggést úgy értelmezhetjük, hogy ha egy részecske valamilyen állapota véges Δt ideig áll fenn, akkor energiájában a fenti összefüggésnek megfelelő

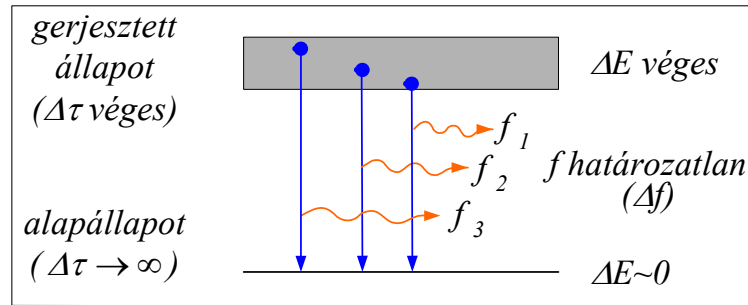
$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t}$$

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 $\Delta \tau$ idő után az alapállapotba visszatér, és energiáját egy foton formájában adja le. Mivel a gerjesztett állapot

¹ Werner Karl HEISENBERG (1901-1976) Nobel díjas (1932) német fizikus

élettartama véges, a gerjesztett állapot energiája legalább $\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta\tau}$ 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 színeképében a vonalak kiszélesednek (ábra). A kiszélesedés mértékét a $\Delta f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1}{4\pi\Delta\tau}$ összefüggéssel becsülhetjük meg.



Ez a jelenség a spektrumvonalak *természetes kiszélesedése*, Δf 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.

Kötött mikrorészecskék állapotának kvantitatív leírása

A mikroobjektumokkal kapcsolatos jelenségek közül elvi és gyakorlati szempontból is nagyon fontosak azok, amelyek az atomi rendszerekben játszódhatnak le. Ezeknek a megértéséhez mindenképp a kötött állapotban lévő részecskék (pl. atomi elektronok) viselkedésének kvantitatív leírására van szükség. Az alábbiakban ezzel a problémával foglalkozunk.

Kötött részecske stacionárius állapotai, a Schrödinger-egyenlet

A mikrorészecskék viselkedésének két igen jellegzetes megnyilvánulása az, hogy: *a)* a kötött részecske csak meghatározott, diszkrét energiaértékeket vehet fel, és *b)* a részecskéknek hullámszerű tulajdonságaik vannak, és leírásuknál igen fontos szerepet játszik egy a körülmények által meghatározott hullámfüggvény. A kérdés az, hogyan lehet a hullámfüggvényt és a rendszer lehetséges energiáit elméleti úton, általános fizikai törvények alapján meghatározni.

Annak érdekében, hogy a fenti kérdésre lehetőleg egyszerű, de a lényeget mégis tartalmazó választ adhassunk, a feladatot egyszerűsíteniünk kell: a kötött részecskéknek csak az időben állandósult, *stacionárius állapotait* vizsgáljuk.

Számos tapasztalat utal arra, hogy a részecskék hullámszerű viselkedése akkor kerül előtérbe, ha mozgásukat valamilyen módon egy kis térrészre korlátozzuk. Tipikusan ilyen eset az atomban kötött, az atom térfogatába bezárt elektron.

Első durva becslésként nézzük meg, hogy milyen eredményre jutunk, ha az atomi elektronhoz hullámot rendelünk. Mivel az atom külső behatás nélkül energiát nem ad le, tehát valamilyen állandósult állapotban van, elektronjának hullámszerű viselkedése állóhullámnak felelhet meg. Ha feltételezzük, hogy az "elektronhullám" r sugarú stacionárius pályán mozog, akkor a körpálya mentén elképzelt állóhullám kialakulásának feltétele az, hogy a körpályán éppen egész számú hullámhossz "férjen el", azaz

$$2r\pi = n\lambda$$

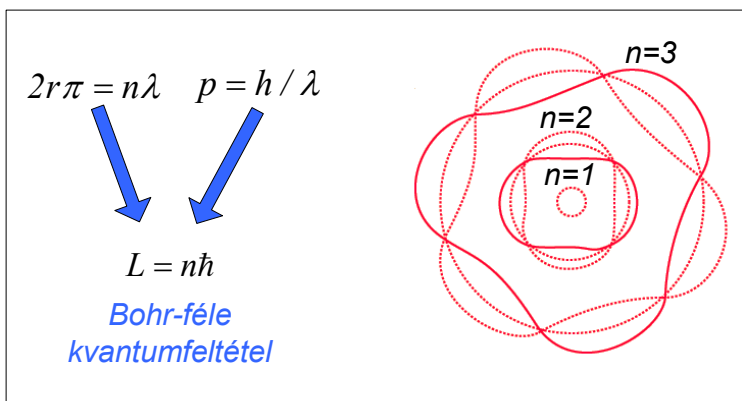
ahol n egész szám (ábra).

Felhasználva a $p = h/\lambda$ egyenletet, és azt, hogy az elektron impulzusmomentuma a körpályán $L = rp$, a stacionárius pálya kialakulásának feltételére az

$$L = n\hbar$$

összefüggést kapjuk, ami azonos a Bohr-modellben önkényesen választott, és a H -atom esetén a helyes, diszkrét energiaértékeket eredményező kvantumfeltétellel. Az állóhullám-kép tehát ebben az esetben helyes eredményre vezetett.

Az a tény, hogy a Bohr-féle kvantumfeltétel a kötött részecskéhez rendelt állóhullám segítségével levezethető, azt sugallja, hogy a kötött részecskék állandósult állapotainak leírásánál érdemes az állóhullámokat leíró stacionárius hullámegyenlet felhasználásával próbálkozni. Már kvalitatív megfontolásokból is látható, hogy ez az egyenlet valóban elvezethet a probléma megoldásához, hiszen térben korlátozott hullámra vonatkozik, és



időben állandósult megoldások csak diszkrét hullámhossz illetve hullámszám értékek mellett lehetségesek.

A stacionárius Schrödinger-egyenlet

A hullámtanból tudjuk, hogy egy klasszikus állóhullám $\psi(x,y,z)$ amplitúdó-eloszlását a

$$\frac{d^2\psi(x,y,z)}{dx^2} + \frac{d^2\psi(x,y,z)}{dy^2} + \frac{d^2\psi(x,y,z)}{dz^2} + k^2\psi(x,y,z) = 0$$

állóhullám-egyenlet adja meg, ahol k a hullámszám.

A mikroobjektumokra való "áttérés" úgy történhet, hogy a hullámszámot, a *de Broglie- hullámhosszt* megadó összefüggés felhasználásával, kifejezzük a részecske impulzusával:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h\omega}{2\pi c} = \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k ,$$

tehát

$$k = \frac{p}{\hbar} .$$

Ekkor az egyenlet a

$$\frac{d^2\psi(x,y,z)}{dx^2} + \frac{d^2\psi(x,y,z)}{dy^2} + \frac{d^2\psi(x,y,z)}{dz^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x,y,z) = 0$$

alakot ölti. Mivel a részecskékre vonatkozó közvetlen tapasztalataink elsősorban az energiával kapcsolatosak (pl. atomi energiaszintek), fejezzük ki az impulzust az E_m mozgási energiával

$$p^2 = 2mE_m .$$

Ezután, felhasználva az

$$E = E_m + V(x,y,z)$$

összefüggést, p^2 kifejezhető az E teljes energiával és az általában helyfüggő $V(x,y,z) = V(\mathbf{r})$ helyzeti (potenciális) energiával¹:

$$p^2 = 2m(E - V(\mathbf{r})) .$$

Ezzel a $\psi(x,y,z)$ függvényre vonatkozó egyenletünk a

$$\frac{d^2\psi(x,y,z)}{dx^2} + \frac{d^2\psi(x,y,z)}{dy^2} + \frac{d^2\psi(x,y,z)}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\mathbf{r}))\psi(x,y,z) = 0$$

alakot ölti. A Δ Laplace-operátor alkalmazásával, és átrendezéssel az egyenlet a szokásosan használt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z) + V(\mathbf{r})\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

alakba írható.

A kapott egyenlet, eredeti szándékunknak megfelelően, olyan állóhullám egyenlet, amelyben részecskejellemzők (E , m) is szerepelnek. Emellett az állóhullám-egyenletre vonatkozó tapasztalataink alapján azt várjuk, hogy az egyenletnek csak az E energia

¹ A kvantumelméletben a helyzeti energiát általában V -vel jelölik.

diszkrét értékei mellett vannak megoldásai. Vagyis az egyenlet alkalmas lehet a kötött mikrorészecskék viselkedésének leírására.

Ez az egyenlet, amelyet *stacionárius Schrödinger-egyenletnek*¹ neveznek, a tapasztalat szerint a kötött részecskék hullámfüggvényét és energiaértékeit valóban jól megadja, és így a mikrorészecskék viselkedésének leírásával foglalkozó tudományág, a *kvantummechanika* egyik alapvető törvényévé vált.

A Schrödinger-egyenlet néhány egyszerű alkalmazása

Sajnos a legtöbb valóságos esetben a Schrödinger-egyenlet nehezen oldható meg, ezért az alábbiakban az egyenlet megoldásának bemutatásaként csupán a legegyszerűbb egydimenziós esetet tárgyaljuk részletesen, ahol az $V(x)$ potenciális energiát speciálisan választjuk meg. Egyéb esetekben csak a megoldás kiinduló összefüggéseit és az eredményeket mutatjuk be.

Részecske végtelen magas potenciálfalak között

Számszerűen is könnyen végigvihető a Schrödinger-egyenlet megoldása, ha olyan részecske viselkedését vizsgáljuk, amely csak az x -tengely mentén mozoghat, és mozgását mindkét oldalról végtelen magas potenciálfal gátolja, azaz a potenciális energia az $x \leq 0$ és az $x \geq a$ helyeken végtelen (ábra).

Válasszuk a potenciális energiát a $(0, a)$ intervallumban nullának ($V = 0$), és határozzuk meg a részecske tartózkodási valószínűségét megadó $\psi(x)$ hullámfüggvényt és a részecske lehetséges energiáit.

A feladat a Schrödinger-egyenlet segítségével oldható meg, itt azonban az egyenlet egydimenziós változata is elegendő:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Mivel a részecske energiája végtelen nem lehet, csak a $(0, a)$ tartományban tartózkodhat. Itt potenciális energiája $V = 0$, így a megoldandó egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x),$$

illetve

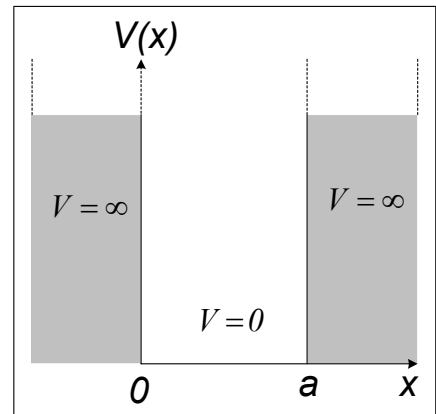
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0.$$

A végtelen magas potenciálfal miatt a részecske tartózkodási valószínűsége és hullámfüggvénye a $(0, a)$ tartományon kívül és (a folytonossági követelmény miatt) a tartomány határán is nulla. Így a Schrödinger-egyenlet megoldásának peremfeltételei a következők:

$$\psi(0) = 0$$

$$\psi(a) = 0.$$

Ez az egyenlet egy olyan állóhullám-egyenlet, amelyet már megoldottunk a hullámtanban (két végén rögzített húr). Ott az egyenletet a



¹ Erwin SCHRÖDINGER (1887-1961) Nobel-díjas (1933) osztrák fizikus.

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0$$

alakban írtuk fel, ugyanezekkel a határfeltételekkel. Láttuk, hogy a határfeltételeknek megfelelő megoldás

$$\psi(x) = A \sin(kx)$$

volt.

Azt is láttuk, hogy a határfeltételek miatt k csak meghatározott k_n értékeket vehet fel:

$$k_n = n \frac{\pi}{a}$$

(n egész szám).

Esetünkben

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E,$$

vagyis k tartalmazza az energiát. Ennek megfelelően az energia értéke sem lehet tetszőleges, hanem csak a fenti egyenletekből következő

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

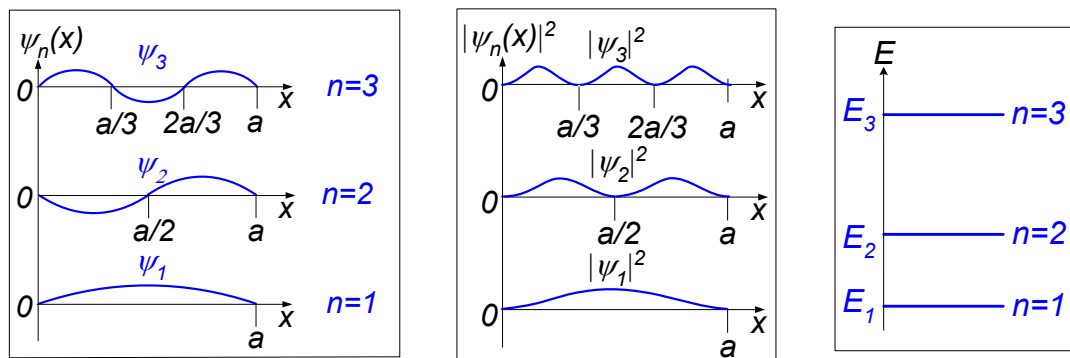
értékeket vehet fel. Matematikailag lehetséges az $n=0$ érték is, de ez $\psi \equiv 0$ hullámfüggvényt eredményez, ami azt jelenti, hogy ebben az állapotban az elektron nem fordul elő. Ez a mikrorészecskének azzal a sajátosságával függ össze, hogy a helyük és sebességük egyidejűleg nem adható meg pontosan.

A fentiek figyelembevételével a Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

Mint említettük, ez a megoldás azonos a két végén rögzített rugalmas kötélben kialakuló állóhullám amplitúdó-eloszlásával. Vagyis ezt az eredményt a stacionárius állapot állóhullám-modellje alapján is megkaphattuk volna (vö. a Bohr-féle kvantumfeltétel "levezetése").

A hullámfüggvényeket, a részecske tartózkodási valószínűségeit és a részecske lehetséges energiáit különböző n értékek esetén az alábbi ábra mutatja.



A megoldás furcsasága az, hogy a részecske tartózkodási valószínűsége a $(0, a)$ intervallum

különböző helyein a klasszikus várakozásoktól teljesen eltérő.

A megoldásban szereplő A konstans a *normálási feltételből* kapható meg (a részecske megtalálási valószínűsége a teljes $(0, a)$ intervallumban 1):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = A^2 \frac{a}{2} = 1.$$

Ebből $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$, és így a hullámfüggvény normált alakja

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

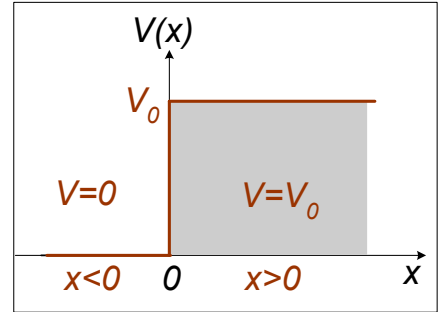
Részecske találkozási potenciállépcsővel, az alagúteffektus

Tudjuk, hogy egy mikrorészecske tartózkodási helye nem adható meg pontosan, csupán a tartózkodási valószínűséget tudjuk kiszámítani. Erre a valószínűségre az előző példában a klasszikus fizika elvárásaihoz képest meglepő eredményt kaptunk.

Nem kevésbé meglepő eredményre jutunk, ha megvizsgáljuk egy részecske viselkedését egy véges magasságú potenciális energia-lépcső, szokásos, rövidebb elnevezésével *potenciállépcső* közelében (ábra).

Egydimenziós mozgást tételezünk fel, és a potenciállépcső esetünkben azt jelenti, hogy az $x < 0$ helyeken a potenciális energia $V = 0$, az $x > 0$ helyeken pedig $V = V_0$.

Mivel a részecskének csak az állandósult, stacionárius viselkedését vizsgáljuk, a probléma tárgyalására a



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

egydimenziós, stacionárius Schrödinger-egyenletet használjuk, amit itt a

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

alakban írunk fel.

Mivel a potenciálfüggvény az x -tengely két különböző tartományában eltérő, a Schrödinger-egyenlet a két tartományban különbözni fog:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0, \quad \text{ha } x < 0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi(x) = 0, \quad \text{ha } x > 0.$$

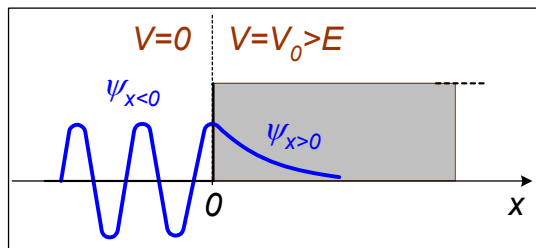
Ezt a két egyenletet kell megoldani, és a megoldásokat a tartományok határán illeszteni.

A részletes számítást nem végezzük el, csupán a megoldás egy meglepő eredményét mutatjuk be. Eszerint az $E < V_0$ esetben, vagyis amikor olyan részecske érkezik a potenciállépcsőhöz, amelynek energiája kisebb, mint a lépcső magassága, a hullámfüggvény az $x > 0$ tartományban (vagyis a lépcső belsejében) sem nulla, hanem a helytől a

$$\psi_{x>0} = Ce^{-\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x}$$

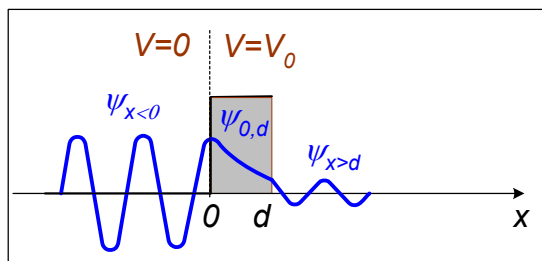
függvény szerint függ.

Ez azt jelenti, hogy a lépcső belsejében – a klasszikus fizika felfogásával ellentétben – a részecske tartózkodási valószínűsége sem nulla. A hullámfüggvény helyfüggésének sematikus menetét a mellékelt ábra mutatja. (Az $x < 0$ helyeken oszcilláló megoldást várunk, hiszen az erre vonatkozó egyenlet a végtelen potenciálfal esetét leíró egyenlettel azonos.)



Ennek a viselkedésnek egy érdekes és gyakorlati szempontból is fontos következménye az *alagúteffektus*. A jelenség a Schrödinger-egyenlet segítségével pontosan tárgyalható, de a potenciállépcsőre érvényes eredmény alapján kvalitatív módon is következtetni lehet rá.

Ha a potenciállépcső helyett egy olyan d szélességű, $V_0 > E$ magasságú potenciálgátat hozunk létre, amelyen a hullámfüggvény exponenciálisan csökkenő része jelentősen túlnyúlik, akkor a részecske hullámfüggvénye átnyúlik a potenciálgáton túli térrészre is (ábra). Eszerint véges valószínűsége van annak, hogy a részecske a falon túl megtalálható, holott a falon való átjutáshoz nincs elegendő energiája. Az effektus elnevezése arra utal, hogy a részecske úgy kerül át a potenciálgát másik oldalára, mintha egy alagúton jutott volna át.



A potenciállépcsőre érvényes eredmény alapján a hullámfüggvény a lépcsőtől d távolságra

$$\psi_d = C e^{-\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}d}{\hbar}},$$

így a részecske potenciálfalon való átjutásának, vagyis az alagúteffektus bekövetkezésének w valószínűségére azt kapjuk, hogy

$$w \sim \psi_d^2 \sim e^{-2d \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}}.$$

Eszerint, bár a részecske klasszikus értelemben "szabálytalanul" hatol át a potenciálfalon, annak jellemző adatai mégis befolyásolják a viselkedését: átjutásának valószínűsége exponenciálisan csökken a potenciálfal vastagságával (d), s annál kisebb valószínűséggel jut át, minél távolabb van az energiája (E) a falon való átmenethez klasszikusan szükséges energiától (V_0), vagyis minél nagyobb a $V_0 - E$ energiakülönbség.

A mikrorészecskékről kialakított fenti kép és a Schrödinger-egyenlet helyességét támasztja alá, hogy az alagúteffektus létezését számos kísérleti tapasztalat igazolja. Alagúteffektussal közlekednek pl. az elektronok a villanykapcsoló bekapcsolásakor érintkezésbe hozott fémlemezek között, de ilyen módon lépnek ki az atommag belsejéből az alfasugárzásban terjedő alfa részecskék is. Az alagúteffektuson alapul az anyagok atomjainak elrendezését láthatóvá tevő alagútmikroszkóp (gyakran használt rövidítése: STM=Scanning Tunneling Microscope) is.

A hidrogénatom, kvantumszámok

A Schrödinger-egyenlet igen fontos alkalmazása az atomi elektronok viselkedésének leírása. Ekkor azonban a probléma háromdimenzióssá válik, és általában a potenciális energia-tag is bonyolult lesz. Most a legegyszerűbb atomra, a hidrogénatomra elvégzett számítás eredményeit foglaljuk össze.

Az egydimenziós esetben láttuk, hogy a kvantált mennyiségek megjelenése mind a klasszikus állóhullám-egyenletnél, mind pedig az egydimenziós Schrödinger-egyenletnél lényegében a határfeltételek következménye volt. Ezért várható, hogy a háromdimenziós esetben három ilyen mennyiség lesz, hiszen mindhárom koordináta mentén meg kell adni a határfeltételeket a hullámfüggvényre. Vagyis az egydimenziós esetben megjelenő, az energiát megszabó n paraméter mellett további kettő megjelenésére számíthatunk. Ezeket a mennyiségeket, amelyek valamilyen mennyiség kvantáltságát fejezik ki, *kvantumszámoknak* nevezik, s az elektron állapotát ezeknek a kvantumszámoknak az értékei jellemzik.

Ahhoz, hogy a hidrogénatom elektronjának viselkedését leírassuk, a Schrödinger-egyenlet háromdimenziós változatát kell használnunk:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x, y, z)) \psi(x, y, z) = 0$$

Ha ezt az egyenletet a *H-atom* leírására akarjuk felhasználni, akkor be kell helyettesíteni az adott rendszernek megfelelő potenciális energiát, ami a $+e$ töltésű atommag (proton) és a $-e$ töltésű elektron kölcsönhatásából származik. Ez, mint tudjuk,

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

ahol $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, az elektron és a mag távolsága. Ezzel az egyenlet az alábbi alakot ölti (a változókat a rövidítés érdekében nem írjuk ki):

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Tekintettel arra, hogy a potenciális energia csak az elektronnak a magtól mért radiális távolságától függ, az egyenlet megoldása várhatóan egyszerűbb lesz, ha átírjuk gömbi polárkoordinátákba (ábra). Az x, y, z koordinátájú pont helyzetét ilyenkor az r, ϑ, φ adatokkal adjuk meg, amelyek a derékszögű koordinátákkal az

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

kapcsolatban állnak.

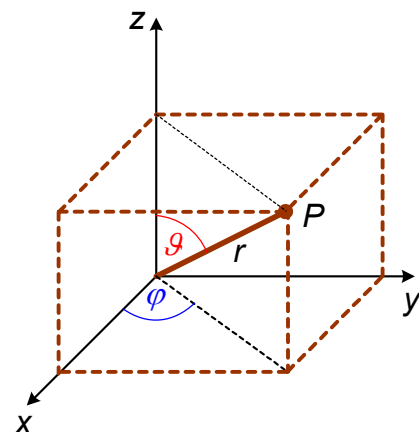
Az átírás nem különösebben nehéz, de hosszadalmas, ezért a számolást mellőzzük, és rögtön a végeredményt, a polárkoordinátákba írt Schrödinger-egyenletet írjuk fel:

$$\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2mr^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Az egyenlet megoldását a változók szétválasztásának módszerével kísérhetjük meg. Írjuk fel a megoldást három egyváltozós függvény (R , Θ és Φ) szorzataként

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

Behelyettesítve ezt a kifejezést a megoldandó egyenletbe, és bevezetve a K_1 és K_2 konstansokat, az egyenlet három egyváltozós, egymástól független differenciálegyenletre esik szét:



$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = K_1 \quad (*)$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = K_2 \quad (**)$$

$$\frac{K_1}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) = K_2 \quad (***)$$

A (*) egyenlet formailag azonos az állóhullám-egyenlettel, aminek megoldása

$$\Phi(\varphi) = A \sin(\sqrt{K_1} \varphi + \alpha)$$

(A és α konstansok).

Mint ahogy fizikailag csak egyértékű hullámfüggvény fogadható el (a megtalálási valószínűség ugyanazon a helyen csak egyféle lehet), a periodikus megoldás-függvényre fenn kell állni a

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$$

feltételnek. Ez a feltétel csak akkor teljesül, ha a $\sqrt{K_1}$ konstans egész szám. Vezessük be a

$$\sqrt{K_1} = m_\ell$$

jelölést, ekkor a Φ függvényre azt kapjuk, hogy

$$\Phi(\varphi) = A \sin(m_\ell \varphi + \alpha) \quad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

A (*) egyenlet megoldása során tehát be kellett vezetni egy egész értékeket felvevő m_ℓ paramétert, kvantumszámot, amelyet később részletezendő okból *mágneses kvantumszámnak* neveznek.

A (**) egyenlet megoldása már nem ilyen egyszerű, ezért a számítást nem is részletezzük. A megoldás során kiderül, hogy fizikailag elfogadható $R(r)$ megoldásfüggvényt csak akkor kapunk, ha az egyenletben szereplő E energia az

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

értékek valamelyikét veszi fel, ahol n pozitív egész szám. Ezt a számot, amely tehát az elektron lehetséges energiáit szabja meg, *főkvantumszámnak* nevezik.

Végül a (***) egyenletet megoldva kiderül, hogy a K_2 konstans egy pozitív egész számú értékeket felvevő számmal fejezhető ki. Ha ezt a számot ℓ -l jelöljük, akkor a fizikailag elfogadható $\Theta(\vartheta)$ megoldás feltétele

$$K_2 = \ell(\ell + 1) \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Az így kapott ℓ kvantumszámot *mellékvantumszámnak* nevezik.

A Schrödinger-egyenlet megoldása tehát ezektől az egész számoktól függ: minden lehetséges kvantumszám-készlethez tartozik egy hullámfüggvény.

A számítások eredménye az, hogy az elektron állapotát meghatározó hullámfüggvény három – csak egész számú értékeket felvevő – kvantumszámot tartalmaz, amelyeket *fő-, mellék- és mágneses kvantumszámnak* neveznek és rendszerint az n , ℓ és m_ℓ betűkkel jelölik. A hullámfüggvényben ezt a tényt a kvantumszámok feltüntetésével jelzik: $\psi = \psi_{n,\ell,m_\ell}$

A számításokból az is kiderül, hogy fizikailag értelmes megoldás csak akkor kapható, ha a fenti kvantumszámok között bizonyos összefüggések állnak fenn. Így ℓ értéke nem lehet nagyobb, mint $n-1$, $|m_\ell|$ pedig maximum ℓ -l lehet egyenlő. Ennek megfelelően a kvantumszámok lehetséges értékei:

főkvantumszám: $n = 1, 2, 3, \dots$

mellékvantumszám: $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$

mágneses kvantumszám: $m_\ell = -\ell, -(\ell-1), \dots, -1, 0, +1, \dots, +(\ell-1), +\ell$.

A kvantumszámok fizikai jelentése

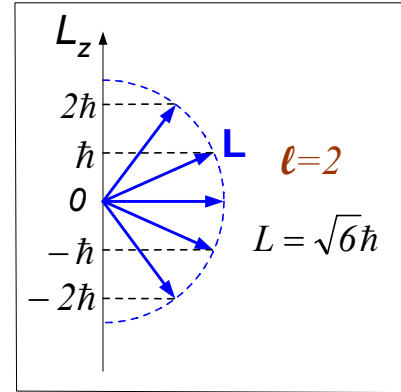
A kvantumszámok – matematikai szerepük mellett – fizikai jelentéssel is rendelkeznek. A részletes számítások szerint a főkvantumszám az *energia* (E) értékét-, a mellékkvantumszám az elektron mag körüli mozgásával összefüggő *impulzusmomentum nagyságát* (L)-, a mágneses kvantumszám pedig az *impulzusmomentum-vektornak* valamilyen kitüntetett irányhoz viszonyított *beállási irányát* határozza meg (ha a kitüntetett irány a z -tengely iránya, akkor pl. az impulzusmomentum-vektor L_z -komponensét (ábra)).

A számítások eredményeként kapott összefüggések a következők:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$$

$$L_z = m_\ell\hbar.$$



Mivel a kvantumszámok csak egész értékeket vehetnek fel, az energia-, az impulzusmomentum nagysága- és beállási irányának szöge is csak diszkrét értékeket vehet fel, azaz *kvantált*.

A mágneses kvantumszám elnevezés onnan származik, hogy az impulzusmomentummal együtt jár egy mágneses dipólmomentum is, amely szintén arányos az m_ℓ számmal. Ha az atom mágneses térben van, akkor az elektron energiája emiatt egy az m_ℓ -lel arányos járulékkal megváltozik.

Az impulzusmomentum, amely a hidrogén atom fenti tárgyalásában szerepel, az elektronnak a mag körüli mozgásából származó ún. *pályamomentum*. Kiderült (Stern-Gerlach-kísérlet, Zeeman-effektus, Einstein–De Haas-kísérlet), hogy az elektronnak ezen kívül van egy *saját impulzusmomentuma* ún. *spinje* is, amely a Schrödinger-egyenletből nem származtatható. Ez az elektron belső mozgásaiból (durva hasonlattal élve, az elektron saját tengelye körüli forgásból) származik. A saját impulzusmomentum vektorának nagysága

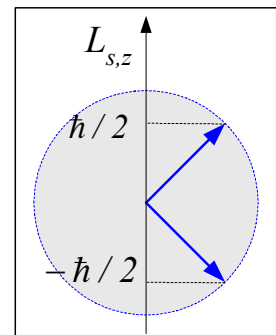
$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)},$$

ahol $s = \frac{1}{2}$, és a vektor a külső térhez viszonyítva kétféleképpen állhat be (ábra). A vektornak a tér irányára (pl. a z tengely iránya) vett vetületét az

$$L_{sz} = m_s\hbar$$

összefüggés adja meg, ahol $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$.

Az új kvantumszám az m_s *spinkvantumszám*, amelynek lehetséges értékei: $m_s = \pm \frac{1}{2}$.



Az atomi elektron *állapotát* a fenti *négy kvantumszám* határozza meg, a kvantumszámokhoz tartozó hullámfüggvényből pedig kiszámítható, hogy az atommag környezetében az elektron adott helyen milyen valószínűséggel található (az egységnyi térfogatban való megtalálás valószínűsége: $|\psi|^2$).

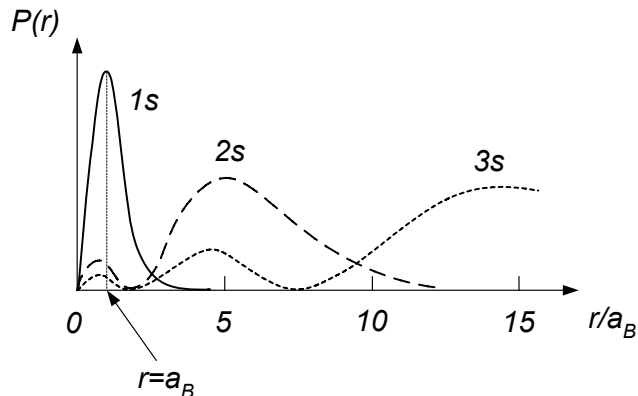
Az elektron állapotának jellemzésénél történelmi- illetve célszerűségi okokból különböző szakkifejezéseket alkalmaznak. Az állapot jellemzésére a leggyakrabban

használt adat az energia és az impulzusmomentum nagysága, amiket az n és l értékei egyértelműen megadnak. A spektroszkópiában szokásos jelölés szerint azonban az impulzusmomentum nagyságát gyakran nem számokkal, hanem az egyes számokhoz rendelt betűjelekkel adják meg: az $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ értékekhez rendre az $s, p, d, f, \dots$ betűket rendelik hozzá. Így pl. az $n=1, \ell=0$ kvantumszámoknak megfelelő állapot az $1s$ állapot, az $n=2, \ell=1$ kvantumszámoknak megfelelő állapot a $2p$ állapot, stb. Konkrét atom esetén a jelölést gyakran kiegészítik azzal, hogy megadják az adott állapotban lévő elektronok számát is. Ha pl. az $1s$ állapotban két elektron van az adott atomban, akkor ennek jelölésére az $1s^2$ szimbólumot használják. Adott atom elektronjainak a lehetséges állapotokban történő „elhelyezkedését” az atom elektronkonfigurációjának nevezik; például a 3 elektront tartalmazó Li esetén ez az alábbi szimbólummal adható meg: $1s^2 2s^1$.

Az egyes n értékekhez tartozó állapotok összességét *héjnak* nevezik, és a héjak jelölésére is gyakran betűket használnak: az $n=1, 2, 3, \dots$ értékeknek megfelelő héjak neve rendre $K-, L-, M-, N-, \dots$ *héj*. Ehhez kapcsolódóan az egyes n, ℓ értékpároknak megfelelő állapotok összességét gyakran *alhéjnak* nevezik. Az $n=2$ -nek megfelelő K héj például két alhéjból áll: az $\ell=0$ értékeknek megfelelő $2s$ és az $\ell=1$ értéknek megfelelő $2p$ alhéjból.

A hullámfüggvényből kiszámítható az elektron tartózkodási valószínűsége a maghoz viszonyított hely függvényében. A számítások szerint az elektron előfordulási valószínűsége az összes s -állapotban ($\ell=0$) független az iránytól (az eloszlásfüggvény gömbszimmetrikus), azaz a magtól adott távolságban az elektron minden irányban ugyanolyan valószínűséggel fordul elő. Az $\ell > 0$ állapotokban az előfordulási valószínűség irányfüggése ℓ növekedésével egyre bonyolultabbá válik, az elektron különböző irányokban más és más valószínűséggel található.

Az elektron megtalálási valószínűsége a mag körül szemléletes ábrákon is megjeleníthető. Az alábbi sematikus ábrán látható például az, hogy a hidrogén atom $1s, 2s$ és $3s$ állapotban lévő elektronjának megtalálási valószínűsége hogyan változik a magtól mért távolság függvényében. Mivel a megtalálási valószínűség függ attól, hogy mekkora távolságintervallumra vonatkozik, az ábrán feltüntetett $P(r)$ az egységnyi távolságintervallumban való megtalálás valószínűségét jelenti. A magtól mért távolságot az a_B Bohr-sugár többszöröseként adjuk meg (a Bohr-sugár a Bohr-modellben az alapállapotban lévő elektron „pályasugara”).



Korábban láttuk, hogy a Schrödinger-egyenlet megoldása a H -atom esetén az elektron lehetséges energiáira az

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

értékeket adja, amelyek pontosan megegyeznek a Bohr-modellből kapott értékekkel. Ennek az energia-kifejezésnek a helyességét számos kísérlet igazolja.

Az elektron tartózkodási valószínűségének helyfüggését megadó összefüggésből az is kiderül, hogy az $1s$ állapotban az elektron a magtól a Bohr által megadott a_B

távolságban található legnagyobb valószínűséggel (ez látható a fenti ábrán is). Ez az eredmény a Bohr-modellt bizonyos értelemben igazolja, más értelemben cáfolja: igaz, hogy az elektron legtöbbször a magtól a Bohr-sugárnak megfelelő távolságban található, de megtalálható másutt is, szemben a Bohr-modellben szereplő határozott pályasugárral.

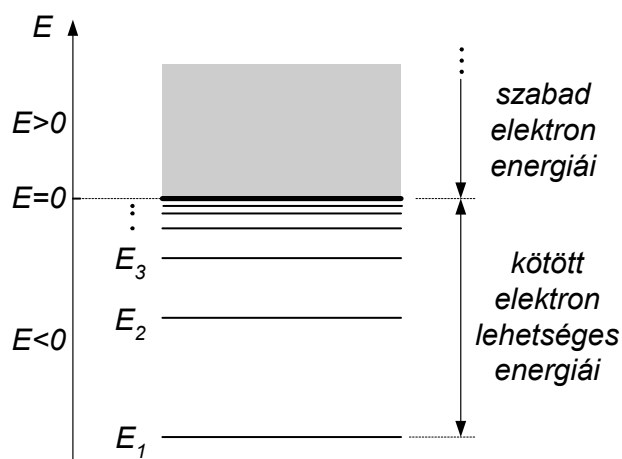
Annak ellenére, hogy a Bohr-modell a H atom esetén néhány vonatkozásban helyes eredményekre vezet, mégsem adja meg az elektron viselkedésének helyes leírását. A valóságban az atomi elektron nem pontszerű részecske, nincsenek meghatározott elektronpályák, az elektron viselkedésére vonatkozóan csak valószínűségi kijelentések tehetők.

Pauli-elv¹, az atomok elektronszerkezete, energiasávok szilárd anyagokban

Láttuk, hogy az atomi elektront 4 kvantumszám (n , ℓ , m_ℓ , m_s) jellemzi, amelyek csak diszkrét értékeket vehetnek fel. Fizikailag ez azt jelenti, hogy az elektron energiája (jellemzője n), pálya impulzusmomentumának nagysága (jellemzője ℓ), a pálya impulzusmomentum-vektor iránya (jellemzője m_ℓ), és a spinmomentum iránya (jellemzője m_s) nem lehet tetszőleges.

Az elektronállapot fontos jellemzője az energia. Egy atomi elektron lehetséges energiáinak sorozatát sematikusan az ábra mutatja. A szabad állapotban az elektron energiája pozitív és folytonosan változhat, a kötött állapotban az elektron energiája negatív és csak diszkrét értékeket vehet fel. Az elektronnak az atomból történő eltávolításához a 0 szint- és az elektron energiaszintjének különbségével egyenlő munka szükséges: ez az *ionizációs energia* (az elektront elvesztett atomot ionnak nevezik).

A kötött állapotban az energia az elektron állapotának csak egyik jellemzője, az egyes energiaszinteken – a többi állapotjellemző értékeitől függően – különböző állapotú elektronok lehetnek.



A Pauli-elv

Első pillantásra úgy tűnhet, hogy egy több elektront tartalmazó atomban egyensúly esetén az összes elektronnak a legalacsonyabb energiájú állapotban kellene lenni. Ez azonban a tapasztalat szerint nem így van. Ezt a tapasztalati tényt fejezi ki a *Pauli-elv*, amely szerint *egy atomi rendszeren belül csak különböző állapotú elektronok lehetnek*, vagyis csak olyanok, amelyeknek legalább egy kvantumszáma eltér a többiétől.

Mivel adott n (adott energia) esetén a három másik állapotjellemző csak véges számú különböző értéket vehet fel, *adott energiaszinten csak meghatározott számú elektronállapot ("hely") van*. Ennek az a következménye, hogy a több elektront tartalmazó atomokban az elektronok nem lehetnek mind a legalacsonyabb energiájú állapotban, hanem a rendszám növekedésével az elektronok fokozatosan "feltöltik" a magasabb energiájú állapotokat.

¹ Wolfgang PAULI (1900-1958), Nobel-díjas (1929) osztrák-svájci fizikus.

A kvantumszámokra vonatkozó szabályok figyelembe vételével kiszámítható, hogy adott alhéjon illetve héjon hány különböző elektronállapot van. Az n, ℓ alhéjon az m_ℓ kvantumszám $2\ell + 1$ számú lehetséges értékének mindegyikéhez kétféle spinbeállítás (az m_s kvantumszám kétféle értéke) tartozik, így az összes lehetséges állapotok száma $2(2\ell + 1)$. Az is könnyen belátható, hogy az n héjhoz (az ℓ kvantumszám $n-1$ számú lehetséges értékének megfelelően) $2n^2$ számú különböző állapot tartozik. Ennek megfelelően az s alhéjakon 2-, a p alhéjakon 6-, a d alhéjakon 10 „elektron-hely” van, a K héjon összesen 2-, az L héjon 8-, az M héjon 18 elektron foglalhat helyet (táblázat).

n	ℓ	m_ℓ	m_s	állapotok száma
1	0	0	+1/2, -1/2	2
2	0	0	+1/2, -1/2	2
	1	-1	+1/2, -1/2	2
		0	+1/2, -1/2	2
		1	+1/2, -1/2	2
3	0	0	+1/2, -1/2	2
	1	-1	+1/2, -1/2	2
		0	+1/2, -1/2	2
		1	+1/2, -1/2	2
	2	-2	+1/2, -1/2	2
		-1	+1/2, -1/2	2
		0	+1/2, -1/2	2
		1	+1/2, -1/2	2
		2	+1/2, -1/2	2

Az elektronszerkezet kialakulásának ez a törvényszerűsége igen fontos dolog: ez az oka annak, hogy a különböző elektronszámú (rendszámú) atomok kémiaiag eltérően viselkednek. A számítások szerint (kvalitatívan a Bohr-moddal egyezően) a legmagasabb energiaszinten lévő elektronok vannak legtávolabb a magtól, vagyis ezek az atom legkülső elektronjai. Az atomok kölcsönhatása elsősorban az egymással közvetlen kapcsolatba kerülő külső elektronok révén valósul meg, vagyis az atomok kémiai viselkedését a legmagasabb energiájú, külső elektronok szabják meg. Mivel a Pauli-elvnek megfelelően a különböző elektronszámú atomok külső alhéjai különböznek egymástól, az atomok kémiai sajátosságai is eltérőek¹.

Az atomok elektronszerkezete

Tudjuk, hogy az elemek a kémiai tulajdonságaik alapján speciális táblázatba (Periódusos rendszer) foglalhatók, amelynek oszlopaiban hasonló tulajdonságú elemek foglalnak helyet. Annak érzékeltetésére, hogy az atomok elektronszerkezete milyen

¹ Az atomok kémiai kölcsönhatása szintén leírható a Schrödinger-egyenlet segítségével. Ilyenkor a kölcsönható atomok összes kölcsönhatásából származó helyzeti energiát kell az egyenletbe beírni, és az egyenlet megoldása után választ kapunk arra a kérdésre, hogy a két atom alkot-e kötött rendszert (vegyületet) vagy nem, ha alkot akkor az atomok elektronjai milyen állapotokba kerülnek.

szerepet játszik ebben törvényszerűségben, az alábbi táblázatban bemutatjuk a $Z=19$ -nél kisebb rendszámú (elektronszámú) elemek elektronkonfigurációit.

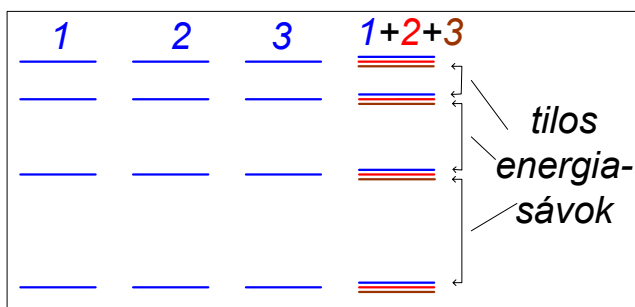
K héj ($n=1$)			L héj ($n=2$)			M héj ($n=3$)		
rend- szám	elem jele	elektron- konfiguráció	rend- szám	elem jele	elektron- konfiguráció	rend- szám	elem jele	elektron- konfiguráció
1	H	$1s^1$	3	Li	$1s^2 2s^1$	11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
			4	Be	$1s^2 2s^2$	12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
			5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
			6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
			7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
			8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
			9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
2	He	$1s^2$	10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Látható, hogy a Periódusos rendszer oszlopainak a táblázat vízszintes sorai felelnek meg, és az is megállapítható, hogy az egy sorban (tehát a Periódusos rendszer megfelelő oszlopában) található elemek azonos típusú külső alhéján azonos számú elektron van: a külső alhéj típusa és betöltöttsége azonos (ez alól az utolsó sor kivétel). Az utolsó sorban (a Periódusos rendszer utolsó oszlopában) a kémiai igen stabil nemes gázok (*He*, *Ne*, *Ar*) vannak, amelyeknél egy külső alhéj éppen betöltődik (s^2 vagy p^6). Az ilyen elektronkonfigurációk a tapasztalat és az elméleti számítások szerint is energetikailag kedvezőek.

A 18-nál nagyobb rendszámú elemeknél az elektronállapotok betöltődésének rendje több esetben eltér a fenti sémától), a periódusok és elektronkonfigurációk fenti összefüggése azonban továbbra is érvényes. (Pl. a $Z=19$ rendszámú káliumban a 19-edik elektron nem a $3d$ - alhéjra, hanem a $4s$ alhéjra kerül, de a $4s^1$ külső alhéjnak megfelelően a táblázatunk első sorában, tehát a Periódusos rendszer első oszlopában foglal helyet, összhangban a *Li*-hoz, és *Na*-hoz hasonló kémiai tulajdonságaival.

Energiasávok szilárd anyagokban

Több, azonos atomot rendezett szilárd testté egyesítve, az új rendszerbe azonos állapotú elektronok kerülnének (annyi, ahány atomból a rendszert létrehoztuk). Ez a Pauli-elv szerint nem lehetséges, ezért az eredetileg azonos állapotú elektronok mindegyike egy kicsit eltérő energiaszintre kerül, az atomi energiaszintek felhasadnak (ábra).



Makroszkopikus méretű testben ez nagyságrendben 10^{23} számú alszintet jelent. A felhasadás mértéke kicsi: az alszintek energiakülönbsége 10^{-42} J nagyságrendű, ami az

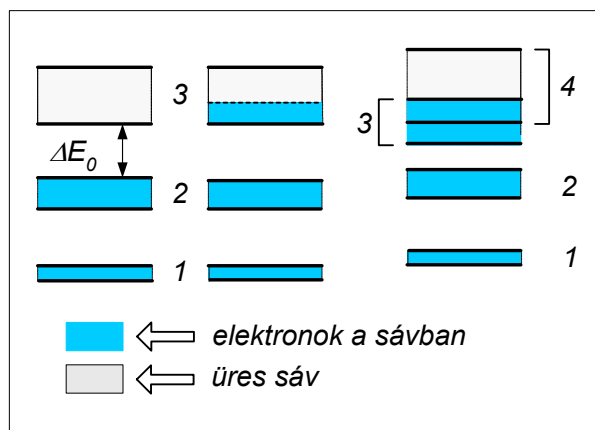
elektronok számára gyakorlatilag *szabad mozgást tesz lehetővé az alszintek között* (a hőmozgás átlagos energiája szobahőmérsékleten kb. 10^{-21} J).

A kvantumelmélet segítségével kristályos anyagokban a sávokat és az elektronok viselkedését elméletileg számítani lehet. Elméletileg kimutatható, és kísérletekkel igazolható, hogy a sávok szélességét és egymáshoz viszonyított helyzetét az atomok közötti kölcsönhatás, a sávok betöltöttségét pedig az atomi energiaszintek betöltöttsége határozza meg. A három lehetséges elrendeződés a következő (ábra):

- a kialakult sávok egymást nem fedik át, és csak betöltött és üres sávok vannak (ábra: baloldali sávok).
- a kialakult sávok egymást nem fedik át, és a legfelső - elektronokat tartalmazó - sáv részben betöltött (ábra: középső sávok)
- az eredetileg a baloldali sémának megfelelő sávrendszerben a legfelső, üres és az alatta lévő betöltött sáv átfedi egymást (ábra: jobboldali sávok), ilyenkor az elektronok a legalacsonyabb energiájú helyeket foglalják el, ezért lényegében a középső ábra szerinti sávszerkezet jön létre.

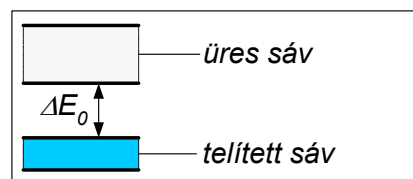
A lehetséges energiaértékeket tartalmazó sávok közötti energiatartományok az elektronok számára nem megengedettek, ezeket a sávokat *tilos sávoknak* nevezik, szélességét gyakran a ΔE_0 szimbólummal jelölik.

Külső elektromos tér hatására a két alaptípusba sorolható anyagok elektronjai eltérő módon viselkednek, ami alapvetően meghatározza elektromos tulajdonságaikat. Ennek megfelelően az anyagok az alábbi csoportokba oszthatók.



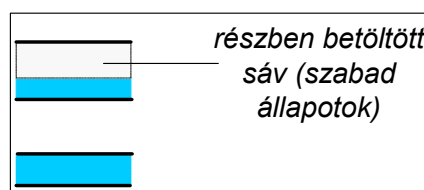
Szigetelők

Ha a legfelső, elektront tartalmazó sáv teljesen betöltött, akkor az elektronok a sávon belül nem változtathatják az energiájukat, így külső tér általában nem képes mozgásba hozni azokat. Ahhoz, hogy az ilyen anyagokban elektromos áram jöjjön létre, a legfelső betöltött- és üres sáv közötti *tilos sáv szélességének* (ΔE_0) megfelelő energiát kell az elektronnal közölni. Erre a szokásos elektromos terek általában nem képesek, így az ilyen anyagok vezetőképessége igen kicsi, ezek az anyagok a *szigetelők* (ábra fent).



Vezetők

Ha a legfelső sáv részben betöltött, akkor az elektronok ebben a sávban gyakorlatilag folytonosan növelhetik az energiájukat, így külső térrel mozgásba hozhatók. Az ilyen anyagok elektromos vezetőképessége nagy, ezek a *vezetők* (ábra). A legfelső, részben betöltött sávot *vezetési sávnak* nevezik.

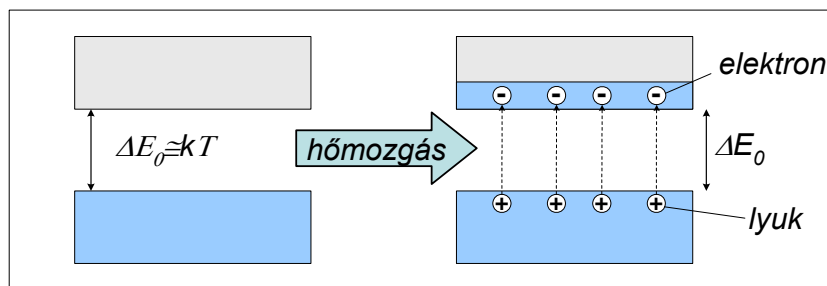
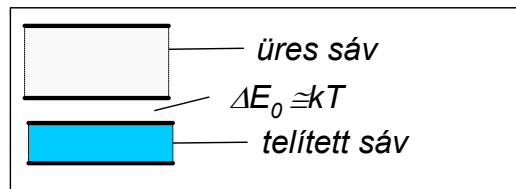


Félvezetők

Ha egy szigetelő hőmérsékletét emeljük, akkor a hőmozgás átlagos energiája nő. Így egyre nő annak a valószínűsége is, hogy egy szigetelőben a hőmozgás hatására elektronok jutnak az eredetileg üres sávba, vagyis felgyorsítható töltéshordozók keletkeznek.

Szobahőmérsékleten számos szigetelő-sávszerkezetű anyagnak jelentős vezetőképessége van, mert a hőmozgás az említett módon töltéshordozókat hoz létre. Az ilyen anyagokat *félvezetőknek* (ábra) nevezik.

Az elektronnak az eredetileg üres sávba való átmenete egyszerre két töltéshordozót hoz létre (ábra): megjelenik egy elektron a vezetési sávban, és keletkezik egy üres hely a betöltött sávban (amit *vegyérték-sávnak* neveznek). A keletkezett üres helyek lehetővé teszik az elektronmozgást a vegyérték-sávban is, ami formálisan úgy is



leírható, hogy a pozitív töltésű elektron-hiányok, az ún. *lyukak* viselkednek töltéshordozóként. A termikus gerjesztés tehát *elektron-lyuk párokat* hoz létre.

Mivel a töltéshordozókat a hőmozgás kelti, várható, hogy a félvezetők vezetőképessége (illetve fajlagos ellenállása) erősen hőmérsékletfüggő.

A félvezetők vezetési tulajdonságai szennyezéssel is jelentősen befolyásolhatók. Ez teszi lehetővé – többek között – a tranzistorok működését.

A röntgensugárzás

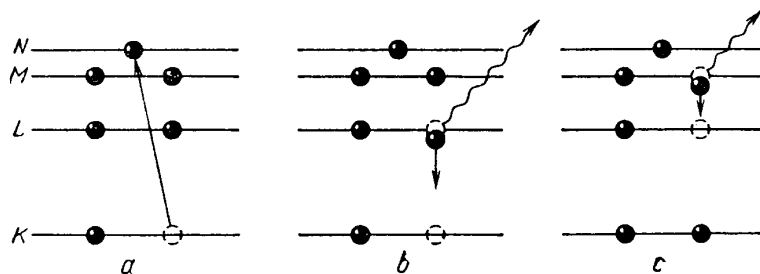
Tudjuk, hogy a különböző körülmények között létrejövő, gyakorlati szempontból fontos elektromágneses hullámok (elektromágneses sugárzás) hullámhosszai egy igen széles – mintegy 18 nagyságrendet felölelő – tartományba esnek. Ez az ún. elektromágneses spektrum, amelynek különböző sávjai jól ismert neveket viselnek: rádióhullám, infravörös-, látható-, ultraibolya fény stb. Az elektromágneses spektrumnak az ultraibolya sugárzás és a gammasugárzás közé, nagyjából a 10^{-8} - 10^{-11} m hullámhossz-tartományba eső részét felfedezőjéről W. K. Röntgenről¹ *röntgensugárzásnak* nevezik. A röntgensugárzás fotonjainak energiája mintegy 10^2 - 10^4 -szerese az optikai fotonok energiájának.

Ilyen sugárzás többféle mechanizmussal létrejöhet: keletkezhet töltött részecskék gyorsulásakor, továbbá az elektronhéjban- illetve az atommagban végbemenő átalakulások során. Röntgensugárzásnak azonban elsősorban az első két mechanizmussal keletkezett sugárzást nevezik, az atommag-átalakulásnál létrejövő, ilyen hullámhosszú sugárzást rendszerint (lágy) gamma sugárzásnak nevezik. Az alábbiakban az első két mechanizmussal foglalkozunk.

Karakterisztikus röntgensugárzás

Az elektronhéjban végbemenő folyamatok során nagyon különböző energiaváltozások következhetnek be. Ez az oka annak, hogy az atomok elektronhéja által kisugárzott elektromágneses hullámok hullámhossza igen eltérő, durván a 10^{-6} - 10^{-11} m tartományba esik. Ennek hosszuhullámú része az infravörös sugárzás, ennél rövidebb hullámhosszú, keskeny hullámhosszsávot alkot a látható fény, ezt követi a rövidebb hullámhosszak felé az ultraibolya sugárzás. Az elektronhéj azonban ennél rövidebb hullámhosszú sugárzást, vagyis röntgensugárzást is kibocsáthat. Mivel ilyenkor a sugárzás az adott atomra jellemző energiaszintek közötti átmenetekből származik (hasonlóan a fénykibocsátáshoz), a röntgensugárzás jellemző az illető elemre, ezért ezt *karakterisztikus röntgensugárzásnak* nevezik.

Karakterisztikus röntgensugárzás úgy hozható létre, hogy valamilyen energiaforrással (pl. nagysebességű elektron, foton) egy elektront (pl. gerjesztéssel) eltávolítunk az atom belső (alacsony energiájú) héjainak egyikéről, és a keletkezett "üres helyre" a magasabb szintek egyikéről egy elektron megy át. Ekkor az elektron felesleges energiáját röntgenfoton formájában adja le (azt hogy egy átmenetnél milyen energiájú



foton keletkezik, az átmenet energiakülönbsége szabja meg, de a belső héjakra való átmenetnél általában röntgen-foton keletkezik. A folyamat sémája az ábrán látható (az energiaszintek jelölésére itt nem az n főkvantumszám értékét adják meg, hanem az

¹ Wilhelm Konrad RÖNTGEN (1845-1923) Nobel díjas (1901) német fizikus

$n=1, 2, 3, 4, \dots$ értékek helyett rendre a $K, L, M, N, \dots$ betűjelöléseket alkalmazzák). Az $a)$ ábra a gerjesztést, a $b)$ és $c)$ ábra két egymás utáni fotonkibocsátást mutat.

Megállapodás szerint azt a röntgensugárzást ami az elektronnak a K, L, M héjra történő átmenetéből származik, K -, L -, M -sugárzásnak nevezik. Ezen belül további felosztást is alkalmaznak: így például az $L \Rightarrow K$ átmenetből származó sugárzás a K_α -sugárzás, az $M \Rightarrow K$ átmenetből származó sugárzás a K_β -sugárzás (ábra).

Mivel a röntgensugárzás az elektronnak egy belső héjra történő átmeneténél keletkezik, a sugárzást a külső elektronok jelenléte nem nagyon befolyásolja, hanem elsősorban a mag töltése, vagyis a rendszám. A mag töltését leárnyékolják a kérdéses héjon és azon belül lévő elektronok, amit egy ún. leárnyékolási tényezővel lehet figyelembe venni.

Részletesebb számítások szerint, az n -edik energiaszinten lévő elektron energiáját közelítőleg az

$$E_n = -A(Z - \sigma_n)^2 \frac{1}{n^2}$$

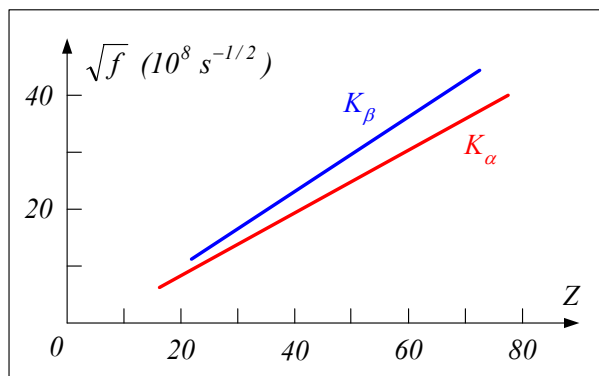
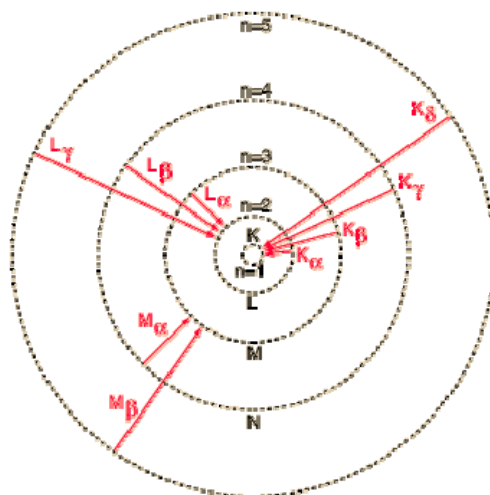
kifejezés adja meg, ahol Z a vizsgált atom rendszáma, A egy fizikai állandókat tartalmazó állandó, σ_n a leárnyékolási tényező, ami K -héjra $\sigma_n = 1$, L -héjra $\sigma_n = 8$. Egy átmenetnél keletkező foton energiája eszerint

$$hf = A(Z - \sigma_1)^2 \frac{1}{n_1^2} - A(Z - \sigma_2)^2 \frac{1}{n_2^2}.$$

A tapasztalat szerint ez a kifejezés az átmenetre bevezetett σ leárnyékolási tényező segítségével az alábbi módon közelíthető:

$$hf = A(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Vagyis adott atomban keletkező röntgen-foton energiája – nem túl kis rendszám esetén – közelítőleg arányos a rendszám négyzetével. Ez azt jelenti, hogy különböző atomoknak ugyanolyan átmenetéből (pl. K_α) keletkező röntgensugárzás frekvenciájának gyöke ($\sqrt{f}$) arányos a rendszámmal; 2 ábra). Ez az ún. Moseley-törvény, amelyet Moseley még az atom szerkezetének megismerése előtt kísérletileg állapított meg. A lineáris függést megadó görbe segítségével ismert sugárzási frekvencia alapján meg lehet állapítani az atom rendszámát. Ezt felhasználva állapították meg pl. egyes atomok pontos helyét a periódusos rendszerben, mivel akkor még az atommagról és annak töltéséről semmit sem lehetett tudni.



A fékezési sugárzás, a röntgenső működése

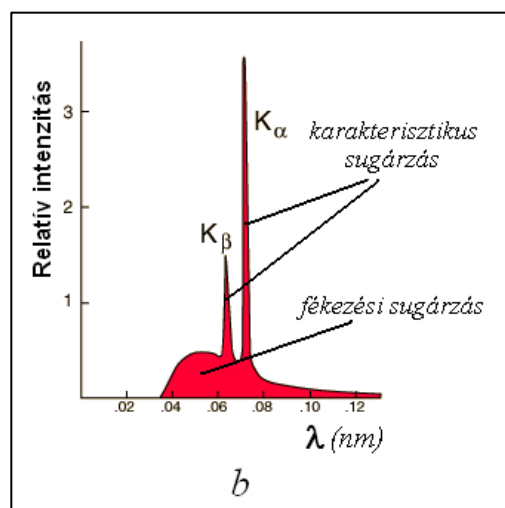
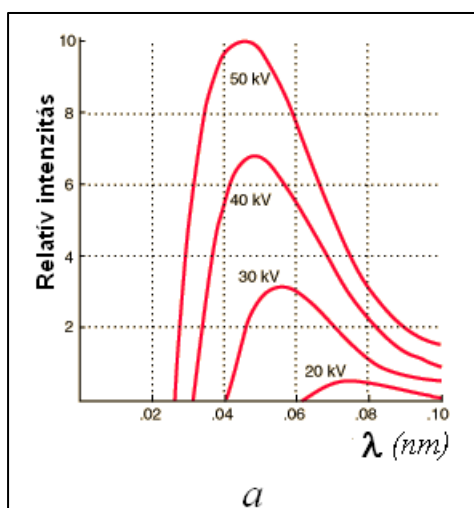
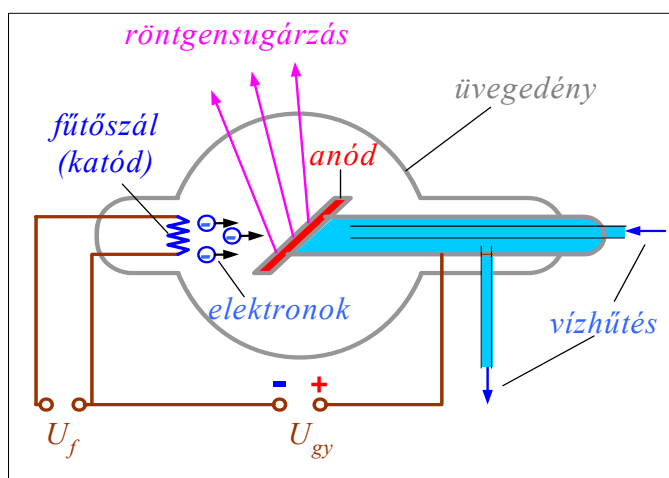
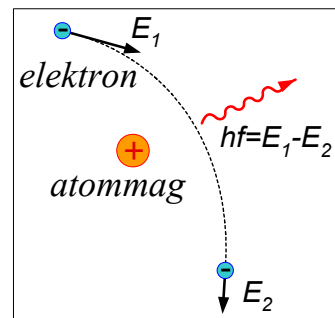
Elektromágneses sugárzás nem csak atomi átmenetek segítségével hozható létre, hanem töltés gyorsításával is, hiszen minden gyorsuló töltés sugároz (pl. egy rádióadó antennájában a rezgő töltések keltik a sugárzást). Ha a gyorsulás elég nagy, akkor a röntgentartományba eső sugárzás is létrehozható.

Ezen az elven működnek a szokásos röntgenforrások, az ún. *röntgensővek*. Ezekben felgyorsított elektronokat egy fémtömbbe való ütközéssel lefékezik (így érhető el igen nagy gyorsulás), és eközben az elektronok sugároznak. Az így létrejött sugárzást *fékezési sugárzásnak* nevezik.

A röntgenső lényegében egy vákuumedény (10^{-5} - 10^{-7} torr) amelynek vázlata az ábrán látható. Az U_f feszültséggel

felizzított fűtőszálból elektronok lépnek ki, amelyeket az U_{gy} gyorsító feszültség felgyorsít. Az elektronok az anóddal (fémtömb) ütközve lefékeződnek, és röntgensugárzást (fékezési sugárzás) bocsátanak ki. A fékezés során leadott energiának csak egy töredéke alakul át röntgensugárzássá, az energia zöme az anódot felmelegíti, ezért a rendszert állandóan hűteni kell.

A fékezési sugárzás intenzitásának frekvencia szerinti eloszlása (a röntgenspektrum) folytonos, amit az alábbi ábra *a* része mutat (wolfram anód) különböző gyorsító feszültségek esetén. Látható, hogy adott gyorsító feszültség (elektron-energia) estén van egy minimális hullámhossz, ami alatt nincs sugárzás. Ez a fotonkép alapján érthető meg: a fékeződés során kibocsátott foton energiája legfeljebb az elektron mozgási energiájával lehet egyenlő (amit viszont a gyorsító feszültség határoz meg).



Ennek megfelelően

$$hf \leq eU_{gy}$$

$$\lambda \geq \frac{hc}{eU_{gy}},$$

ahol e az elemi töltés.

Az elektronnyaláb természetesen képes elektronokat gerjeszteni a fékező fématomok belső héjairól, így a fékezési sugárzás mellett általában a fékező fémre jellemző karakterisztikus röntgensugárzás is megjelenik. A b ábra egy ilyen összetett röntgenspektrumot mutat, ahol a csúcsok az anód (itt molibdén) karakterisztikus sugárzásának felelnek meg.

Röntgensugárzás és anyag kölcsönhatása, röntgensugárzás detektálása

A kölcsönhatás fő típusai:

- Fotoeffektus (a röntgensugárzás fotonjai elektront ütnek ki az anyag atomjaiból, és így a bombázott anyagra jellemző röntgensugárzás jön létre). Ennek a esete, hogy a keletkező röntgen-foton is kiüt egy elektront (ez az Auger-effektus). A fotoeffektus eredménye tehát: elektronkilépés (ionizáció) és röntgensugárzás (Auger-effektusnál két elektron kilépése és kétszeres ionizáció).
- Compton-effektus (a röntgensugárzás az atom elektronját meglöki, energiát veszít, és nagyobb hullámhosszú sugárzásként halad tovább).
- Koherens szórás (nincs energiaváltozás).

A kölcsönhatás során a sugárzás részben elnyelődik (fotoeffektus) részben szóródik, tehát adott irányú nyaláb intenzitása mindkét esetben csökken. Az intenzitáscsökkenésre érvényes, hogy igen vékony, dx vastagságú anyagon való áthaladás közben a dI intenzitáscsökkenés arányos a beérkező intenzitással és a rétegvastagsággal:

$$dI = -\mu I dx,$$

ahol μ a sugárzástól és az anyagtól függő *sugárgyengítési tényező*. Ebből következik (integrálás), hogy a sugárzás intenzitása az anyagréteg vastagságával exponenciálisan csökken:

$$I(x) = I_0 \exp\{-\mu x\}$$

(I_0 az $x=0$ -hoz tartozó, belépő intenzitás).

A μ tényező az elnyelés és szórás hatását együttesen jellemzi (az összetevőket külön lehet választani, de ezzel nem foglalkozunk), ennek megfelelően meglehetősen bonyolult mennyiség, amely függ például az elnyelő anyag sűrűségétől. Szerencsére ez a függés gyakran lineáris, ezért érdemes bevezetni a $\mu_t = \mu / \rho$ ún. tömeggyengítési tényezőt, amivel a fenti törvény az alábbi alakot ölti:

$$I(x) = I_0 \exp\{-\mu_t \rho x\} = I_0 \exp\{-\mu_t x_t\},$$

ahol $x_t = \rho x$, a kg/m^2 -ben mért "vastagság".

A röntgensugárzás detektálása illetve intenzitásának mérése az anyaggal való kölcsönhatásai alapján történik. A gyakorlatban ilyen célra az ionizáló hatást hasznosítják. Ennek alapján a sugárzás intenzitása ionizációs kamrával mérhető (egy edényben elektródok között elhelyezett gázon átfolyó áram az ionizáció mértékétől, így a röntgensugárzás intenzitásától függ). Ugyanezen a hatáson alapul a Geiger-Müller-számlálóval történő mérés (itt a beérkező röntgen-fotont egy speciális gáztartályban ütközési ionizációval létrejött impulzus jelzi). Ionizáción alapul a speciális fotoemulzióban létrehozott feketedés is, ami szintén alkalmas a sugárzás detektálására.

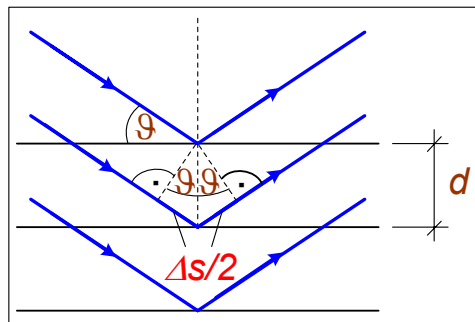
Az intenzitásmérés mellett gyakran felmerül az az igény is, hogy a röntgensugárzás hullámhosszát határozzuk meg, illetve adott hullámhosszú összetevőt kiválasszunk. Mindkét feladat a hullámoknak rácson történő elhajlása alapján oldható meg. Rácsként ebben az esetben egy jó minőségű egykristály kristályrácsa szolgál. Ha a röntgensugárzás egy kristályrácsra esik, akkor a rácssíkokról a sugárzás visszaverődik, és a párhuzamos síkokról visszavert hullámok között útkülönbség jön létre (ábra). A hullámok akkor erősítik egymást, ha a Δs útkülönbségükre fennáll, hogy $\Delta s = n\lambda$ (n egész szám). Az ábra alapján látható, hogy erősítés olyan ϑ irányokban jön létre, amelyre

$$2d \sin \vartheta = n\lambda,$$

(d a párhuzamos rácssíkok távolsága). Ez a Bragg-egyenlet.

Ismerve a síktávolságot és lemérve a maximális intenzitásokhoz tartozó szögeket a sugárzás hullámhossza meg-határozható. Így módunk van ismeretlen sugárzás spektrumának felvételére is (röntgenspektrométer).

Folytonos sugárzásból ugyanezen összefüggés segítségével kiválasztható adott hullámhosszú sugárnyaláb: ismerve a hullámhosszt és a rácstávolságot a kívánt sugárzás iránya (ϑ) meghatározható.



Alkalmazási lehetőségek

A röntgensugárzást a gyakorlatban széles körben alkalmazzák:

- A röntgensugárzás diffrakciójának vizsgálata lehetőséget ad ismeretlen kristályszerkezet vizsgálatára. Ha a kristályra ismert hullámhosszú röntgensugárzást bocsátunk, és megmérjük a maximális intenzitások irányát, akkor a rácssíkok d távolsága meghatározható (Bragg-egyenlet). A rácsszerkezet pontos meghatározása persze nem egyszerű (többféle rácssík-távolság), de számos praktikus és számítógéppel támogatott eljárást dolgoztak ki erre a célra. A diffrakció segítségével vizsgálhatók szennyezések vagy egyéb rácshibák által okozott ráctorzulások is.
- A különböző anyagok eltérő elnyelése alapján átvilágítással árnyékképek is készíthetők (pl. anyagvizsgálat, orvosi röntgenfelvétel).
- A röntgensugárzás elnyelése függ az adott atom elektronátmeneteinek megfelelő energiáktól: az átmenetnek megfelelő energiáknál az elnyelés ugrásszerűen megnő, így az elnyelt intenzitást a frekvencia függvényében mérve, éles csúcsok jelennek meg. Ezekből az elnyelő atom energiaszintjeire következtethetünk.
- Mivel egy atom által kisugárzott karakterisztikus röntgensugárzás frekvenciái, vagyis az atom röntgenspektruma a vizsgált atom rendszámától függ (Moseley-törvény), egy anyagban jelenlévő ismeretlen elem (pl. szennyezés) a benne (pl. elektronnyalábbal történő besugárzással) létrehozott karakterisztikus röntgensugárzás frekvenciájának vizsgálatával meghatározható. Ez az alapelve az ún. röntgen-fluoreszcenciának, amelynek segítségével a szennyező anyagi minősége mellett annak mennyisége is meghatározható.