

Atomfizika

Csanád Máté

2015. szeptember 16.

Tartalomjegyzék

1. Az atomelmélet és az első atommodellek	2
1.1. Kémiai reakciók és az atomelmélet	2
1.2. Az atomelmélet első bizonyítékai, az atomok mérete és tömege	2
1.3. Az elektron felfedezése, a Thomson-modell	5
1.4. A hatáskereszmetszet, szóródás centrális erőterben	6
1.5. Az atommag felfedezése, a Rutherford-modell	8
2. Atomosság makroszkópikus jelenségekben	10
2.1. Brown-mozgás	10
2.2. Sörétzaj	12
2.3. Sűrűségingadozások gázokban	13
2.4. Fényszóródás	13
2.5. Energiaeloszlások gázokban	15
2.6. Feketetest-sugárzás	17
3. Az atomok energiaszintjei	17
3.1. Gázok abszorpciós és emissziós vonalai	17
3.2. Elektron-atom ütközések	18
3.3. A Bohr-modell	20
4. Mikrorészecskék impulzusmomentuma	21
4.1. A Sommerfeld–Wilson-féle kvantálás	21
4.2. Az atomok mágneses momentuma és perdülete	22
4.3. Az elektron sajátperdülete, a spin	24
5. Az elektromágneses sugárzás részecsketermészete	25
5.1. A fotoelektromos jelenség	25
5.2. Az elektromágneses sugárzások kettős természete	27
5.3. A Compton-jelenség	27
5.4. Kísérletek a fény természetének megállapítására	29
6. Anyaghullámok	29
6.1. Elektronok elhajlása	29
6.2. Atom- és molekulanyalábok elhajlása	30
6.3. A hullámfüggvény	32
6.4. Határozatlanság	33
6.5. A kvantummechanika matematikai képe, a Schrödinger-egyenlet	34
7. A hidrogénatom részletes spektruma	35
7.1. A hidrogénatom a Schrödinger-egyenlet alapján	35
7.2. A finomfelhasadás	37
7.3. A hiperfinom felhasadás	39
7.4. A Lamb-féle eltolódás	40
7.5. Többelektronos atomok szerkezete	41

„Általában az alábbi módon keressük az új természeti törvényeket. Első lépésben felteszünk egy elméletet. Aztán megvizsgáljuk a feltételezésünk következményeit, hogy lássuk, mit jelentene, ha az elméletünk igaz lenne. Majd a számítások eredményeit összehasonlítjuk a Természettel, közvetlenül a megfigyelésekkel, kísérlet vagy tapasztalat által, hogy lássuk, működik-e. **Ha ellentmond a kísérleteknek, akkor az elméletünk hibás.**

Ebben az egyszerű állításban van a tudomány kulcsa. Nem számít, milyen szép az elméletünk, nem számít, milyen okosak vagyunk, hogy ki találta ki az elméletet, hogy őt hogy hívják – ha ellentmond a kísérleteknek, akkor hibás.”

Richard P. Feynman

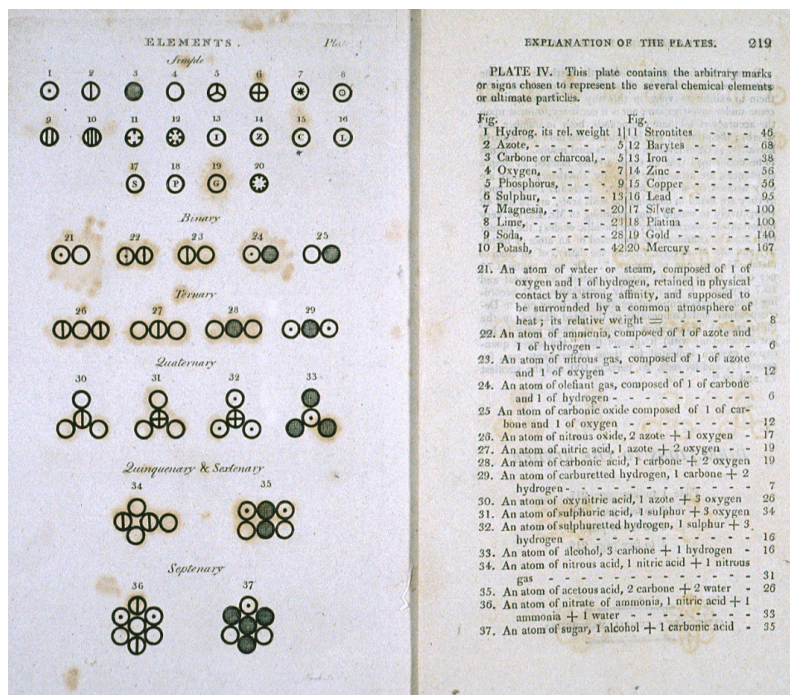
1. Az atomelmélet és az első atommodellek

1.1. Kémiai reakciók és az atomelmélet

- Lavoisier, 1789: **tömegmegmaradás kémiai reakciókban**, a reagensek és a termékek tömege azonos
- Proust, 1799: **állandó arányok törvénye**, vas-oxidban a vas és az oxigén aránya mindig ugyanannyi, és ez igaz mindenféle ónnal, higannyal, ólommal és mindenféle egyéb anyaggal lefolyó kémiai reakcióra.
- Dalton, 1804: **többszörös arányok törvénye**, nitrogén és oxigén keverésekor 1 gramm nitrogénre a végterméktől (N_2O , N_2O_3 , NO , NO_2 , stb.) függően különböző mennyiségű oxigén jut. Az oxigén aránya a különböző végtermékek esetén kis egész számok szerint adódik, 1:2, 2:3, 1:4, stb. A konkrét kísérlet ón-oxiddal (SnO) és ón-dioxiddal (SnO_2) zajlott, és Dalton azt látta, hogy 100 g ónhoz 13,5 g vagy 27 g oxigénre van szükség (illetve ennyire bomlik), azaz az arány 1:2. Egyszerű molekuláknál ez kiválóan működik, bonyolult szénhidrogénekénél (pl. $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ és $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$, itt 121:120 a H aránya) már nem annyira.
- Dalton ez alapján megalkotta az **atom-elméletet** (1. ábra). Szerinte minden kémiai elem egyedülálló és egyedi atomokból áll, amelyeket nem lehet kémiaiag lebontani vagy megváltoztatni. Néhány tévedése volt: nem tudta, hogy létezhet H_2 típusú molekula, illetve azt hitte, bármely két elemből a legegyszerűbb molekula az 1:1 arány képzése során jön létre. A méréseiben is volt jelentős hiba, például az oxigén és a hidrogén tömegarányát 5,5-nek hitte, aztán későbbi mérések alapján 7-nek.
- Avogadro, 1811: **Avogadro törvénye**, azonos térfogatú gázok azonos hőmérsékleten és nyomáson azonos mennyiségű molekulát tartalmaznak (azaz a térfogat nem függ a molekula-tömegtől). Ez alapján ki tudta következtetni a kétatomos, egy elemből álló molekulák természetét. Például két liter hidrogéngáz egy liter oxigéngázzal reagál, és ebből két liter gőz lesz, azaz az oxigénmolekulák felbomlanak. Ez alapján pontosabban meg tudta határozni az atomok tömegét, illetve megkülönböztette az elemeket és a molekulákat.

1.2. Az atomelmélet első bizonyítékai, az atomok mérete és tömege

- Az atomelmélet a 19. század folyamán nem nyert elismerést, pusztán hipotézisnek vették, amelynek nincs köze a valósághoz (Ez ma aktuálisabb, mint valaha: mennyire valósak a mai elemi részecskék, extra dimenziók, kölcsönhatási terek, illetve mennyire csak elméleti konstrukciók, amelyek segítenek leírni a valóságot? Van egyáltalán különbség?)
- A mai értelemben vett atomok létezése még a XIX. század második felében sem egyértelmű. Lord Kelvin 1867-es „Atomi vortexek” című tanulmányában amellet érvel, hogy az atomok valójában az éter (ld. a fénysebesség kutatása és a relativitáselmélet történetében) csomósodásai. Elméletével sokféle jelenséget le tudott írni – a csomók rezgései és kölcsönhatásai jól magyarázták a megfigyeléseket. Az elmélet mögött érdekes matematika is húzódott (amelyben Peter Trait segített Lord Kelvinnek), amelyet csak eztán tártak fel: a csomók elmélete ma is aktívan kutatott matematikai tudományterület. Ez a történet kiváló példa arra, amikor



1. ábra. A Dalton-féle atomelmélet, amely néhány molekulát helyesen, másokat hibásan épít fel.

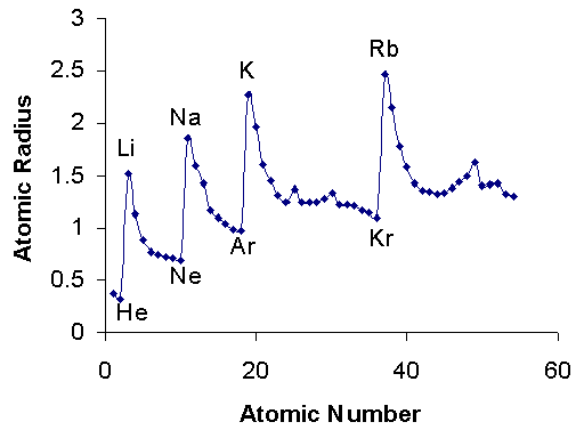
amikor az elegancia, az elméleti matematika és a kísérleti igazság találkozik – sajnos utóbbival már kevésbé. Nézzünk azonban néhány további kísérleti bizonyítékot, amelyet a mai értelemben vett atomelmélet kiválóan meg tudott magyarázni.

- Brown, 1827: **Brown-mozgás**, pollen-részecskék a vízben látszólag ok nélkül véletlenszerűen mozognak. Ez lesz az atomelmélet első elfogadott bizonyítéka később. Részletesebben lásd a következő fejezetben.
- Faraday, 1834: **az elektrolízis törvénye**, az elektródokon képződő anyag tömege (m) arányos az áthaladó elektromos töltésmennyiséggel (Q). Másrészt a töltésmennyiség arányos az anyagmennyiséggel is, ez $n = m/M$ -ként fejezhető ki, ha M a mólonkénti tömeg. Ez alapján:

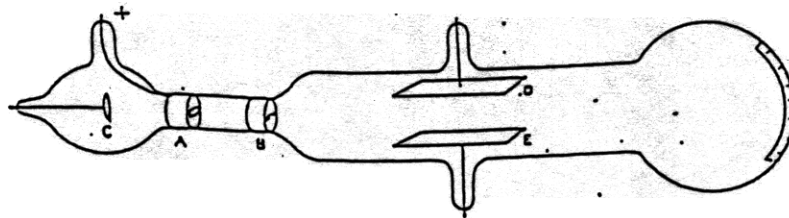
$$Q = ZFn = Z \frac{F}{M} m \quad (1)$$

ahol Z egész szám (később kiderült, hogy ez a kötési elektronok száma), és $F = 9,65 \cdot 10^4$ C/mol, a Faraday-féle állandó. Ez egyszerűen az elemi töltés és az Avogadro-állandó szorzata, mint később kiderült ($1,6 \cdot 10^{-19}$ C $\times$ $6 \cdot 10^{23}$ /mol).

- A móltömeg és az Avogadro állandó ismeretében már megkaphatjuk az **atomok tömegét**. Ezt atomi tömegegységben (azaz Daltonban) fejezhetjük például, ez a ^{12}C tömegének 1/12-ed részét jelenti. Dalton a hidrogén tömegét javasolta egységnek, később Ostwald az oxigén 1/16-át, ez az izotópok felfedezésével problémát jelentett (a természetes oxigénkeverék a kémiai tömegegység, az ^{16}O a fizikai tömegegység volt). 1961-ben vezették be az új egységet, amely már a szén-12 izotópra épült. Ma sokféle tömegspektrográffal (Nier-féle, Mattauch-féle) mérik a tömegeket, a mágneses térben létrejövő körpálya sugara és az impulzus között fennálló $p = qBr$ összefüggés alapján. Az atomok tömege pedig kb. a tömegszámmal egyezik meg, mert, mint később kiderült, a tömeget a proton és a neutron adja lényegében, ezek számát jelenti a tömegszám. (Később látni fogjuk, hogy az atommag kötési energiája hogyan módosítja ezt).
- Az **atomok méretének** nagyon sok definíciója van (van der Waals, ionos, kovalens, fémes, Bohr), mindet máshogy lehet mérni. Az értékek nyomásfüggetlenek, az elektronszerkezet határozza meg, és tipikusan 1 Å, azaz 10^{-10} m. Az azonos elektronszerkezetű, de különböző maggal rendelkező atomok (F^- , Na^+ , Mg^{++} , Al^{+++}) esetén a méret csökken, ahogy a mag nő (1,36 Å, 0,95 Å, 0,65 Å, 0,5 Å). Az elektronfelhő mérete növeli az atom sugarát, és a két



2. ábra. Az atomok mérete Å-ben, a kovalens sugárra vonatkoztatva. Az ábra hasonlóan folytatódik, a legnagyobb stabil atom a Cs, amely nagyjából $2.6 \text{ Å} = 260 \text{ pm}$ méretű.



3. ábra. A Thomson által használt Crookes-cső, amely egy vákuumozott üvegtartályból és benne elektródákból áll. Az elektronokat a C jelű katód bocsátja ki fűtés hatására, az A és B jelű rések élesítik a nyalábot, majd a D és E jelű lemezekre feszültséget kapcsolva az elektronok eltérülnek. Ez utóbbi volt Thomson felfedezésének legfontosabb pontja.

effektus alapján az alkáli fémek mérete a legnagyobb (távoli külső elektron, kis mag), míg a nemesgázoké a legkisebb (fele-harmada az azonos főkvantumszámú alkáli fémnek), lásd 2. ábra. H: 25 pm, Cs: 260 pm (de Po is csak 190 pm).

- Az atomok (vagy molekulák) méretét legegyszerűbben a következő gondolat kísérletből kaphatjuk meg. Ha felforraltunk egy m^3 folyadékot, az ekvivalens azzal, hogy a tér három irányban addig szabadljuk a kockát, míg a részek atomnyi nem lesznek. Ekkor a felületi feszültség ellen dolgozunk, és ha egy molekula d méretű, a kocka oldala a , akkor a/d darab vágásra lesz szükség, mindegyikkel $2a^2$ felületet létrehozva. Ehhez $6\gamma a^3/d$ energiára van szükség, míg a forráshővel $L\rho a^3$. Vízre 0,2 nm-t kapunk így ($L = 2250 \text{ kJ/kg}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\gamma = 72 \text{ mJ/m}^2$), héliumra (amely egyatomos) pedig 0,026 nm-t ($L = 25 \text{ kJ/kg}$, $\rho = 130 \text{ kg/m}^3$, $\gamma = 0,014 \text{ mJ/m}^2$), ez jó egyezést ad.
- Érdeemes megemlíteni, hogy Einstein doktori értekezése is hasonló témában íródott: a címe „A molekulák méretének új meghatározása” volt. Einstein azt vizsgálta, hogy a folyadék mozgását hogyan befolyásolja egy benne szuszpendált nagyon kicsiny gömb. Arra jut, hogy a viszkozitás miatt disszipálódott energia mértéke megnő, ha szuszpendált gömbök (oldott molekulák) vannak jelen, és a viszkozitási együttható $\eta' = \eta \cdot (1 + \phi)$ módon változik, ha $\phi = \nu \cdot 4r^3\pi/3$ molekulák térfogathányada, és ν a számsűrűségük, r a méretük. A molekulák tömegének ismeretében számsűrűségük meghatározható ($\nu = \rho/m$), és így a méretük is! Einstein még hozzáfűzi, hogy a diffúziós állandó $D = RT/N_A 6\pi\eta r$ kifejezésén keresztül (lásd a Brown-mozgásról szóló részt) ebből az Avogadro-állandó értéke is meghatározható – amely ekkoriban még nem volt igazán ismert (Perrin kap érte Nobel-díjat 1926-ban).

1.3. Az elektron felfedezése, a Thomson-modell

- J. J. Thomson 1897-es, **katódsugarakkal** végzett kísérletéig az volt az elképzelés, hogy az anyag legkisebb, oszthatatlan egységét az atomok alkotják. A Crookes-csővel végzett vizsgálatok során (lásd 3. ábra) kiderült, hogy a katódsugarakat, amelyek fényt keltenek a fluoreszcens rétegen, eltéríti az elektromos tér. Ez alapján leszűrte, hogy ezek a sugarak **nem a fény egy formáját** jelentik, hanem könnyű, **negatív töltésű részecskékből**, „korpuzkulákból” állnak. Thomson azt hitte, hogy a részecskék a gáz molekuláiból válnak ki, azaz az atom felosztásának vélte a jelenséget. A részecskéket később nevezték el elektronoknak. A kísérletet mágneses térrel kiegészítve, a Lorentz- és a Coulomb-erő felhasználásával Thomson megmérte az elektronok töltés/tömeg arányát is. Miután az elektromos tér okozta gyorsulás $a = F/m = eE/m$, a repülési idő $t = l/v$, a mágneses tér okozta Lorentz-erő pedig a centripetális erővel egyezik meg, így a következőket kapjuk:

$$\text{Elektromos térben az eltérülés: } y = \frac{1}{2}at^2 = \frac{eEl^2}{2mv^2} \quad (2)$$

$$\text{Mágneses térben a pályasugár: } r = \frac{mv^2}{evB} = \frac{mv}{eB} \quad (3)$$

$$\text{A kettő mérésével: } \frac{e}{m} = \frac{El^2}{2B^2yr^2} \quad (4)$$

Így a (nehezen mérhető) sebesség ismerete nélkül megkapható a töltés/tömeg arány. Thomson konkrét mérésének a lényege az volt, hogy az adott elektromos tér miatti ϕ eltérülést éppen kioltó mágneses tért állított be. Ha a két erő éppen kioltja egymást, akkor $E = vB$, azaz a sebesség a kettő hányadosa, $v = E/B$. Ekkor az elektromos tér miatti eltérülést mérte, és ebből határozta meg a töltés/tömeg arányt:

$$\text{Az elektromos eltérülés: } \phi = \frac{y}{l} = \frac{eEl}{2mv^2} \quad (5)$$

$$\text{Innen a sebesség ismeretében: } \frac{e}{m} = \frac{2\phi v^2}{El} = \frac{2E\phi}{B^2l} \quad (6)$$

Így ehhez a pályasugár helyett a ϕ eltérülés mértékére van szükség – érdekes végiggondolni, hogy ez és az előző módszer matematikailag szinte ugyanaz, ugyanakkor mérés technikailag jelentős különbség van köztük! A mérés eredménye szerint az elektron tömeg/töltés aránya három nagyságrenddel kisebb a H^+ ionénál. Miután a töltésük megegyezik (ahogy azt ma tudjuk), ezért ez a H atomnál ezerszer könnyebb részecskét jelent. Az eredmények fontos pontjai közé tartozott az is, hogy a töltés/tömeg arány nem függ a kibocsátó katódtól, illetve a radioaktív anyagokból kijövő sugárzás is ugyanebbe a kategóriába tartozik. Álljon alább egy idézet Thomsontól:

„As the cathode rays carry a charge of negative electricity, are deflected by an electrostatic force as if they were negatively electrified, and are acted on by a magnetic force in just the way in which this force would act on a negatively electrified body moving along the path of these rays, I can see no escape from the conclusion that they are charges of negative electricity carried by particles of matter.”

- 1902-ben Kaufmann béta-sugárzással azt találta, hogy nagyon gyors elektronokra ez az arány változik, amit Hupka és Bucherer mérései megerősítettek – nem volt azonban egyértelmű a változás mértéke. Einstein relativitáselméletének jóslata szerint a test tehetetlensége és egyúttal energiája egy $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ faktorial változik, ha v sebességgel halad. Ez a gondolat nem volt gyökeresen új, hiszen korábban is voltak feltételezések arra nézve, hogy egy elektromos sugárzással töltött térfogat úgy viselkedik, mintha tehetetlen tömege lenne. Einstein forradalmi gondolata szerint azonban minden energiához tehetetlen tömeg tartozik. Günther Neumann 1914-es, illetve Guye és Lavanchy 1915-ös mérései azt mutatták, hogy a v sebességű elektron tehetetlensége éppen az einsteni formulának megfelelően változik meg, tehát a tömeg/töltés arány $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ faktorial nő.

- Az atomból alapján Thomson 1904-ben megalkotta a „plum pudding” névvel illetett **első atommodellt** (amelyért Nobel-díjban részesült). Ebben az atom egy pozitív töltésű levestől áll, amelyben úsznak a negatív töltésű elektronok. Ezt az 1909-es aranyfóliával végzett szórási kísérlet cáfolta, lásd a következő alfejezetben.
- Millikan 1913-ban publikálta mérései eredményét (Fletcher javaslatai alapján korrigálva berendezését), amelynek következtetéseként egyfajta **elemi töltés** létezését állapította meg, illetve lényegében megmérte az elektron tömegét. Kísérletében porlasztott a olajcseppekre ható elektromos erőt mérte sebességük megfigyelésén keresztül. A Newton-egyenlet az egyenletesen mozgó olajcseppekre felírva így néz ki (figyelembe véve a Stokes-törvény adta közegellenállást):

$$mg - F_{\text{fel}} = \frac{4\pi r^3}{3}(\rho_{\text{olaj}} - \rho_{\text{lev.}})g = 6\pi\eta r v_0, \quad (7)$$

ahol m a cseppek tömege, r a mérete, ρ a sűrűség, η a levegő viszkozitása, v_0 a cseppek állandó sebessége. A cseppek mérete innen kiszámítható: $r^2 = 9\eta v_0 / (2g\Delta\rho)$. Ha ezekre a Q töltésű cseppekre E térerősséget kapcsolunk, a sebességük v lesz, és a fenti egyenlet így módosul:

$$\frac{4\pi r^3}{3}(\rho_{\text{olaj}} - \rho_{\text{lev.}})g + QE = 6\pi\eta r v, \quad (8)$$

azaz

$$Q = 6\pi\eta r(v - v_0)/E \quad (9)$$

lesz a töltésük. Ebbe az egyenletbe visszahelyettesíthetjük az előzőekben kapott cseppméretet. Millikan végeredményben azt találta, hogy a töltések mindig egy $e = 1,592(2) \cdot 10^{-19}$ C konstans egész számú többszöröse. Ennek mai pontos értéke $1,60217649(4) \cdot 10^{-19}$ C. A jelenség jelentése az, hogy a természetben csak e egész számú többszöröse jelenhetnek meg, és ez az elektron illetve az atom további építőköveinek a töltése. Ezen mérés kapcsán érdemes felidézni Feynman kommentárját (ld. „Surely You’re Joking, Mr. Feynman!”):

„Millikan megmérte az elektron töltését olajcseppek zuhanását vizsgáló kísérletében, és eredménye enyhén pontatlan volt. ... Érdekes megnézni az elektron töltésére vonatkozó, Millikant követő méréseket. Ha az idő függvényében ábrázoljuk ezeket, látjuk, hogy az első kicsit nagyobb Millikan értékénél, a következő még nagyobb, és így tovább, míg egy bizonyos, Millikan értékénél nagyobb számmal meg nem állapodnak. Miért nem mérték egyből helyesen az értéket? ... Amikor a kísérlet vezetője Millikanénél lényegesen nagyobb számot kapott, azt gondolta, biztos valamit rosszul csinált – és megkereste ennek okát. Ha Millikanhez közeli értéket talált, akkor nem olyan alaposan nézte át a kísérletet.”

1.4. A hatáskeresztmetszet, szóródás centrális erőterben

- Fizikai hatáskeresztmetszetnek egy adott szórási vagy elnyelési folyamat valószínűségét meghatározó effektív felületet nevezünk. Legyen adott a bejövő áramsűrűség (időegységre és felületegységre vetített részecskeszám vagy energia). Ha a folyamatban résztvevő (azaz abban érintett, eltérülő) részecskék számát vagy energia mennyiségét elosztjuk a bejövő áramsűrűséggel, akkor kapjuk meg a hatáskeresztmetszetet. A következőkben a részecskeszámmal megadott definíciót járjuk körül jobban (de tartsuk észben, hogy a bejövő áramsűrűség lehet az energia vagy más fizikai mennyiség sűrűsége is, és a kvantummechanikában például a valószínűség-áramon keresztül adhatjuk majd meg a hatáskeresztmetszetet).
- Elemi folyamatnak azt az esetet nevezük, ha csak két részecske vesz részt a folyamatban, például egyszerű ütközés nyomán. Ilyenkor az időegységenkénti bekövetkezések, azaz az időegységenként „kijövő” részecskék száma $\dot{N}_{\text{ki}}$ száma megegyezik az időegységenként bejövő részecskék $\dot{N}_{\text{be}}$ időegységenkénti számával, megszorozva az ütközés valószínűségével. Ez a valószínűség úgy kapható meg, hogy elosztjuk az összes $N_{\text{céltárgy}}$ darab céltárgyrészecske által nyújtott felületet ($N_{\text{céltárgy}} \cdot \sigma$) a teljes nyalábkeresztmetszettel (A). Itt az egy céltárgyrészecske által nyújtott felület az úgynevezett **hatáskeresztmetszet** (σ), és ez alapján:

$$\dot{N}_{\text{ki}} = \dot{N}_{\text{be}} \cdot \langle \text{ütk. val.} \rangle = \dot{N}_{\text{be}} \frac{N_{\text{céltárgy}} \sigma}{A} = j_{\text{be}} N_{\text{céltárgy}} \sigma \quad (10)$$

ahol tehát A a nyaláb keresztmetszete és σ a folyamat hatáskeresztmetszete, továbbá a bejövő áramsűrűség $j_{\text{be}} = \dot{N}_{\text{be}}/A$ módon írható fel. Úgy is fogalmazhatunk, j bejövő energiaáram-sűrűségből kiindulva, hogy a „kiszóródott” teljesítmény mértéke $P_{\text{ki}} = j_{\text{be}}\sigma$.

- Ezen felül definiáljuk a **differentiális hatáskeresztmetszetet**, többnyire a térszögegenségkénti hatáskeresztmetszetként, ennek jelölése $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi)$, ahol Ω a térszöget jelöli, és ez azt jelenti, hogy egy adott (θ, ϕ) irány esetén (ahol θ a polár-, ϕ az azimut szöget jelöli) az ekörül infinitezimális $d\Omega$ térszögtartományba történő szóródáshoz mekkora infinitezimális felület tartozik. Ezt úgy értjük, hogy egy adott irányban elhelyezkedő $\Delta\Omega$ tartományba érkező részecskék száma

$$\dot{N}_{\text{ki}, \Delta\Omega} = j_{\text{be}} N_{\text{célterg}} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega \quad (11)$$

Praktikus gömbi koordinátákban felírni ezt, itt $d\Omega = d\phi \sin\theta d\theta$ a térszögelem, illetve ϕ -ben vett forgási szimmetria esetén (amely többnyire fennáll, hiszen a szórócentrumok véletlenszerűen orientáltak, ráadásul gömbszimmetrikusak) $d\Omega = 2\pi d\theta$, és ekkor $d\sigma/d\Omega$ csak a θ változótól függ.

- Vegyünk egy szórócentrumon eltérülő nyalábot, amelynek b impakt paraméterrel érkező részecskéi θ szögben haladnak tovább. Ha a bejövő nyaláb b és $b + db$ intervallumba eső részét nézzük, ez egy θ és $\theta + d\theta$ szögtartományba történő szóródásnak felel meg. Ekkor a bejövő részecskék egy $2\pi b db$ felületen oszlanak el, tehát $j_{\text{be}} = \dot{N}_{\text{be}}/2\pi b db$. Ugyanezen részecskék a szóródás után egy $\Delta\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ térszögbe érkeznek, ekkor tehát $\dot{N}_{\text{be}} = \dot{N}_{\text{ki}}$, és mivel egy szórócentrummal számoltunk, így a fentiek és a (11) egyenlet alapján

$$\dot{N}_{\text{be}} = \frac{\dot{N}_{\text{ki}}}{2\pi b db} \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin\theta d\theta, \text{ azaz} \quad (12)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|, \quad (13)$$

ahol az abszolútértékre azért van szükség, mert növekvő b esetén θ csökken. A levezetés illusztrációjaként lásd a 4. ábrát. Fontos látni ugyanakkor, hogy ezen egyszerű modellben a kijövő és a bemenő részecskék száma azonos, azaz itt **mindenki szóródik**, avagy a teljes hatáskeresztmetszet végtelennek tekinthető!

- Vizsgáljuk meg ezután a centrális erőterben való szóródást, illetve az ott tapasztalt $b(\theta)$ összefüggést (azaz hogy adott b impakt paraméterrel érkező részecske milyen θ szöggel halad tovább). Itt a centrális erőter miatt a gyorsulás kizárólag sugárirányú, és a centrumtól vett távolság második deriváltjából továbbá a centripetális gyorsulásból kiszámítva $a_r = \ddot{r} - r\dot{\theta}^2$ módon adódik. Az időfüggést kezeljük úgy, hogy definiáljuk az $u = 1/r$ változót, majd ezzel egy $u(\theta)$ pályát írunk fel, és a reakciósíkból vett polárszög $\theta = \theta(t)$ időfüggését engedjük meg. (A reakciósíkból a centrális erőter miatt nem tér ki az ütköző részecske.) Ezzel $\dot{r} = -u'\dot{\theta}/u^2$ illetve a $J = mr^2\dot{\theta} = m\dot{\theta}/u^2$ perdülettel $\dot{r} = -u'J/m$. A második derivált pedig (a perdület megmaradása miatt) $\ddot{r} = -u''\dot{\theta}J/m = u''u^2J^2/m^2$, és a perdület definíciója miatt $r\dot{\theta}^2 = u^3J^2/m^2$, így

$$a = -\frac{u^2J^2}{m}(u'' + u), \text{ azaz } u'' + u = -\frac{Fm}{J^2u^2} \quad (14)$$

ahol utóbbit Binet-egyenletnek nevezzük.

- Coulomb-potenciál esetén, a perdületet a kezdeti sebességgel és az impakt paraméterrel $J = mvb$ módon felírva

$$u'' + u = -k \frac{q_1 q_2}{mv^2 b^2} = -\kappa \text{ (konstans)} \quad (15)$$

adódik, ahol $q_{1,2}$ töltések, k pedig a Coulomb-állandó. Ennek megoldása

$$u(\theta) = c_1 \cos\theta + c_2 \sin\theta - \kappa. \quad (16)$$

Gondoljuk meg, hogy mivel $\theta = \pi$ esetén $u = 0$ kell, (az $r \rightarrow \infty$ pontból jön a nyaláb), ebből $c_1 = -\kappa$ és $u(\theta) = -\kappa(\cos\theta + 1) + c_2 \sin\theta$ adódik. Figyelembe véve, hogy (ahogy fentebb

írtuk) $u' = -m\dot{r}/J$, a $\theta = \pi$ esetre (azaz kezdetben):

$$u'(\theta = \pi) = -\frac{mv}{J} = -\frac{1}{b} \quad (17)$$

adódik, ahonnan $c_2 = 1/b$. Az ennek is megfelelő megoldás az $u = -\kappa(\cos\theta + 1) + \sin(\theta)/b$ formában adódik. Ez két pontban lesz nulla a $[0, \pi]$ intervallumon: $\theta = \pi$ és $\theta = 2 \arctan(b\kappa)$ értékeknél. Az első a bejövő nyaláb szöge, a második a kirepülő részecskéé. Az eltérülési szög:

$$\tan \frac{\theta}{2} = k \frac{q_1 q_2}{mv^2 b}, \text{ azaz} \quad (18)$$

$$b = k \frac{q_1 q_2}{mv^2} \cot \frac{\theta}{2}. \quad (19)$$

- Ide behelyettesíthetjük a (13) egyenletben kapott formulát, és azt kapjuk, hogy

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k \frac{q_1 q_2}{mv^2} \cot \frac{\theta}{2}}{\sin \theta} k \frac{q_1 q_2}{2mv^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} = \left(k \frac{q_1 q_2}{mv^2} \right)^2 \frac{1}{4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (20)$$

Ez tehát a q_1 töltésű részecske elektromos terében szóródó q_2 részecskék differenciális hatás-keresztmetszete.

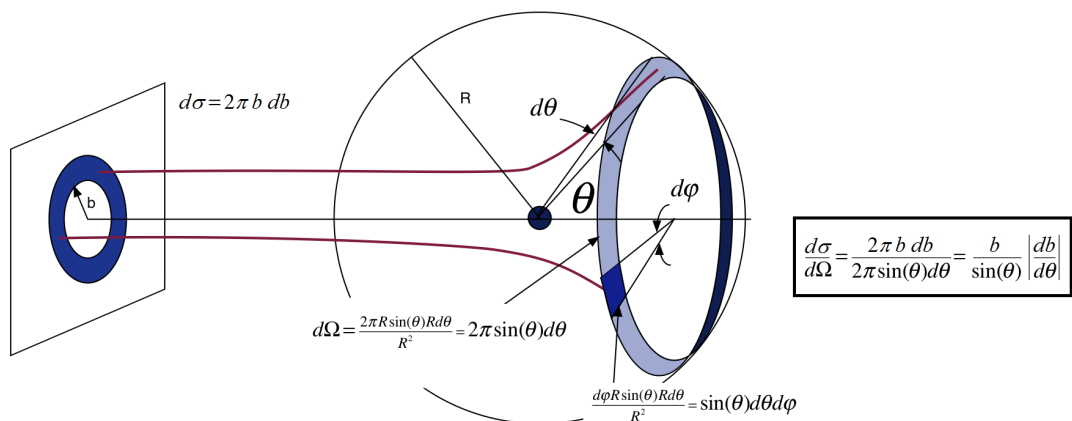
- Fontos látni, hogy ez θ -ra integrálva (0 és π között, de $\theta = 0$ pont körül bármilyen nyílt halmazon) végtelent ad, tehát ennek a szórásnak végtelen a teljes hatáskeresztmetszete, azaz bármilyen távolságban érkezik a nyaláb, *valamennyire* mindenképpen eltérül, azaz mindenképpen sor kerül reakcióra (a Coulomb-kölcsönhatás végtelen hatótávolsága miatt). Ez a végtelen úgy értelmezhető például, hogy ha bejön N_{be} darab részecske, akkor a *teljes* térre nézve ezek áramsűrűsége nulla, és ezt szorozzuk a végtelen hatáskeresztmetszettel. Ugyanakkor véges, de az összes bejövő részecskét tartalmazó felületre „regularizálva” a kifejezést, az $N_{\text{be}} = N_{\text{ki}}$ összefüggésre jutunk. Ezt a kvantumelméletben tapasztalt véges hatáskeresztmetszetekkel érdemes összehasonlítani, amely az erők (a magerő vagy az erős kölcsönhatás) véges hatótávolsága miatt van.
- Érdemes azt is megemlíteni, hogy kvantumelméletben a differenciális hatáskeresztmetszet az úgynevezett szórási amplitúdó abszolútérték-négyzeteként adódik, amely a szórási folyamat során keletkező gömhullámok adott irányban vett amplitúdóját jelenti. A szórási amplitúdó viszont, mint kiderül, az úgynevezett Born-közelítéstben a szóró potenciál Fourier-transzformálásával kapható meg – szórási kísérletekben tehát tulajdonképpen a potenciál alakját mérhetjük meg.

Note: A teljes hatáskeresztmetszet pedig a szórási amplitúdó nullában vett értékéből adódik (illetve ennek imaginárius részéből), evvel később „optikai tétel” címszó alatt találkozunk.

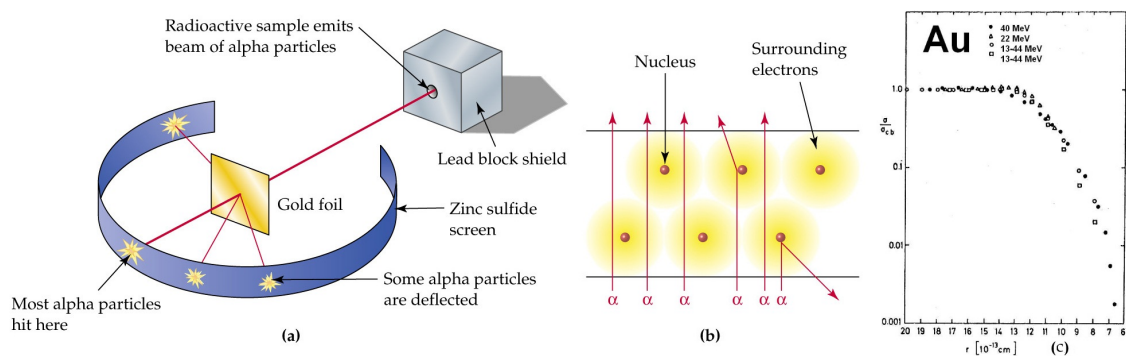
1.5. Az atommag felfedezése, a Rutherford-modell

- Rutherford (Geigerrel és Mardsennel) 1911-ben mérte alfa-bomlásból származó részecskék arany fólián való szóródásában a differenciális hatáskeresztmetszetet (lásd 5. ábra). A Thomson-féle atommodell alapján túlnyomórészt kisszögű szórást vártak, hiszen ha az atom egy egyenletes töltéseloszlású göm, egy néhány MeV energiájú alfa részecske alig néhány század fok eltérülést szenvedhet! Ezzel szemben a részecskék jó része visszaszóródott. Ezt egyfajta **pontszerű maggal** lehetett magyarázni, illetve annak **centrális erőterében** való eltérüléssel.
- Egy E energiájú α részecske egy Z rendszámú, (anyagban) rögzített magot a kezdeti mozgási energia és a Coulomb-potenciál egyenlősége ($E = 2kZe^2/d$) alapján $d = 2kZe^2/E$ távolságra tudná megközelíteni (ez pl. 6 MeV-es α -részecske és arany atommag esetén kb. 38 fm távolság), ha $b = 0$ impakt paraméterrel érkezne. Az előző szakaszban kapottakat ezzel kifejezve:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = k^2 \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{d^2}{16 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (21)$$



4. ábra. A differenciális hatáskeresztmetszet klasszikus értéke az impakt paraméter és a szóródási szög összefüggéséből.



5. ábra. A Rutherford féle kísérlet. Az (a) ábrán a kísérleti elrendezés, a (b)-n a magyarázatának illusztrációja látható. A (c) ábra mutatja, hogy kis impakt paraméterekre (r) eltérést találunk a Coulomb-kölcsönhatásból számolt Rutherford hatáskeresztmetszettől (σ/σ_{Cb} , ennek oka az, hogy itt már érintkezik a mag és az alfa részecske, és új kölcsönhatások lépnek fel.

- Rutherford ezzel megegyező differenciális hatáskeresztmetszetet mért, mivel ólom α bomlásból származó nyalábot használt, amelynek energiája nem teszi lehetővé, hogy az α mag és az arany atommag annyira megközelítsék egymást, hogy a magerő szerepe is megjelenjen. Mindössze annyit tudott megállapítani, hogy az atommag sugara kisebb, mint $3,4 \cdot 10^{-14}$ méter, ami **több nagyságrenddel kisebb**, mint az arany atom 10^{-10} méteres mérete.
- Nagyobb energián viszont nagy szögekre (azaz nagy impakt paraméterre) eltérést találtak a fenti formulától (lásd az 5.c ábrán), ugyanis ekkora impakt paraméterekre már **nem tekinthető pontszerűnek a mag**, az α részecske lényegében közvetlenül nekiütközik (és így az elektromos kölcsönhatáson kívül a magerő is szerepet játszik). Ez az impakt paraméter a mag méretét jelenti lényegében, illetve a két mag sugarának és a magerő hatótávolságának összege.
- A mag tehát egy, az atom nagyságrendű méreténél tíz- vagy százezerszer kisebb objektum, az atom méretét pedig a szinte elhanyagolható tömegű elektronfelhő adja. Kézenfekvő az atomra mint egy miniatűr Naprendszerre gondolni, ahol a gravitációs erő helyébe az elektromos vonzás lép. Ez a **Rutherford-féle atommodell** lényege.

2. Atomosság makroszkópikus jelenségekben

2.1. Brown-mozgás

- A XIX. század végére az atomhipotézis számos megfigyelés magyarázatául szolgált, sokak véleménye azonban az volt, hogy a hőelmélet területén már nem alkalmazható sikeresen. Ezzel kapcsolatban a legfontosabb eredményeket a folytonos közegbe helyezett részecskék **Brown-mozgása** szolgáltatta. Ezt Lucretius már Kr. e. 60-ban megfigyelte (a levegőben szálló por-szemcsék fény hatására látható „táncát”), illetve Ingenhousz is 1785-ben (ő koromszemcsék mozgását vizsgálta alkohol felületén). Brown volt az azonban, aki természettudományos módszerekkel fogott a jelenség vizsgálatához. 1827-ben virágpór vízen történő véletlenszerű mozgását figyelte meg, ma ehhez kötik a jelenség felfedezését, illetve első tudományos dokumentációját. Felmerült, hogy ez a mozgás az élet egyfajta megnyilvánulása lenne, ezért Brown apró szervetlen részecskékkal is megismételte kísérletét, és hasonló eredményre jutott. A Brown-mozgás (lásd a 6. ábra) fontos tulajdonságai:

- független az időtől (nem csillapodik az idővel)
- független a folyadék kémiai összetételétől (kivéve annak folyékonyságát/viszkozitását)
- térben rendezetlen
- nagyobb hőmérsékleten gyorsabb
- nagyobb részecske esetén lassabb

A jelenséget sokan próbálták az atomok létezésére és ezek hőmozgására (azaz az atomok kinetikus elméletére) visszavezetni (Ramsay, Gouy, Exner), azonban cáfolatok is születtek (Nägeli). Einstein 1905-ben (és tőle függetlenül Smoluchowski 1906-ban) adott magyarázata már tudományos konszenzushoz vezetett. Ennek eredménye szerint az adott pontban elszórt szemcsék kezdeti helyüktől való eltávolodásának négyzetének átlagos értéke $\bar{x}^2 = \frac{kT}{2\pi\eta r} t$, ahol k a Boltzmann-állandó, T az anyag hőmérséklete, η a viszkozitása, r a szemcseméret és η a viszkozitás. Ez pontosan a megfigyeléseket támasztja alá – inentől tekinthetjük az atomelméletet elfogadottnak. Perrin hosszú kísérletsorozata, amelynek első részletei 1908-ban láttak napvilágot, addig példa nélkül álló pontossággal igazolta Einstein lényegében összes jóslatát. Einstein levezetésének lényege az, hogy a diffúziós egyenletet és az ozmózisnyomást összekapcsolja, az alábbi módon.

- Vegyünk egy folytonos közeget, amelyben szuszpendált részecskék vannak elhelyezve, azaz ezek egyfajta híg oldatát. Ekkor az ozmózisnyomás ezek parciális nyomásából származik,

$$p(x) = \nu(x)kT \quad (22)$$

módon, ahol $\nu(x) = N(x)/V$ a részecskék lokális számsűrűsége. Ekkor a részecskére ható ozmotikus erő

$$F_o = -\frac{1}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{kT}{\nu} \frac{\partial \nu}{\partial x} \quad (23)$$

lesz (egy dimenzióban kifejezve, az egyszerűség kedvéért). Ha a részecskék ennek hatására mozognak, akkor a Stokes-törvény szerint v sebesség esetén $F_k = -6\pi\eta r v$ közegellenállási erő hat rájuk (η viszkozitású közegben). Ebből az egyensúlyi sebességük ($F_k = F_o$ -ból)

$$v = -\frac{kT}{6\pi\eta r\nu} \frac{\partial\nu}{\partial x} \quad (24)$$

- Ez azt jelenti, hogy egy adott felületen időegységenként

$$\nu v = -\frac{kT}{6\pi\eta r} \frac{\partial\nu}{\partial x} \quad (25)$$

mennyiségű részecske áramlik át, azaz egy kis térfogatban a kontinuitásnak megfelelően

$$\frac{\partial\nu}{\partial t} = -\frac{\partial(\nu v)}{\partial x} = \frac{kT}{6\pi\eta r} \frac{\partial^2\nu}{\partial x^2} \quad (26)$$

mértékben változik a számuk (a térfogat jobb- és baloldalán való ki- és beáramlás különbségéből számolva kaphatjuk meg az első egyenlőséget).

- Mindezekből a **diffúziós egyenlet** adódik: $\dot{\nu} = D\nu''$. Ennek megoldása egy dimenzióban, Gauss kezdeti feltétel esetén, N_{tot} számú részecske esetén

$$\nu(x, t) = \frac{N_{\text{tot}}}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (27)$$

Ebből x^2 várható értéke (a részecskék átlagos, origótól vett távolság-négyzete), azaz az eloszlás második momentuma egy részecskére vonatkoztatva

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 \nu(x, t) dx = 2Dt = \frac{kT}{3\pi\eta r} t \quad (28)$$

amely összhangban van a fent összefoglalt kísérleti tényekkel.

- A Langevin-féle levezetést is érdemes megemlíteni. Ez a részecske Newton-egyenletét veszi alapul, rá ható $F(x)$ véletlenszerű erőből és a közegellenállásból kiindulva; majd ezt $2x$ -szel szorozza:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x(t) - 6\pi\eta r \frac{dx}{dt} \quad (29)$$

$$m 2x \frac{d^2 x}{dt^2} = m \frac{d^2 x^2}{dt^2} - 2m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = 2F_x(t)x - 6\pi\eta r \frac{dx^2}{dt} \quad (30)$$

Ha itt az időben vett várható értéket vesszük, és észrevesszük, hogy $\langle x F_x \rangle_t = 0$, mivel ezek korrelálatlanok (és „szimmetriasértés” lenne ennek bármely nemnulla értéke); ezen felül az átlagolást és a differenciálást felcseréljük, akkor ezt kapjuk:

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + \frac{6\pi\eta r}{m} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = 2 \left\langle \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right\rangle = \frac{2}{m} kT \quad (31)$$

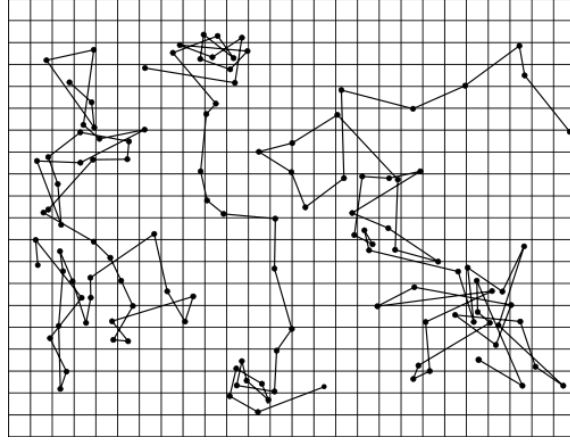
ahol az utolsó egyenlőség az ekvipartíció tétele miatt áll fenn. Ez egy differenciálegyenlet $d \langle x^2 \rangle / dt$ -re, a megoldása pedig $(f'(t) + af(t) = b \Rightarrow f(t) = \exp(-at) + b/a$ alapján):

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{6\pi\eta r} + c \exp \left[-\frac{6\pi\eta r}{m} t \right] \quad (32)$$

ez kellően nagy időkre (ha az exponenciális tag járuléka már nem számít, azaz már nem a részecske tehetetlensége, hanem tényleg a Brown-mozgás a döntő) az Einstein-féle

$$\langle x^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\eta r} t \quad (33)$$

formulát adja vissza.



6. ábra. Egy $0.53 \mu\text{m}$ méretű kolloid részecske mozgása mikroszkóppal való megfigyelés által három alkalommal feljegyezve. A pozíciók között harminc másodperc telt el, a rácsméret $3.2 \mu\text{m}$. Az ábra forrása: J. B. Perrin, "Mouvement brownien et réalité moléculaire" Ann. de Chimie et de Physique (VIII) 18, 5-114 (1909)

2.2. Sörétzaj

- Schottky 1926-ban megfigyelte, hogy nagy frekvenciánál és alacsony hőmérsékletnél egy érdekes zaj jelenhet meg. Ennek magyarázata később az volt, hogy **a töltéshordozók kvantáltak**, vagyis az áram véges számú elemi töltés mozgásából áll össze. Ezek száma fluktuál, és végső soron ez adja a zajt. Például egy mikrohullámú áramkör esetében, amely nanoszekundumos skálán működik, ha az áram 16 nanoamper, akkor 1 ns alatt 100 elektron halad el. A binomiális eloszlás szerint ennek fluktuációja kb. 10, azaz a zaj a jel tizedét adja.
- Az elektromos áram a töltéshordozók (elektronok) áramlásából adódik, és a t időtartam alatt átfolyt elektronok n számából $I = en/t$ módon adódik. Az n random fluktuációjából az áram szórását (ingadozását) is megkaphatjuk:

$$(\Delta I)^2 = \langle (I(t) - \langle I \rangle)^2 \rangle = \frac{e^2}{t^2} \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \frac{e^2}{t^2} (\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2) \quad (34)$$

- Vegyünk egy kellően nagy T időtartamot, ekkor $N = nT$ az elektronok száma a teljes intervallumon. Egy t intervallumra kell ebből n darabot kiválasztanunk. Ekkor az erre vonatkozó **binomiális eloszlás**:

$$W(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}, \quad (35)$$

ahol $p = t/T$. Ebből az eloszlásból kiszámolhatóak az alábbi várható értékek és a szórás:

$$\langle n \rangle = Np = N \frac{t}{T} \quad (36)$$

$$\langle n^2 \rangle = Np - N(N-1)p^2 = N \frac{t}{T} + N(N-1) \frac{t^2}{T^2} \quad (37)$$

$$(\Delta n)^2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = N \frac{t}{T} - N \frac{t^2}{T^2} = N \frac{t}{T} \left(1 - \frac{t}{T} \right) \quad (38)$$

$$(\Delta I)^2 = e^2 (\Delta n)^2 = \frac{Ne^2}{tT} - \frac{Ne^2}{T^2} = \frac{e \langle I \rangle}{t} \left(1 - \frac{t}{T} \right) \quad (39)$$

ahonnan végül a t időtartamra a következő relatív áramingadozás adódik:

$$\frac{\Delta I}{\langle I \rangle} = \sqrt{\frac{e}{\langle I \rangle t} \left(1 - \frac{t}{T} \right)} \xrightarrow{T \gg t} \frac{\Delta I}{\langle I \rangle} \approx \sqrt{\frac{e}{\langle I \rangle t}} = \sqrt{\frac{1}{\langle n \rangle}} \quad (40)$$

Ez tehát egy véletlen t időtartam során mért áramerősség átlagos eltérése a „teljes” időtartam átlagos áramerősségétől.

- Figyeljük meg, hogy a fenti bionomiális eloszlás esetén $\langle n \rangle \approx (\Delta n)^2$, ha $p \ll 1$. Az egyenlőség egzaktul teljesül a Poisson-eloszlás esetén, amely éppen a binomiális eloszlás $p \rightarrow 1$ határeseté. A $\langle n \rangle \approx (\Delta n)^2$ kifejezésből az $I = en/t$ egyenlőség használatával egyébként közvetlenül is látható, hogy $e \langle I \rangle / t \approx (\Delta I)^2$, amiből a fenti (39) kifejezés is adódik.
- Ha van egy olyan áramkörünk, amely f frekvencián érzékeny, akkor ez éppen az ennek megfelelő $t = 1/2f$ időtartam alatti áramingadozást fogja érzékelni, illetve ezt felerősíteni. Ebben a tartományban az áramingadozás négyzete tehát $2eIf$, ami tulajdonképpen a zaj erősségét jelenti. Ezen zaj mellett megjelenhetnek más zajok, az $1/f$ -es flicker (villódzási) zaj és a hőmérséklettel arányos Johnson-Nyquist zaj is. Ezek azonban alacsony hőmérsékleten és nagy frekvenciánál kisebbek lehetnek, mint a sörétzaj.

2.3. Sűrűségingadozások gázokban

- A sörétzajhoz hasonlóan a gázok kvantáltsága (atomokra osztottsága) sűrűségingadozást hoz létre. az átlagos $\nu = N/V$ számsűrűség körül. Itt is a teljes N részecskeszámból választunk ki n darabot egy ΔV térfogatban, ennek eloszlása a fentiekhez hasonlóan binomiális, azaz

$$W(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}, \text{ ahol} \quad (41)$$

$$p = \frac{N_{\Delta V}}{N} = \frac{\nu \Delta V}{\nu V} = \frac{\Delta V}{V}. \quad (42)$$

Amennyiben $p \ll 1$, azaz a teljes térfogat egy kis hányadát választjuk ki, akkor ebből a

$$W(n) = \frac{(pN)^n}{n!} \cdot \exp[-pN] \quad (43)$$

Poisson-eloszlás adódik a $p \rightarrow 1$ határesetben. Ekkor

$$\langle n \rangle = (\Delta n)^2 = pN = \nu \Delta V. \quad (44)$$

A ΔV térfogatban található molekulák várható száma tehát $\langle n \rangle = pN$, abszolút szórása pedig $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle}$, relatív szórása $\Delta n / \langle n \rangle = 1/\sqrt{\langle n \rangle}$.

- Ideális gázra normál állapotban $\nu = 2,78 \cdot 10^{25}$ molekula/ m^3 , a zöld fény $0,5 \mu\text{m}$ -es hullámhosszának megfelelő térfogatban ez kb. $3,48 \cdot 10^6$ molekula, ahol $\Delta n / \langle n \rangle = 1/\sqrt{\langle n \rangle} = 0,05\%$. Ekkora térfogatban tehát $0,05$ százalékot ingadozik a molekulák száma.
- Reális gázokban a molekulák térfogata módosítja a képet. Itt érdekes jelenségek lépnek fel, például a kritikus pont körül megnövekvő fluktuációk, ezeket most nem tárgyaljuk.

2.4. Fényszóródás

- A gázok **sűrűségfluktuációi** érdekes következményt vonnak maguk után a **fényszórásra** nézve. Ennek az az alapja, hogy a számsűrűség összefügg a gázcella törésmutatójával. Legyen a molekulák polarizálhatósága α , azaz E elektromos tér hatására $p = \alpha E$ dipólmomentumuk lesz, a számsűrűségük pedig ν . A közegben haladó fény terjedését az n törésmutató határozza meg (figyelem, a korábbi két alfejezetben ez a részecskeszám volt, de itt megváltoztattuk a jelölést) amely viszont a ν számsűrűségtől függ, hiszen a Clausius–Mossotti-reláció szerint

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{\nu \alpha}{3\epsilon_0}, \text{ ahonnan} \quad (45)$$

$$n = \sqrt{\frac{3\epsilon_0^2 + 2\alpha\nu}{3\epsilon_0^2 - \alpha\nu}}, \text{ azaz} \quad (46)$$

$$\Delta n = \frac{9\alpha\epsilon_0}{2n(\alpha\nu - 3\epsilon_0)^2} \Delta\nu, \text{ továbbá} \quad (47)$$

$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{(n^2 + 2)(n^2 - 1)}{6n^2} \frac{\Delta\nu}{\nu} = \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} + \frac{1}{2} \right)^{-1} \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} - 1 \right)^{-1} \frac{\alpha\Delta\nu}{\epsilon_0} \quad (48)$$

Ez alapján azt mondhatjuk, hogy a számsűrűség ingadozása hozza létre a fényszórást.

- Ha most egy kicsit más megközelítést alkalmazunk, és azt mondjuk, hogy a fény a hullámhosszánál lényegesen kisebb, d méretű, n törésmutatójú gömbön szóródik (amely a Clausius–Mosotti reláción keresztül egy α polarizálhatóságú molekulával ekvivalens), akkor kiderül (ezt a számolást itt nem végezzük el), hogy a szórt fény intenzitása a θ szórási szög és a szórócentrumtól mért r távolság függvényében

$$I(r) = I_0 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2r^2} \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{d}{2} \right)^6 \quad (49)$$

módon változik, és innen a gömbön a teljes szórási hatáskeresztmetszet (azaz a kimenő teljesítmény és a bejövő áramsűrűség (intenzitás) hányadosa, az 1.4. szakaszban is említett $P_{\text{ki}} = j_{\text{be}}\sigma$ összefüggésnek megfelelően):

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} = \frac{2\pi^5}{3} \frac{d^6}{\lambda^4} \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} \right)^2. \quad (50)$$

A fenti formula kis λ értékekre nagy szórást ad, tehát a **kék fény erősen szóródik, a vörös pedig lényegesen kevésbé**. A Nap sugárzási spektrumából a kék tehát kiszóródik, a vörös viszont bennmarad. **Ezért kék az ég és vörös a lemenő Nap**. Mindezt az alábbiakban mikroszkópicusan is megvizsgáljuk.

- Vizsgáljuk meg, hogy az elektromágneses sugárzás hogyan szóródik kis polarizálható molekulákon. Ennek kulcsa a **dipólsugárzás**. Ha két vezető gömböt összeköt egy vezeték, és a töltés oda-vissza áramlik a kettő között, akkor Hertz-féle dipólusunk van. Ebben az egyik gömb töltése $q(t) = q_0 \sin(\omega t)$ módon adódik, az áram pedig ennek deriváltja, $I = I_0 \cos(\omega t)$, ahol $I_0 = \omega q_0$. Legyen a dipólus hossza l (azaz a dipólnyomaték amplitúdója $p_0 = q_0 l = I_0 l / \omega$), ezzel kiszámítható az elektromos és a mágneses tér, illetve az ezek által elvitt energia (Poynting vektor) átlagos értéke a θ szög által kijelölt r irányban:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{\mu_0} \right\rangle = \frac{\omega^2 l^2 I_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \mathbf{e}_r = \frac{\omega^4 p_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \mathbf{e}_r \quad (51)$$

illetve a térszögre vett **kisugárzott teljesítmény** (figyelembe véve, hogy $dP = |\langle \mathbf{S} \rangle| r^2 d\Omega$)

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{\omega^4 p_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \sin^2 \theta \quad (52)$$

amelynek integrálja 4π térszögre (a $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ helyettesítéssel élve) a teljes kisugárzott teljesítmény: $P = \frac{\omega^4 p_0^2}{12\pi^2 \epsilon_0 c^3}$.

- Ebből kiszámítható a fény szabad elektronon történő szórásának, a **Thompson szórásnak** a hatáskeresztmetszete. Legyen a bejövő tér $E_0 \sin(\omega t)$, ennek energiaárama $|\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}| = c\epsilon_0 E_0^2 / 2$. Ez oszcillációra kényszeríti az elektront, amelynek mozgására $m_e \ddot{z} = -eE_0 \sin(\omega t)$ lesz igaz, azaz $z = eE_0 / (m_e \omega^2) \sin(\omega t) = z_0 \sin(\omega t)$, ahol $z_0 = eE_0 / (m_e \omega^2)$. A dipólmomentum amplitúdója a kitérés szorozva a töltéssel, $p_0 = ez_0 = e^2 E_0 / (m_e \omega^2)$. Ezt az (52) formulába helyettesítve megkapjuk $dP/d\Omega$ értékét, és mivel a hatáskeresztmetszet a bejövő energiaáram és a kisugárzott teljesítmény hányadosa, így a differenciális hatáskeresztmetszet az alábbiaknak megfelelően adódik:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{|\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}|} \frac{dP}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \right)^2 \sin^2 \theta = r_e^2 \sin^2 \theta \quad (53)$$

ahol

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} = \frac{ke^2}{m_0 c^2} = \frac{\hbar c \alpha}{m c^2} = 2,818 \text{ fm} \quad (54)$$

a klasszikus elektronsugár (a k Coulomb-állandóval illetve az α finomszerkezeti állandóval kifejezve), a teljes hkm. pedig $\sigma_{\text{Thomson}} = 8\pi r_e^2 / 3$.

- Itt azonban nem a szabad elektronon, hanem az atomban kötött elektronon történő szóródást vizsgáljuk, ez a Rayleigh-szórás. Itt az $m_e \ddot{z} = -m_e \omega_0^2 z - eE_0 \sin(\omega t)$ egyenlet lesz igaz (ha ω_0 az atom sajátrezgéséből adódó körfrekvencia). Ennek megoldása $z = eE_0/(m_e(\omega^2 - \omega_0^2)) \sin(\omega t)$, azaz $z_0 = eE_0/(m_e(\omega^2 - \omega_0^2))$, és így a dipólmomentum amplitúdója $p_0 = ez_0 = e^2 E_0/(m_e(\omega^2 - \omega_0^2))$. Az előzőekhez hasonlóan számolva a hatáskeresztmetszet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2} r_e^2 \sin^2 \theta \quad (55)$$

Ha (ahogy az a látható fény és a légkör atomjai esetén igaz) a bejövő sugárzás frekvenciája sokkal kisebb, mint az atom sajátfrekvenciája (azaz $\omega \ll \omega_0 \approx 1 \text{ eV}$) akkor

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4 r_e^2 \sin^2 \theta \quad (56)$$

illetve a teljes hatáskeresztmetszet is ennek megfelelően

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4 \cdot \sigma_{\text{Thomson}} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4 \frac{8\pi r_e^2}{3}. \quad (57)$$

- A Rayleigh-szórás sokkal gyengébb a Thomson-szórásnál, viszont erős, **negyedik hatványos** a frekvenciafüggése: emiatt van, hogy ég kék, a Nap sárga, a naplemente pedig piros (hiszen a nagyfrekvenciás kék fény sokkal erősebben szóródik, mint a piros fény – amely ködben is messzire látszódik). Az tehát, hogy az ég kék, a levegő atomosságából következik.
- Érdemes még megemlíteni, hogy a Rayleigh-szórás általánosságban az elektromágneses sugárzás aktuális hullámhosszával lényegesen kisebb részecskéken való szórását jelenti – az előzőekben tárgyaltuk a polarizálható (avagy törésmutatóval rendelkező) gömbökön és dipólusokon történő szórást is, de a lényeg mindkét esetben az, hogy a teljes hatáskeresztmetszet a hullámhossz negyedik hatványával fordítottan arányos.

2.5. Energiaeloszlások gázokban

- Egy makroszkópikus anyag makroállapotának a megfigyelhető tulajdonságait nevezzük, míg mikroállapotait a benne lévő részecskék konkrét elhelyezkedése adja meg. Egyszerű példa: négy érmét eldobunk, a „fele fej, fele írás” egy makroállapot, amely hat különböző mikroállapot esetén valósul meg. Ha nem kétféle, hanem k féle állapot lehet, és N részecskénk van, akkor az $\{N_1, N_2, \dots, N_k\}$ eloszlás (ahol $N = \sum_i N_i$) lehetséges mikroállapotainak száma

$$W_k(N_1, N_2, \dots, N_k) = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_k!}. \quad (58)$$

hiszen az $N!$ -féle sorrenden belül az egyes állapotban lévő N_i számú részecske sorrendje érdektelen, így $N_1!$ -sal oszthatunk (ezt hívjuk ismétléses permutációnak). Az adott makroállapotot létrehozó mikroállapotok száma tulajdonképpen a makroállapot valószínűségét jelenti, ha minden mikroállapot azonos valószínűségű. A W függvénynek (a k alsó indexet innentől elhagyjuk) $N_1 = N_2 = \dots = N_k$ esetén maximuma van, ezért ez valósul meg a legnagyobb valószínűséggel (például $W(9, 0, 0) = 1$, míg $W(3, 3, 3) = 1680$, tehát ez utóbbi $1680 \times$ valószínűbb).

- Ennek a $W(N_1, N_2, \dots, N_k)$ függvénynek a $\sum_i N_i = N$ és $\sum_i N_i E_i = E$ feltételek mellett maximumát keressük tehát. Először is a $N! \approx N^N e^{-N}$, azaz $\ln N! = N \ln N - N$ Stirling-formulával átalakítjuk W -t:

$$\ln W = \ln N! + \ln \left[\prod_i \frac{1}{N_i!} \right] \approx N \ln N - N + \sum_i (N_i - N_i \ln N_i) \quad (59)$$

és miután egy függvény szélsőértékénél a logaritmusának is szélsőértéke van, így ennek maximumát keresve W maximumát, azaz a legvalószínűbb állapotot találjuk meg. Ezután a

maximumot a Langrange-multiplikátorok módszerével keressük, tehát a

$$f(N_1, N_2, \dots, N_n) = \ln(W) + \alpha(N - \sum N_i) + \beta(E - \sum N_i E_i), \text{ azaz} \quad (60)$$

$$f(N_1, N_2, \dots, N_n) = \text{const}(N) + \sum_i (-N_i \ln N_i + (1 - \alpha)N_i - \beta N_i E_i) \quad (61)$$

függvény összes parciális deriváltját tesszük egyenlővé nullával, ahol E_i az adott héjhoz tartozó energia. Ezt az egyes N_i -k szerint deriválva a $-\ln N_i + \alpha + E_i \beta$ egyenletre jutunk. Innen

$$N_i = e^{-\alpha - \beta E_i} \quad (62)$$

azaz a fenti kifejezés lesz az i . állapot multiplicitása a legvalószínűbb eloszlás esetén. Az α értéke egyfajta normálást ad, és megkapható a $\sum_i N_i = N$ egyenletből:

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \quad (63)$$

azaz

$$N_i = N \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}. \quad (64)$$

- A termodinamika alapjainak ismeretében ugyanakkor közvetlenül meghatározhatjuk α és β értékét is. Vegyük figyelembe, hogy ha az m tömegű részecskék mozgási energiája adja az E_i értékeket, akkor valójában $E_i = mv_i^2/2$. Ezzel áttérhetünk megszámlálhatatlanul sok állapotra, azaz az i . mikroállapot helyett a $\vec{v}$ sebességhez tartozó állapotról beszélünk, amely körül egy infinitezimális $d^3\vec{v}$ állapottérbeli térfogatban $N(\vec{v})d^3\vec{v}$ részecske van – azaz $N(\vec{v})$ egyfajta állapotsűrűséget jelöl. Ekkor

$$\sum_i N_i = N \text{ helyett } \int N(\vec{v})d^3\vec{v} = \int e^{-\alpha - \beta mv^2/2} 4\pi v^2 dv = N \quad (65)$$

adódik, ahonnan $e^{-\alpha} = N(\beta m/2\pi)^{3/2}$, azaz a sebességeloszlás

$$N(\vec{v}) = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-\beta \frac{mv^2}{2}\right) \quad (66)$$

- Innen az $mv^2/2$ energia várható értéke

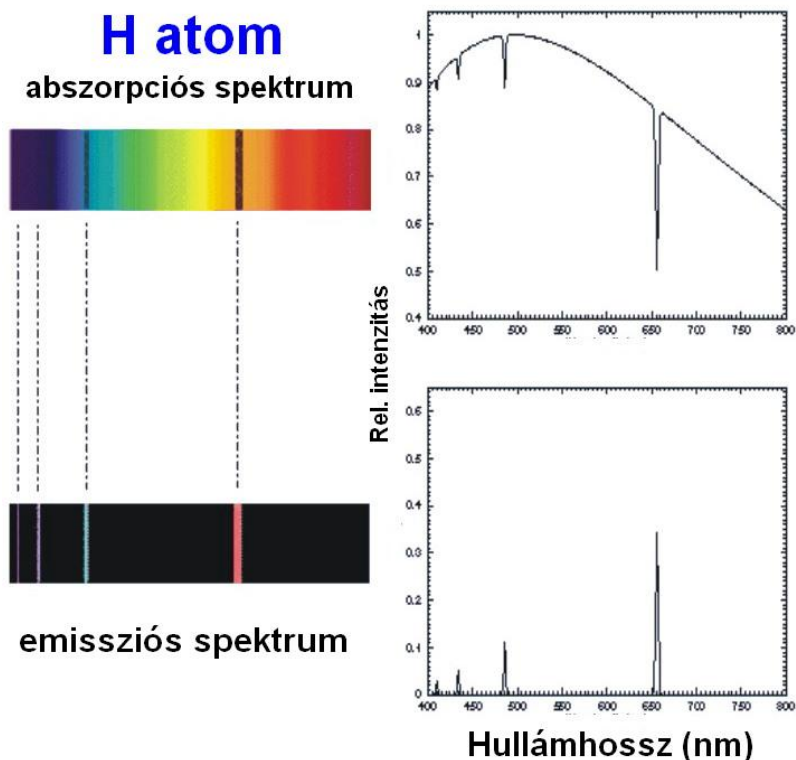
$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \int \frac{mv^2}{2} 4\pi v^2 dv = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \int \frac{mv^2}{2} \exp\left(-\beta \frac{mv^2}{2}\right) v^2 dv = \frac{3}{2\beta} \quad (67)$$

ami az ekvipartíció tétele miatt éppen $3kT/2$ (három dimenzióban), úgyhogy $\beta = 1/kT$.

- A **Maxwell–Boltzmann-féle sebességeloszlás** tehát

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) 4\pi v^2 \quad (68)$$

- Az átlagos sebesség értéke $\sqrt{8kT/(m\pi)}$, és ahogy vártuk, a négyzetes sebességátlag $\sqrt{3kT/m}$. Tipikus várható sebességek nulla Celsius hőmérsékletű gázra: 1693 m/s (hidrogén), 567 m/s (víz), 536 m/s (neon), 454 m/s (nitrogéngáz), 425 m/s (oxigén), 362 m/s (szén-dioxid), 170 m/s (higany).
- A gázokban megfigyelhető szabad úthossz vizsgálható ez alapján. Ha a részecskék sugara r_0 , akkor az ütközési hatáskeresztmetszet $\sigma = 4r_0^2\pi$. Ha egy nagyon gyorsan mozgó részecskét veszünk, a szabad úthossza $\lambda = 1/(\sigma n)$. Ha az összes részecske egyformán mozog, akkor $\lambda = 1/(\sqrt{2}\sigma n)$. Innen az időegységenkénti ütközések száma v/λ , erre és a szabad úthosszra tipikus értékek: 0,0839 mm és 43,5 millió (hidrogén), 0,0454 mm és 21,2 millió (levegő), 0,0395 mm és 26,6 millió (széndioxid). Nagy vákuumban (mikrobár értékek mellett) ez néhány méteresre is nőhet.



7. ábra. A H atom adszorpciós és emissziós spektruma.

2.6. Feketetest-sugárzás

- Wien 1896-ban az is hullámhosszak esetén vett spektrális sűrűségére (a felületre és térszögre jutó mérőleges sugárzási teljesítmény hullámhossz- vagy frekvencia-egységenként) a $\frac{2hc^2}{\lambda^5} e^{-\frac{hc}{\lambda kT}}$ összefüggést vezette le.
- Rayleigh 1900-ban nagy hullámhosszú spektrális sűrűségére a $\frac{2ckT}{\lambda^4}$ értéket vezette le, a levezetést 1905-ben Jeansszel együtt pontosították.
- Planck ebből empirikusan a $\frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$ összefüggést adta meg. Magyarázatként a Boltzmann-eloszláshoz hasonló módszert választva feltette, hogy az összes energia $hc/\lambda = h\nu$ egységekben helyezhető el egy rezonátor módusain. Ezen egységeket azonosította később 1905-ben Einstein fotonokként. A magyarázatot a kvantumfizikai részben kerül elő részletesen, itt is megemlítenő azonban, hogy a helyes Planck-képlet csak akkor adódik, ha a rezonátor módusain diszkrét energiaértékek lehetségesek csak - folytonos energiaeloszlással helytelen eredmény adódik.

3. Az atomok energiaszintjei

3.1. Gázok abszorpciós és emissziós vonalai

- Gázok és gőzök elektromágneses válaszra készítését vizsgálták az **elnyelési spektrum** (amelyet úgy kapunk meg, hogy a bejövő E-M sugárzásból „eltűnt” komponenseket vesszük) és a **kibocsátási spektrum** (amelyet a gerjesztett anyag, például forró gáz bocsát ki) mérésével. Ezek tanulmányozása alapján kiderült, hogy a spektrumok szerkezete fix, az atomokra jellemző. Elsőként Fraunhofer vizsgálta 1814-ben a Nap sugárzásában megjelenő „vonalakokat”: 574-et talált. A vonalakat nem csak a látható tartományban (380 – 780 nm, avagy $7.9 \cdot 10^{14} - 3.8 \cdot 10^{14}$ Hz) kell keresni, de extrém kis hullámhossznál már folytonos a spektrum, illetve a rádió- és mikrohullámok esetében is. Összességében az a tapasztalat, hogy adott gázra az **emissziós és adszorpciós vonalak** ugyanott jelennek meg (lásd 7. ábra).

- Ma óriási adatbázisok állnak rendelkezésre, például a NIST (National Institute and Technology) oldalán is szabadon elérhetően. Ezek rengeteg információt tartalmaznak, például nátriumnak 10 és 1000 nm között 6174 vonala van, ebből a látható tartományban 628. A vonalak helye fix, viszont az intenzitása, szélessége (és egyáltalán, a láthatósága), és a mögöttük lévő háttér is függ a körülményektől (nyomás, hőmérséklet, lásd Doppler-kiszélesedés).
- Többatomos gázok spektruma sávokat tartalmaz: rotációs, vibrációs és egyéb gerjesztések is megjelennek, egyes vonalak összemosódnak. Szilárd testek gerjesztései még bonyolultabbak.
- Az egyatomos gázokra összességében tehát a következő megfigyeléseket tehetjük:
 - A vonalak helye az abszorpció és az emisszió színekében is **ugyanott van, az atomra jellemző**. Ez erős támasza annak, hogy az abszorpció spektrumokat saját frekvenciával rendelkező csillapított dipólusok kényszerrezgéseként, az emisszió spektrumokat pedig elektromos dipólusok szabadrezgéseként írjuk le. (A vonalak helyét a Doppler-hatás azért módosíthatja.)
 - Nagyon sok vonal található, növekvő frekvenciával csökken az intervallumuk, **szabályos sorozatok** választhatóak ki közülük.
 - Az adott atomra jellemző hullámhossz (kis rendszámú atomoknál 100-200 nm, nagy rendszám esetén több nagyságrendet változhat) alatt eltűnik a vonalas szerkezet, **foltyonos spektrumot** látunk. Ezen energiaszint felett bármekkora energiát felvehetnek az elektronok, hiszen az atom ionizálódik.
- A vonalak felfedezésekor az úgynevezett **spektrum-termeket** vezették be, τ_α , $\bar{\tau}_\alpha$ sorozatokban. Ezekkel egy adott frekvenciát a $f_{\alpha\beta} = |\tau_\alpha - \bar{\tau}_\beta|c$ értéként kaphatjuk meg. A τ értékek szokásos egysége a kayser, avagy cm^{-1} , és ez tulajdonképpen a hullámhossz inverze. Mivel ezek a termék egy additív konstansig adóttak csak, az egyiket nullának választhatjuk. Ez alapján például a La^{++} ion emissziós spektrumának vonalai (cm^{-1} egységben): 10885, 12114, 15748, 16977, 28424, 30043, 31272, 31520, 37236, 40332, 65097, 68193, 79393, 79641, 80870, 82489. Ezek felírhatóak 4+4 term segítségével:

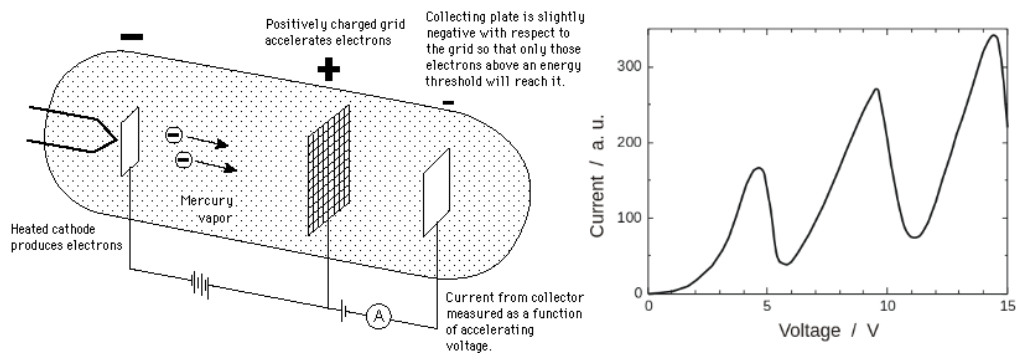
$\tau, \bar{\tau}$	42015	45111	93232	94461
13591	28424	31520	79641	80870
82347	40332	37236	10885	12114
110210	68193	65097	16977	15748
124504	82489	79393	31272	30043

Rengeteg ehhez hasonló mátrix-szal összegezték a tapasztalatokat. A gyakorlatban azonban nem minden termkülönbséget lehetett megfigyelni – ezt ma azzal magyarázzuk, hogy az elektromos dipólátmenet valószínűsége lényegesen nagyobb, mint a kvadrupólé, vagy akár a mágneses átmeneteké (amelyeket az átmenet részletes tulajdonságai különböztetnek meg, és később szelekciós szabályok néven ismerjük meg őket).

- A **hidrogén spektrumának** elemzése során kiderült, hogy a τ és $\bar{\tau}$ termék ugyanazok, méghozzá $\tau_n = 110\,000 \text{ cm}^{-1} \frac{1}{n^2}$, és ezekből össze lehet rakni az összes vonalat. Balmer 1884-ben fedezte fel az $f_{n,2} = \tau_n - \tau_2$ vonalakat, ezek a látható tartományban vannak. 1904-ben Lyman felfedezte az $f_{n,1} = \tau_n - \tau_1$ sorozatot, ez az UV tartományban van. Később jött a Paschen-Bach ($n, 3$), Brackett ($n, 4$) és Pfund ($n, 5$) sorozat. Ezeket úgy rajzolhatjuk le, mint $\frac{1}{n^2}$ és $\frac{1}{m^2}$ erősségű termék különbségeit. Ennek felismerésében fontos lépés volt a Rydberg-Ritz féle kombinációs szabály (1908-ból, Rydberg formulája alapján alkotta meg Ritz), amely kimondta, hogy bármely vonal frekvenciája más vonalak összege vagy különbsége alapján adódik, hiszen itt $(\tau_n - \tau_m) = (\tau_n - \tau_k) - (\tau_m - \tau_k)$. A $110\,000 \text{ cm}^{-1}$ konstans c -vel szorozva $3,3 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$, ez h -val szorozva $2,2 \cdot 10^{-18} \text{ J}$, ami 13,6 eV.

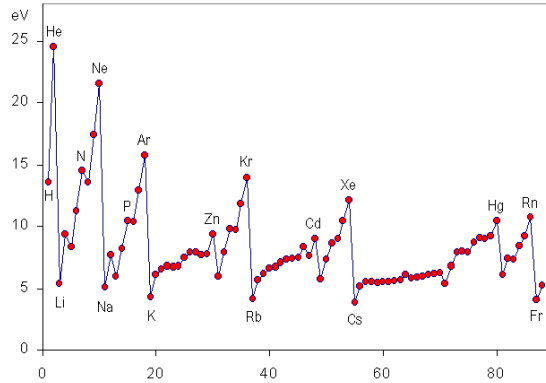
3.2. Elektron-atom ütközések

- Az atomok energiaszintjeit (amelyet a fix kilépési munkák is indikálnak) elektronok és atomok ütköztetésével vizsgálhatjuk. Erre szolgál a **Frank-Hertz kísérlet**. Ebben vákuumcsőben három elektródát helyeztek el: egy elektron-kibocsátó katódot, egy gyorsítófeszültséget létrehozó hálót, és egy előbbihez képest enyhén pozitív anódot, lásd 8. ábra. A létrejött tér tehát a rácson enyhe minimummal rendelkezik, ezután megint nő. Így a rácsot elhagyó elektronok számára egy minimális elérendő energia-gát jön létre.



8. ábra. A Frank-Hertz kísérlet. Balra a kísérleti elrendezés, jobbra pedig a mért áram a gyorsító-feszültség függvényében.

- A kísérletben az anódáramot mérték a gyorsítófeszültség függvényében. Azt találták, hogy kis feszültségek esetén az áram erősen nő a feszültséggel, majd egy bizonyos értéknél (4.9 V higanygőznél, 19 V neonnál, 1.4 V Cs esetén) az áram erősen visszaesik. Ezután megint növekedés látható, de az eredeti érték többszöröseinél mindig visszaesés tapasztalható, lásd 8. ábra. Frank és Hertz úgy magyarázta a jelenséget, hogy alacsony feszültségnél a gyorsított elektronok energiája kicsi, ezért tisztán rugalmasan szóródnak a gáz atomjain (és mivel sokkal könnyebbek azoknál, ilyenkor az összes energiájuk megmaradt). A feszültség növelésével nő az anódot elérni képes elektronok száma. Az adott U feszültség elérése esetén az elektronok energiája eU , és ha ez eléri azt a bizonyos kritikus értéket, gerjeszthet egy elektront, elvesztve az energiáját (és átadva egy kötött elektronnak). Ezután már nem tudja legyőzni a rács után jövő enyhény negatív teret. Ahogy megint növeljük a feszültséget, az elektronok már *két* rugalmatlan ütközést is szenvedhetnek, és így tovább.
- Neon gáz esetén a kritikus feszültség elérésének helyén (a rácshoz közel) narancssárga fény jelenik meg, majd ez egyre hátrébb kúszik, végül dupla feszültségnél két fénylő régió jelenik meg, és így tovább. Ennek oka, hogy a gerjesztett atomok visszatérnek az alapállapotba. A Hg energiájának 254 nm hullámhosszú fény felel meg, így az nem látható.
- A kísérlet bonyolult, mert jól definiált energiájú, intenzív, kollimált nyalábra van hozzá szükség, azaz egyfajta elektronágyúra van szükség. Emellett a gáz nyomása igen alacsony kell hogy legyen, centiméter körüli szabad úthosszal, jól ismert sűrűségű egyatomos gázból, amelyben lehetőleg kicsi a sűrűségfluktuáció (azaz mégsem lehet nagyon kicsi a sűrűség).
- Megint atomszámmal és elektronszámmal arányos jelenséget látunk, azaz itt is elemi folyamatot kell feltételeznünk. Ma is végeznek ezzel kísérleteket, a valódi áram-feszültség függés bonyolultabb, sok csúccsal rendelkezik az elektronszerkezetnek megfelelően. Atomok és molekulák különböző kölcsönhatásainak teljes hatáskeresztmetszete mérhető így. Az alapállapotba való visszatérést sokszor fénykibocsátás kíséri, és ez a legjobb módszer az energiaszintek tanulmányozására - a mechanizmustól függetlenül a kibocsátott foton energiája közvetlenül az energia-szintkülönbségnek felel meg.
- A fenti kísérleti tapasztalatok összegzéseként azt mondhatjuk, hogy az atomoknak meghatározott, diszkrét energiával bíró stacionárius állapotai vannak. Ezen **alapállapot** felett **gerjesztett állapotok** vannak, amelyek egyre sűrűbben helyezkednek el. Az atomokat adott energia felett **ionizálni** lehet. Fotoeffektussal (ennek leírását ld. az 5.1. alfejezetben) és a Frank-Hertz kísérlettel is megfigyelhető a leggyengébben kötött elektron kötési energiája, azaz az ionizációs energia. Efelett új kritikus energiák jelennek meg, kötöttebb elektront kilökve vagy többszörös ionizációt létrehozva. Az első ionizációs energia az alkáliaktól a nemesgázokig erősen nő, de nagyobb atomokra valamelyest csökken, tehát fűrészfog jellegű függvény, amely tipikusan 5-25 eV között van (lásd 9. ábra). A legnagyobb értéket a héliumnál veszi fel. Egy adott pályán lévő elektron kötési energiája a rendszámmal nő, és erősen csökken az elektronpálya függvényében: a külsőbb elektronok sokkal kevésbé kötöttek. Ennek kiszámítása a kvantummechanika nyelvén lehetséges, de ott is csak numerikusan.
- A Rutherford-modellen tehát túl kell lépni, hiszen abban tetszőleges energiájú pályák megen-



9. ábra. Az atomok első ionizációs energiája: leggyengébben kötött (külső) elektron energiája.

gedettek, továbbá egy másik megoldatlan probléma is felmerül: a körpályán mozgó, és ezért gyorsuló töltések miért nem sugároznak? Ezekre a problémákra ad választ a Bohr-modell.

3.3. A Bohr-modell

- **Bohr** az előző alfejezet végén olvasható kérdésekre konzisztens választ adó modellt épített fel. Ennek lényege:
 - az elektronok perdülete csak $L = mvr = pr = n\hbar$ lehet,
 - az ilyen pályákon nincsen gyorsulásból fakadó sugárzás.

Minden pályának ebből adódó (Coulomb+mozgási) energiaszintek felelnek meg, és a fény elnyelése és kibocsátása ezen pályák közötti átmenetnek felel meg. Az első posztulátumot továbbá úgy is meg lehet fogalmazni, hogy a $2r\pi$ kerületű pályákra éppen egész számú hullám fér rá, azaz $n\lambda = 2r\pi$. Ez azt jelenti, hogy a pályákon kvázi **állóhullámok** jelennek meg. A modell jó eredményre vezet!

- Az energiaszinteket úgy lehet kiszámolni, hogy kiindulunk a Coulomb-erő (a Ze töltésű mag és az e töltésű elektron között) és a pályán tartó centripetális erő egyenlőségéből, azaz

$$k \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} = \frac{p^2}{mr}, \text{ innen} \quad (69)$$

$$p^2 r^2 = kZe^2 m r = n^2 \hbar^2, \text{ tehát} \quad (70)$$

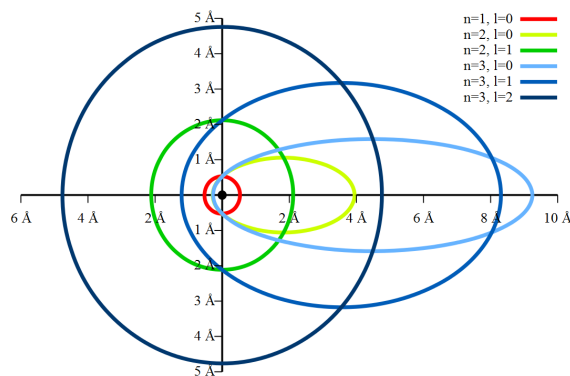
$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{kZe^2 m}, \text{ és } v_n = \frac{kZe^2}{n\hbar}. \quad (71)$$

Mivel az adott elektron pályájához tartozó energia $-kZe^2/r$, a mozgási energia pedig $mv^2/2$, ezért az energiaszintek a kettő összegéből

$$E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{kZe^2}{r} = \frac{mk^2 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} - \frac{mk^2 Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{mk^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2} = -\frac{E_0 Z^2}{n^2}. \quad (72)$$

Az **átmeneti energiaszintek** $n^{-2} - m^{-2}$ rendszere ezzel kiválóan magyarázható, és a konkrét értékek is stimmelnek, ha az elektron tömege helyett az $(m_e m_p)/(m_e + m_p)$ kifejezést írjuk be (ez persze csak ezrelékes korrekció). Az első ionizációs energia így hidrogén esetén $E_0 = -13,6$ eV, $Z > 1$ esetén pedig $E_0 Z^2$.

- Probléma, hogy **többelektros rendszerekben**, ahol $Z \neq 1$, a modell nem igazán működik. Vannak apróbb javítások pl. **Moseley** felfedezi, hogy az atomok elektronokkal való bombázása esetén észlelt legerősebb röntgen vonal (a K-alfa vonal) empirikusan úgy írható le, hogy a rendszámot Z helyett $Z - 1$ -gyel helyettesítjük, és az 1. és 2. pálya közötti átmenetet vesszük. Ezt a külső elektronok belsőkre vonatkoztatott árnyékoló hatása magyarázza, ami túlmutat a Bohr-modellen.



10. ábra. Hidrogénatom elektronályái a Bohr-Sommerfeld modellben.

4. Mikrorészecskék impulzusmomentuma

4.1. A Sommerfeld–Wilson-féle kvantálás

- Bár a Bohr-modell igen sikeres a hidrogén spektrumának leírásában, a spektrum $o(10^{-4})$ nagyságrendű finomszerkezetét nem magyarázza meg, illetve egy adott energiájú elektron csak adott nagyságú perdülettel rendelkezhet, ugyanakkor a perdületvektor iránya tetszőleges lehet – ennek ellentmond a Stern–Gerlach-kísérlet, ahogy majd később látni fogjuk. Sommerfeld elliptikus pályákról szóló javaslata (pontosabban az emögött rejlő kvantálási elv) ezen problémák leküzdése céljából született. Ugyan ez a magyarázat ma már meghaladott, de történeti fontossága miatt jelen jegyzetben is tárgyaljuk.
- A Sommerfeld–Wilson-quantálás abból indul ki, hogy a rendszer **Hamilton-féle leírásában** a q koordináthoz p kanonikus impulzus adódik. Ezekkel az egyes impulzuskomponensekre

$$\int_{H(p_i, q_i)=E} p_i dq_i = n_i h \quad (73)$$

kvantálás teendő fel (ahol az integrál egy periódusra írandó fel, állandó energia mellett).

- Ennek illusztrálásaként vegyünk egy egydimenziós oszcillátort. Erre $H = p^2/2m + Dx^2/2$, ahonnan $\dot{x} = p/m$ és $\dot{p} = -Dx$, ahonnan a mozgásegyenlet $\ddot{x} + \omega x = 0$ és $\omega^2 = D/m$, azaz $x = x_0 \sin(\omega t)$. A kvantumfeltétel pedig

$$\int p dx = \int m \dot{x} dx, \quad (74)$$

$$\text{ami az } x = x_0 \sin(\alpha) \text{ helyettesítéssel} \quad (75)$$

$$m\omega x_0^2 \int \cos^2(\alpha) d\alpha = m\omega \pi x_0^2 = nh, \text{ azaz}$$

$$x_0^2 = \frac{nh}{\omega m \pi}, \text{ ahonnan} \quad (76)$$

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} Dx^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 = n\omega \hbar. \quad (77)$$

Két dimenzióban $D_x = D_y$ esetén $\omega_x = \omega_y = \omega$, és ekkor itt is $E_n = n\hbar\omega$, de $n = n_x + n_y$, azaz pl. az $n = 1$ energiaszint kétszeresen degenerált ($n_x = 0, n_y = 1$ vagy fordítva).

- A hidrogénatom esetét felírva, gömbi koordináta-rendszerben a koordináták r , ϕ és θ , amelyekkel a rendszer hamiltonija

$$H = \frac{mv^2}{2} - \frac{a}{r} = \frac{m}{2} \left[\dot{r}^2 + (r\dot{\phi})^2 + (r\dot{\theta} \sin \phi)^2 \right] - \frac{a}{r} \quad (78)$$

ahol $a = ke^2 = \alpha \hbar c$ (és k a Coulomb-állandó, e az elemi töltés, α a finomszerkezeti állandó).

A kanonikus impulzusok az alábbiaknak megfelelően adódnak:

$$p_r = \frac{\partial H}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad (79)$$

$$p_\phi = \frac{\partial H}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi}, \quad (80)$$

$$p_\theta = \frac{\partial H}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta} \sin^2 \phi. \quad (81)$$

Ezzel a hamiltoni így is felírható:

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} + \frac{p_\theta^2}{r^2 \sin^2 \phi} \right) - \frac{a}{r} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{a}{r}, \quad (82)$$

ahol bevezettük az L perdületet. Innen az $E = H$ feltételből ki lehet fejezni az egyes koordinátákat, majd a (73) egyenletet kell alkalmazni ($r = A(1 - e^2)/(1 - e \cos \phi)$ egyenletű ellipszisekre, ahogy azt a klasszikus fizika is leírja). Az így kapott kvantumfeltételekből az adódik, hogy

- Az L perdület $\hbar$ egész számú többszöröse lehet csak, azaz $L = l\hbar$.
- A p_θ kanonikus impulzus éppen a perdület z -vetülete, konstans, és egy m egész szám többszöröse lehet, azaz $p_\theta = m\hbar$
- A p_r kvantumszámra egy n_r konstans adódik, amelyből az energia $E_n = -E_0/n^2 = -E_0/(n_r + l)^2$ módon számítható ki (azaz $l \leq n$).

Az így adódó lehetséges pályákat lásd a 10. ábrán. Fontos különbség a Bohr-modellhez képest, hogy itt létezhetnek nulla perdületű pályák is, például a hidrogénatom alapállapotú elektronjának nulla a pályaperdülete. A modell másik fontos gondolata az impulzusmomentum iránykvantáltsága, amely szerint tehát a perdületvektor pályára merőleges vetülete csak $m\hbar$ értékeket vehet föl.

- A fentiekben leírt Sommerfeld-modell jelentős változásokat javasol a Bohr-modellhez képest, amelyeket a későbbiekben bemutatott kísérletek tesztelnek. Fontos még megemlíteni, hogy a hidrogénatom energiaszintjeinek kis felhasadásait is megadja ez a modell (pontosabban annak relativisztikus általánosítása), méghozzá a vonalfelhasadás az $\alpha = ke^2/\hbar c$ finomszerkezeti állandó négyzetével lesz arányos. Erről a fontos jóslatról is bővebben beszélünk majd a későbbiekben.

4.2. Az atomok mágneses momentuma és perdülete

- Az impulzusmomentumhoz klasszikusan **mágneses momentum** tartozik! A mágneses momentum definíciója alapján kör alakú áramhurokra $\vec{\mu} = I\vec{A}$, amiből az e töltés és a $2\pi\hbar/v$ periódusidő miatt $I = ev/(2\pi\hbar)$, és $A = r^2\pi$ alapján általánosítva (a perdület keringő részecskére vonatkozó $L = mrv$ definíciójával) a helyes

$$\vec{\mu} = \frac{e\vec{L}}{2m} \quad (83)$$

formulához jutunk. Eszerint tehát ha a perdület iránya és nagysága is kvantált (ahogy Sommerfeld állította), akkor a mágneses momentum is kvantált. A momentumhoz tartozó energia B mágneses térben $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, tehát adott B tér mellett az energia a mágneses momentum abba az irányba eső vetületét méri. Az ebből adódó erő $\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$, ami adott z irányú tér esetén $\vec{F} = \mu_z \vec{\nabla} B_z$. Ha tehát a perdület kvantált, akkor egy atomnyaláb egyes atomjaira diszkrét, különböző mértékű erő hat, így a nyaláb diszkrét komponensekre eshet szét.

- Bevezetve az $\mu_B = e\hbar/2m$ Bohr-magnetont, a $\mu = \mu_B L/\hbar$ összefüggés lesz érvényes, azaz ha $L = l\hbar$, akkor $\mu = l\mu_B$, és $L_z = m\hbar$ esetén a $\mu_z = m\mu_B$ értékek lesznek lehetségesek. Bevezethető továbbá a **giromágneses faktor**, amely az ettől való eltérést vizsgálja, ezzel $\mu = g\mu_B l$. Az elektron keringéséből fakadó momentumára valóban $g = 1$, de később kiderül, egyes részecskékre egész más értékek is adódhatnak.

- Ez alapján végezte el **Stern és Gerlach** 1922-ben a híres kísérletét (lásd 11. ábra). A kísérletben inhomogén nagyságú, de mindenhol z irányú B mágneses térbe vezettek atomnyalábot, amelynek momentumára így erő hatott. Ekkor a v sebességgel l távolságot megtevő atomok θ eltérülési szöge így kapható meg ($\perp$ a z -re merőleges síkot jelöli):

$$F = ma_{\perp} = \mu_z \nabla B, \quad (84)$$

$$v_{\perp} = a_{\perp} t = \frac{\mu_z \nabla B}{m} \frac{l}{v}, \quad (85)$$

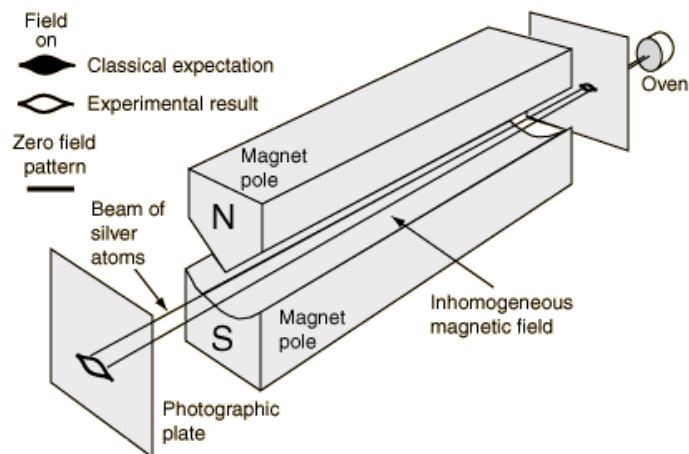
$$\theta = \frac{v_{\perp}}{v} = \frac{\mu_z \nabla B l}{mv^2}. \quad (86)$$

adott μ_z -hez (azaz adott irányú perdülethez) adott eltérés tartozik tehát.

- A kérdés az volt, hogy az abszolútértékben μ momentummal rendelkező ezüst atomnyaláb **felhasad-e** különböző, diszkrét μ_z értékű nyalábokra, vagy a $\pm\mu$ között tetszőleges értéket vesz-e fel (azaz megerősíti vagy cáfolja-e mérés a perdület és így a mágneses momentum kvantáltságát). Elsőre túl nagy (és ezért átfedő) volt a felhasadás eredményeképpen létrejövő két folt, de középen minimumot észleltek, ami már bizonyítéknak tűnt. Aztán a nyalábot leszűkítő kollimációs rést kör alakúról vékony téglalap alakúra cserélték, és így már megjelent a két különálló folt. Más nyalábokkal is hasonló volt a tapasztalt, komponensek távolsága állandó, elrendezésük szimmetrikus a középvonalra, a csoportok intenzitása egyenlő.
- Otto Stern bevezetője a kísérlethez 1921-ben: „ha sikerül végrehajtani, a kísérlet eredményeként egyértelműen dönthetünk a klasszikus és a kvantumelméleti kép között”. Sommerfeld elmélete az iránykvantálásról nem volt teljesen helyes, de láthatólag a kísérleteket előhívó elmélet lehet helytelen, attól még a kísérlet eredménye korszakalkotó áttöréseket eredményezett. A részleteket sokára sikerült tisztázni csak, a spin elmélete is kellett hozzá.
- Pauli kommentárja: „Most már talán a hitetlen Stern is meggyőződhet az iránykvantálásról” (1922-ben írja ezt Gerlachnak szóló levelében).
- Az egyszerű iránykvantálás helyett a helyes magyarázat az, hogy ha a perdület értéke $l\hbar$, akkor $2l + 1$ lehetőség van a z irányú vetületére, $l\hbar$ és $-l\hbar$ között, és μ_z is ennek megfelelő értékeket vesz fel.
- Monoenergiás nyalábbal végezve a kísérletet a konkrét atom függvényében többféle kimenetelt tapasztalhatunk, pl a hélium nem térül el, H és Ag két komponensre bomlik, N négy komponensre, O ötre. Ugyanakkor $2l + 1$ mindig páratlan, tehát hogyan lehetséges páros számú részre való felhasadás? És az $l = 0$ állapotban lévő hidrogén hogyan hasadhat fel? Az elektron pályájából adódó perdülete itt nulla, de mégis van valami mágneses momentuma! Olyan, mintha az elektronnak lenne egy saját perdülete, a pályától függetlenül!
- Igazolandó továbbá, hogy a fentiekben mért mágneses momentumok valóban az atomok perdületével vannak kapcsolatban! Az **Einstein – de Haas kísérlet** (lásd 12. ábra) ezt a relációt próbálta ellenőrizni (a felhasadásból adódó következtetés független vizsgálataként). Einstein az 1914-es Berlinbe való érkezésekor (a Birodalmi Fizikai és Technikai Intézetben kezdett dolgozni) kihasználta az itt fellelhető jelentős kísérleti infrastruktúrát, és kollégájával, a holland de Haasszal kidolgozta a következő kísérletet. Feltette, hogy a ferromágneses anyag mágnességét az atomok mágneses momentuma okozza, amelyet viszont a perdületük, és így, ha átfordítjuk egy elektromágnes polarizációját, akkor a perdület is megváltozik, amelyet viszont megfigyelhetünk.
- Ferromágneset függesztett fel vékony torziós szárra, amelyre tükröt erősítettek, hogy a forgását egy lézer segítségével könnyű legyen megfigyelni. A ferromágnesre tekercset csévelt, és az ebben folyó árammal állította be (vagy fordította át) a mágnes atomjainak mágneses momentumát, és ezzel perdületét. A mágneses momentum és az impulzusmomentum változásának hányadosát vizsgálta. Ha átfordulásról van szó, akkor ez a

$$\frac{\Delta\mu_{\text{teljes}}}{\Delta L_{\text{teljes}}} = \frac{2N\mu}{2NL} = \frac{\mu}{L} \quad (87)$$

ha N darab L perdületű és μ mágneses momentumú atom található a rúdban. Tehát a rúd mágneses momentumának és a perdületének megváltozásán keresztül tulajdonképpen az atomok mágneses momentumának és perdületének arányát vizsgálhatjuk. Amennyiben feltesszük,

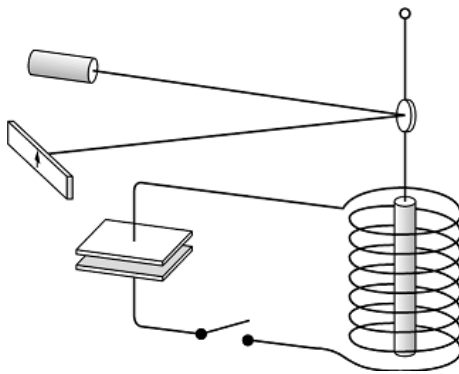


11. ábra. A Stern-Gerlach kísérlet.

hogy a két mennyiség a fenti $\mu = g\mu_B L/\hbar$ módon függ egymástól, akkor a kísérlet eredménye valójában $ge/2m$, tehát a giromágneses faktort mérhetjük. Ennek értéke a tapasztalat szerint jelentősen eltér egytől!

4.3. Az elektron sajátperdűlete, a spin

- Magyarázatra szorul a páros számú nyalábra hasadás a Stern-Gerlach kísérletben, azon belül a hidrogénnyaláb kettéhasadása nulla perdület mellett, továbbá az Einstein–de Haas kísérlet eredménye is. Kiderült, hogy mindezeket az elektron belső tulajdonsága kell, hogy okozza, egyfajta belső perdűlete, amelyet **sajátperdületnek**, **spinnek** neveztek el. A spin a (pálya)perdülethez hasonló tulajdonság, ugyanazok a tulajdonságai, a kvantummechanikai operátoroknak is. Ugyanúgy a teljes értéke és egy vetülete egyszerre mérhető, és előbbi mindig $S = \hbar/2$ értéket vesz fel, azaz az ennek megfelelő kvantumszám $s = 1/2$. A spin vetülete $S_z = \pm\hbar/2$ lehet, azaz $s_z = \pm 1/2$. A spinhez tartozó mágneses momentumról azonban kiderül, hogy $\mu = e\hbar/m$ a nagysága, és a g giromágneses faktort bevezetve a Bohr-magnetonnal kifejezve $\mu = g\mu_B s$, így $\mu_B = e\hbar/2m$ miatt $g = 2$. Ezt klasszikusan lehetetlen megmagyarázni (lehetséges különböző töltés- és tömegeloszlású gömböt felíró félklasszikus számolással próbálkozni, de lényegében sikertelenül).
- A Pauli-egyenlet adja meg majd ennek első leírását, amely a Schrödinger egyenlet Pauli-féle módosítása, feles spinű részecskék leírására. Később a Dirac-egyenlet, amely a relativisztikus kvantummechanika alapegyenlete, természetesen tartalmazza a feles spint és a $g = 2$ összefüggést. Ma kísérletileg úgy tudjuk, hogy $g \approx 2.0023$, és kb. 12 értékes jegyig mérhető. Mérése ma is abszolút aktuális, ugyanis ez az úgynevezett finomszerkezeti állandóhoz kapcsolódik. Kvantumelektrodinamikából extrém pontossággal megkapható a fenti érték, méghozzá a foton-elektron kölcsönhatás perturbációjának vizsgálatából. Általában az anomális mágneses momentumot fejezik ki az $a = (g - 2)/2$ kifejezéssel, amely körülbelül $\alpha/2\pi$ nagyságú – ezt a becslést az elektron-foton kölcsönhatás ún. egyhurok-korrekciójából lehet megkapni (ebben az elektron és a foton úgy hat kölcsön, hogy először az elektron kibocsát egy fotont, utána kölcsönhat a másik fotonnal majd elnyeli a korábban kibocsátottat). Az a paraméter 2008-as mért értéke $(1159\,652\,180.73 \pm 0.28) \times 10^{-12}$. Számolásból ettől $(2 \pm 7) \times 10^{-12}$ mértékű eltérést lehet találni. A számolás alapja a kvantum-elektrodinamika, az elektromágnesség relativisztikus kvantumtérelmélete, ez tehát a világon a legpontosabban ellenőrzött elmélet.
- Minden részecskének van spinje, $\hbar/2$ egész számú többszöröse lehet. Ezen belül megkülönböztetünk feles és egész spinű részecskéket, előbbieket fermionnak, utóbbiakat bozonnak hívjuk, és érdekes módon fundamentálisan más tulajdonságaik vannak. Az elektron, proton, neutron, illetve az őket felépítő kvarkok is $1/2$ spinűek, csak a kölcsönhatást közvetítő részecskéknek (foton, gluon) egész a spinje. Az összetett részecskék, atomok, molekulák spinje is fontos, de ez gerjesztéssel változhat. Az alfa részecske spinje 0, gerjesztett magoké $80\hbar$ is lehet.



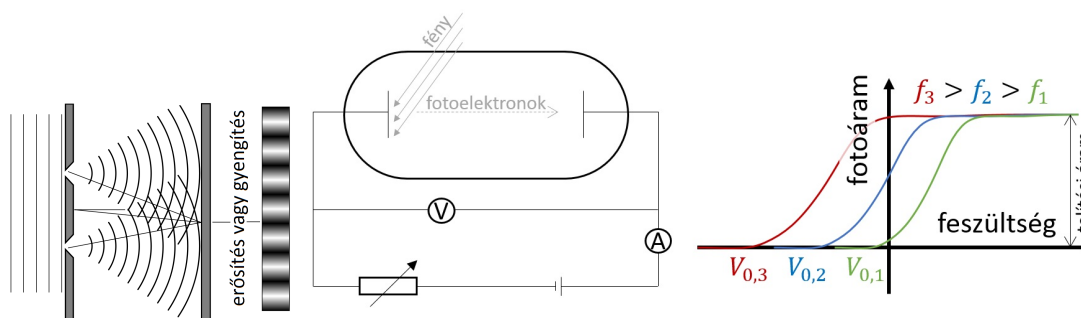
12. ábra. Az Einstein-de Haas kísérlet. Ferromágnest függesztünk fel vékony torziós szálra, amelyre tükröt erősítünk, hogy a forgását egy lézer segítségével könnyű legyen megfigyelni. A ferromágnesre tekercset csévélünk, és az ebben folyó árammal módosíthatjuk a mágnes atomjainak mágneses momentumát, és ezzel perdületét. A perdületmegmaradás miatt viszont ekkor elfordul a tekercs, ha a mágneses momentum és a perdület tényleg ugyanabból a jelenségből fakad.

- Később kiderül, hogy valójában a sajátperdület $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ (ahol $s = 1/2$), a pályaperdület $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, a teljes perdület pedig $J = L + S = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ értékeket vesz fel; ezek z -irányú vetületei pedig $S_z = s_z\hbar$ (ahol $s_z = \pm 1/2$, $L_z = m\hbar$, $J_z = m_j\hbar$ módon kvantáltak, és ez utóbbi esetben fennáll a $m_j = m + s_z$ összefüggés).
- Egy atomi elektront az energiaszintet jellemző egy darab szám helyett ezek után négy számmal írunk le: a főkvantumszám n , amely az energiaszintet fejezi ki, a perdület kvantumszáma l , a spin perdület-irányú vetületéhez tartozó kvantumszám s_z (amelyet néha s -sel is jelölünk, és értéke $\pm 1/2$ lehet), és a teljes perdülethez tartozó mágneses kvantumszám m_j .

5. Az elektromágneses sugárzás részecsketermészete

5.1. A fotoelektromos jelenség

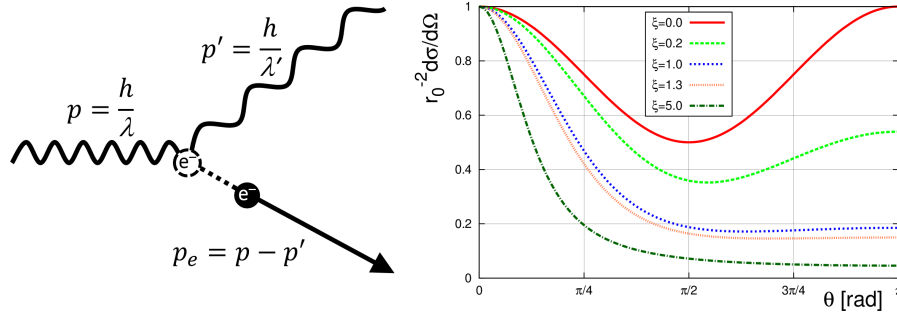
- **Fresnel és Young interferenciakísérletei** óta ismert, hogy a fény hullámként viselkedik: egy fénycsugár két részre osztása során keletkező fénycsugarak az ernyőig eltérő utat tesznek meg, így eltérő fázisban érkeznek az ernyőre. A fáziskülönbségtől függően erősítik vagy gyengítik egymást, így a hullámhossztól függő mintázat jön létre (lásd a 13. ábra jobb oldalát).
- Becquerel és a **fotovoltaikus hatás** 1839-es felfedezése irányította a figyelmet a fény és az elektromosság kapcsolatára (itt fény hatására a vezetési sávok között mozognak az elektronok). A **fotoelektromos jelenséget** Hertz fedezte fel 1887-ben, ennek során fémből elektronok lépnek ki fény hatására. Elektromágneses hullámok hatására keletkező szikrákat vizsgált. Észrevette, hogy a hullámok és a szikrakeletkezés közé helyezett üveglap lecsökkenti a szikrakeletkezést, míg egy kvarcból készült ablak nem: előbb ugyanis elnyeli az UV fényt. Lénárd Fülöp 1902-ben megfigyelte gázok ionizációját UV fény hatására, és frekvenciától való függést állapított meg (ezt a hatvanas években tudták csak részletesen vizsgálni, a kísérletek bonyolultak, néha távoli UV fény kell). A jelenséget végül Einstein magyarázta meg 1906-ban.
- Az atomok energiaállapotait kis hullámhosszú elektromágneses sugárzással vizsgálhatjuk, a színképvonalakon túli tartományban. Ekkor a fotoelektromos jelenséget figyelhetjük meg, amely során a **sugárzás elektront távolít el az atomokból**. Kísérletileg alkáli fémeket könnyű vizsgálni, mert itt a látható fény is létrehozza a jelenséget, míg más anyagoknál UV vagy még nagyobb frekvenciájú sugárzás kell. A kísérletek eredményeként azt kapjuk, hogy a kilépő fotoelektronok **száma** az **intenzitással arányos** és a frekvenciától általában nem függ. Van viszont egy **minimális frekvencia**, amely alatt intenzitásfüggetlenül nem lépnek ki elektronok. Ezen legkisebb frekvencia értéke az adott anyagtól függ: nátriumra $6 \cdot 10^{14}$ Hz, nikkelre $12,1 \cdot 10^{14}$ Hz, aranyra $11,7 \cdot 10^{14}$ Hz.
- A kísérlet konkrét megvalósítását lásd a 13. ábrán: a **kilépő elektronok áramát** mérhetjük



13. ábra. Balra a fénnel elvégzett kétréskísérlet és az ott tapasztalt interferenciamintázat, míg középen és a jobb oldali ábrán a fotoelektromos jelenség kísérlete látható. Balra az elrendezés, jobbra pedig az anódáram, a szaturációs mennyiségre normálva. Nagyobb frekvencia esetén nagyobb V_0 ellenfeszültséggel lehet megállítani a kilépő elektronokat. Van azonban egy küszöbfrekvencia, amely alatt egyáltalán nem lépnek ki elektronok, és egyáltalán nincs áram, feszültségtől függetlenül.

a fény intenzitása és frekvenciája függvényében is. Ha az anód és katód közötti feszültséget növeljük állandó intenzitás és frekvencia mellett, egyre több kilépő elektront észlelünk áram formájában. Ha az összes kilépő elektron eljut az anódra, akkor hiába növeljük a feszültséget, az áram nem növekszik tovább, ez a **szaturációs áram** amelynek értéke csak az intenzitástól függ. Ha a feszültséget negatív irányban csökkentjük, egyre kisebb áramot mérünk. A negatív irányban vett legnagyobb feszültség (V_0) annak felel meg, amelyet a kilépő elektronok még éppen le tudnak győzni. Ez az elektronok mozgási energiájának felel meg, és értéke a frekvenciától függ, méghozzá lineárisan: $eV_0 = a + bf$.

- A kísérleteket úgy lehet értelmezni, hogy a bejövő fény energiája részben az elektron atomból való kilépésére fordítódik, részben az elektron kinetikus energiájára, és az elektron még a katódra is adhat valamekkora energiát, azaz $E_f = W + E_e + \Delta k$, azaz $E_e \leq E_f - W$. Itt a W kilépési munka tulajdonképpen az atom ionizációs energiája. Ha ezeket az elektronokat V_0 feszültséggel éppen meg tudjuk állítani, akkor $eV_0 = E_e$, tehát $eV_0 = E_f - W$. Ez éppen a kívánt $a + bf$ lineáris összefüggés, és az együtthatók mérése alapján $E_f = hf$, ahol h a Planck-állandó, $6,626 \cdot 10^{-34}$ Js. A küszöbfrekvenciára pedig $W = hf_0$, mivel ekkor éppen kiszabadulnak az elektronok, de a legkisebb feszültségát sem tudják már legyőzni. Az intenzitástól mindegyik érték független, holott klasszikusan azt várnánk, hogy egy intenzív (sok energiát szállító), de alacsony frekvenciájú hullám is kilökheti az elektronokat. A megfigyelések tehát csak úgy értelmezhetőek, hogy a **fény kvantumok, azaz fotonok formájában terjed**, és ezen kvantumok hf energiát hordoznak, ők tudnak kilökní egy elektront. Hiába nagy a fény intenzitása, ha a frekvenciája kicsi, akkor az egyes kvantumok energiája is kicsi. Később látni fogjuk, impulzusuk is van, ennek értéke pedig h/λ .
- Megjegyzendő, hogy nagy intenzitású monokromatikus fény esetében elképzelhető, hogy az elektron egyszerre több fotonnal is kölcsönhat, és így a küszöbfrekvencia alatt is észlelhetőek kilépő elektronok. A hullámképet úgy lehetne használni, hogy az átadott energia a bejövő hullám energiaáram-sűrűségétől függ, illetve egyfajta akkumulációs időtől, amíg összegyűlik elég energia a kilépéshez. Ekkor $W = j\tau/nd$, ha j az áramsűrűség [W/m^2], n az elektronok sűrűsége és d a behatolási mélység. Ha n nagyságrendje 10^{28} elektron köbméterenként, a behatolási mélység a hullámhossz, azaz kb. 10^{-7} m, míg a szükséges energia néhány eV, azaz 10^{-19} J, akkor 10^{-3} W/m^2 esetén kb. 2000 óra jön ki. Ezzel szemben sokkal kisebb energiaáram esetén is 10^{-10} másodpercnél kisebb az elektron kilépési ideje.
- Összességében azt látjuk, hogy az elektronok azonos energiával lépnek ki monokromatikus fény esetén, ezt a hf energiájú fotonok elnyelése okozza. A fotonelektronok száma továbbá arányos az intenzitással és az atomok számával is, tehát elemi eseményekről van szó. Ebből a sugárzási tér kvantáltsága következik, és a kvantáltság az atomokkal való kölcsönhatás során figyelhető meg. Egy 40 W-os fehér égő nagyjából 10^{20} db fotont bocsát ki másodpercenként. A sugárzási tér tehát az anyag atomos jellegéhez hasonló és eltérő (hullám-) tulajdonságokkal is rendelkezik.



14. ábra. A Compton-szórás kinematikája látható a bal oldali ábrán. Jobbra a Compton hatáske-
resztmetszet ($\xi = hf/m_e c^2$). Ha $\xi \rightarrow 0$, visszkapjuk a Thomson alakot.

5.2. Az elektromágneses sugárzások kettős természete

- Fresnel és Young óta ismert, hogy a **fény hullám**, az elhajlási, interferometrikus és polarizációs kísérletek mutatják ezt a természetét.
- A fotoeffektus, ahogy fent láttuk, **fotonhipotézissel értelmezhető**. A klasszikus fizika alapján ez ellentmond a fény hullámtermészetének, vajon melyik kép a helyes? A kérdés feloldására új fizikát kell bevezetni! Érdekes ugyanakkor, hogy van néhány jelenség, amelyet mindkét kép (különböző módon) helyesen magyaráz meg.
- Az egyik a **fény nyomása**, amelyet Maxwell és Bartoli jóslott meg 1871-ben illetve 1876-ban, és Lebegyev figyelt meg 1900-ban, majd Nichols és Hull 1901-ben. A jelenségnek asztrofizikai szempontból is nagy jelentősége van (a csillagok szerkezetét ez döntően befolyásolja), és a műholdak mozgására is nagy hatással van. Érdekes módon a hullámképben és a részecskeképben is egyformán kijön a jelenség, még hozzá azonos eredménnyel. A hullámképben a sugárzási nyomás $p = \langle S \rangle / c$ módon adódik, azaz a fény által kifejtett erő (elnyelés esetén) $F = \dot{E}/c$, hiszen $\langle S \rangle$ a felületen időegységenként áthaladó energiát adja meg. A részecskeképben a fotonok impulzusát kell vennünk, amely, mint a következő fejezetben kiderül, $p_{\text{imp}} = E/c$ módon adódik. Ennek időderiváltja éppen az adott mennyiségű foton adott idő alatt történő megállításához szükséges erőt adja meg, tehát itt is ugyanaz adódik végül a fotonok által kifejtett nyomásra.
- A relativisztikus **Doppler-jelenség** esetében is hasonló megállapítást tehetünk: a hullámképben (a hullámhegyek beérkezése közötti időt helyesen vizsgálva, figyelembe véve az idődilatációt) is kijön a $\sqrt{(1+\beta)/(1-\beta)}$ faktor, és a foton energiáját Lorentz-boostolva ($E' = \gamma E - \beta \gamma p = \gamma(1-\beta)E$, tehát a faktor $\gamma(1-\beta)$) is ugyanaz jön ki.
- A fény polarizációja érdekes módon szintén megérthető hullámképen túl a részecskeképben is, ugyanis a foton spinjével függ össze, ahogy azt a kvantumfizika rész tárgyalja majd. Fontos itt azonban már felhívni rá a figyelmet, hogy a fotonnak is van spinje, értéke $\hbar$, az adott irányú vetülete pedig $\pm \hbar$ (nulla értéket nem vehet fel).

5.3. A Compton-jelenség

- Compton 1922-ben vizsgálta meg Röntgen sugarak szóródását paraffinon. Azt látta, hogy a szórt sugárzásban nagyobb hullámhosszú komponensek jelennek meg, és a szögeloszlás is eltér a várákozástól. A klasszikus elektrodinamika szerint a hullám hatására az atom (elektron) **dipólsugárzást** bocsát ki, melynek intenzitása $\sin^2 \phi$ szerint változik, ahol ϕ a gyorsulás és a sugárzás vizsgált iránya által bezárt szög. A szórás hatáske-
resztmetszete az (53) egyenletből

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \sin^2 \phi, \text{ ahol } r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \quad (88)$$

- Legyen a bejövő hullám iránya $\mathbf{k}$, az elektromos tér (azaz a polarizáció) erre merőleges iránya $\mathbf{e}$. Az ezek és $\mathbf{k} \times \mathbf{e}$ által kifeszített koordinárendszerben kifejezve a kimenő sugárzás irányát $\mathbf{n} = \mathbf{k} \cos \theta + \mathbf{e} \sin \theta \cos \psi + \mathbf{k} \times \mathbf{e} \sin \theta \sin \psi$, ahol θ a bejövő és a kimenő sugárzás közötti szög, ψ pedig

a kimenő sugárzás bejövő sugárzásra merőleges síkban vett vetületének szöge a polarizációs vektorhoz képest. Ha ϕ az elektromos tér és a kimenő sugárzás közötti szög, akkor ez az $\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}$ skalárszorzatából kapható meg, azaz $\cos \phi = \cos \psi \sin \theta$, és $\sin^2 \phi = 1 - \cos^2 \psi \sin^2 \theta$. Mivel az összes polarizációra átlagolnunk kell, és $\langle \sin^2 \psi \rangle = 1/2$, ezért a végeredmény $\langle \sin^2 \phi \rangle = 1 - \sin^2 \theta / 2 = (1 + \cos^2 \theta) / 2$. Végül a Thomson-szórás polarizációkra átlagolt differenciális hatáskeresztmetszete (az eltérülés szöge szerint):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \theta). \quad (89)$$

Az eredmény tehát 90 fokra **szimmetrikus**, de a kísérletben azonban nem ezt a eloszlást mérték (lásd 14. ábra), hanem nagyfrekvenciás sugárzás esetén a nagyszögű visszaszórás jelentősen elnyomott. Ez önmagában erős utalás arra, hogy a Compton-szórásban (azaz nagyfrekvenciás fény szabad elektronokkal való kölcsönhatásában) nem működik a klasszikus kép.

- Klasszikusan a bejövő és a kimenő hullám **frekvenciája azonos**. Ha elég nagy az intenzitás, a töltés visszalökődhet, és a Doppler-effektus módosítja a frekvenciát, de elég kis intenzitásnál ez a hatás minimális. A megfigyelés szerint azonban alacsony intenzitásnál is megjelenik egyfajta frekvencia- vagy **hullámhossz-módosulás**, amelyet a klasszikus kép (a hatáskeresztmetszethez hasonlóan) nem tud megmagyarázni.
- A hullámhosszmódosulás magyarázata a részecskeképben egyszerűen látható. Bejön egy $p = hf/c = h/\lambda$ impulzusú foton, és kimegy $p' = hf'/c = h/\lambda'$ impulzussal, miközben átadott a kettő különbségének megfelelő **impulzust** az elektronnak, és az energiájából is adott át az elektronnak. Az elektron teljes energiája az ütközés előtt $m_e^2 c^4$, míg utána $E_e^2 = m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2$, a fotonra pedig $E = hf$ és $E' = hf'$. Innen az energiamegmaradás:

$$E - E' = E_e^2 - m_e^2 c^4, \text{ azaz} \quad (90)$$

$$hf - hf' = \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2, \text{ innen pedig} \quad (91)$$

$$p_e^2 c^2 = (hf + m_e c^2 - hf')^2 - m_e^2 c^4. \quad (92)$$

- Használjuk ki az impulzusmegmaradást is. Eszerint

$$\mathbf{p}_e = \mathbf{p} - \mathbf{p}', \text{ tehát} \quad (93)$$

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta. \quad (94)$$

Ezt visszahelyettesíthetünk az előző egyenletbe, $p = hf/c$ és $p' = hf'/c$ kihasználásával:

$$h^2 f^2 + h^2 f'^2 - 2h^2 f f' \cos \theta = (hf + m_e c^2 - hf')^2 - m_e^2 c^4, \text{ azaz} \quad (95)$$

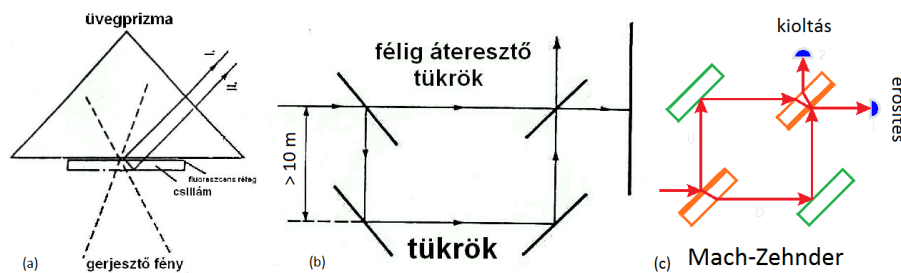
$$hf' = \frac{hf}{1 + \frac{hf}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)}, \text{ másképp} \quad (96)$$

$$\frac{c}{f'} - \frac{c}{f} = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta). \quad (97)$$

- A hullámhosszmódosulás innen $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) = 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2}$, ahol $\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,4$ pm a Compton-hullámhossz, és ezzel $\alpha \lambda_C / 2\pi = r_e$ a klasszikus elektronsugár.
- Ha $hf \ll m_e c^2 \Rightarrow \lambda' \approx \lambda$, tehát alacsony energiájú fotonok esetén nincs hullámhossz-változás (persze az egész gondolat csak szabad elektronokra érvényes, tehát olyan energiákra, ahol az elektron már szabadnak tekinthető). Nagy energiás fotonra, ($hf \gg m_e c^2$) $hf' \approx m_e c^2 / (1 - \cos \theta)$, 90 fok esetén 511 keV, visszaszóródásra (180 fok) 255 keV.
- A bejövő fényt hf energiájú fotonokra bontva a szórt részecskék száma arányos a fotonszámmal, azaz a Compton-szórás elemi folyamat: ez szintén a részecskeképet támasztja alá. A mért hatáskeresztmetszet, ahogy fent említettük, jelentősen különbözik a Thomson-formulától, ezt a **Klein-Nishina formula** adja meg:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (P + P^3 - P^2 \cos^2 \theta), \text{ ahol } P = \frac{hf'}{hf} = \frac{1}{1 + \frac{hf}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} \quad (98)$$

Ezt a hatáskeresztmetszetet majd a kvantumelektrodinamika tudja jól megadni.



15. ábra. A Selényi-kísérlet (a), Jánosy tükörkísérlete (b) és egy Mach–Zehnder-interferométer (c).

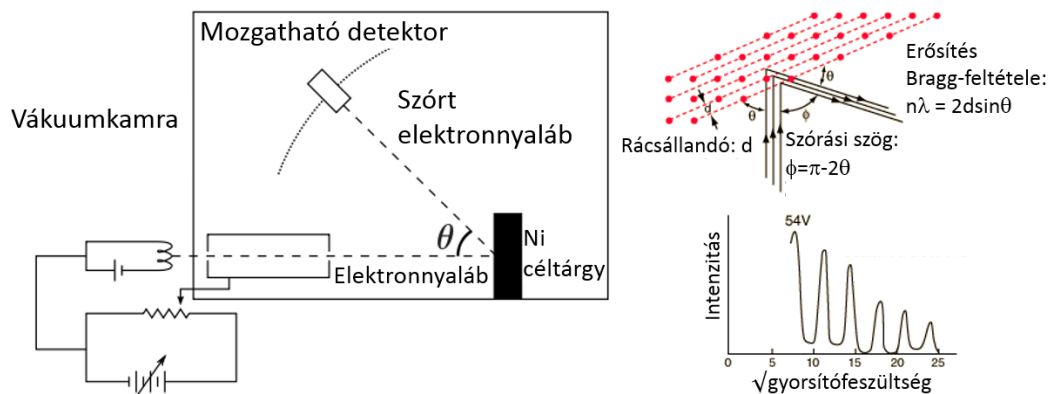
5.4. Kísérletek a fény természetének megállapítására

- Kérdés, hogy a fény részecske vagy hullám-e? Einstein próbálkozott a fűsugárzás-elmélettel, amelyben a foton kis térszögű hullámvonulat, és így a részecske- és a hullámkép is érthető lehet. Ezt cáfolta **Selényi Pál kísérlete** (15.a ábra), amely bizonyította, hogy nagy szögek esetén is van interferencia (90 foknál nagyobb nyílásszög esetén is). Azt bizonyította, hogy a fény elemi sugárzása ugyanolyan gömbhullám, mint ami egy dipólusból származik. Kísérletében fluoreszcens rétegből fény lépett ki. A réteg alá tükrös felületet tett, így az egyik irányba kilépő fény interferálhatott a másik irányba kilépő, majd visszatükröződő részével. A két sugár között nagy szög is lehet, tehát a hullámot teljes gömbhullámként kell elképzelnünk.
- **Jánosy Lajos** (az ELTE Atomfizikai Tanszékének első vezetője) Náray Zsolttal együtt tükörkísérletet végzett 1957-ben (15.b ábra), amelyben félig áteresztő tükrökkel egy fénysugarat önmagával interferáltatjuk. A kísérletben akkor is interferenciát találtak, ha a rendszerben csak egy foton van, úgy, hogy a detektor két része között több méter távolság is lehet! Ugyanilyen „egyfotonos” kísérletet végzett el Grangier, Roger és Aspect, Mach–Zehnder-interferométerrel, de sokkal nagyobb precizitással; a következtetés hasonló volt.
- Érdekes felvetni a kérdést, hogy ha a két foton kioltja egymást, akkor hova tűnik az energiájuk: természetesen ez mindig megmarad, ha valahol kioltás van, akkor valahol erősítésnek is meg kell jelennie! Féligáteresztő tükrök esetén ez a „másik” nyalábot jelenti, kétréses vagy Bragg-szórásos interferencia esetén pedig valamelyik másik irányt. Érdeemes végiggondolni, hogy egy interferencia-kísérletben az egyes nyalábok fázisa hogyan változik (az útkülönbségtől eltekintve): optikailag sűrűbb közegről visszaverődve 180 fokos fázistolás jelenik meg. Így a féligáteresztő tükrök „külső” (tükröző) felületének irányából érkezés után visszaverődve fázistolás következik be, míg a „belső” felületről visszaverődve (azaz először az üvegen áthaladva majd csak ezután visszaverődve) nem változik a fázis, ahogy áthaladás során sem. Így egy Mach-Zehnder interferométerben (ld. a 15.c ábra) az egyesülő nyalábok az egyik irányban erősítik, a másik irányban gyengítik egymást.

6. Anyaghullámok

6.1. Elektronok elhajlása

- Az elektromágneses hullámok hol hullám, hol részecsketermészetüket mutatják, nem lehet a kettő között döntenünk (hanem új elméletet kell létrehozni). Az elektron ezzel szemben eddig csak részecskeként viselkedett, lehet-e, hogy ennek is van hullámtulajdonsága? A fénynél $\lambda = h/p$, igaz lehet valami hasonló részecskékre is? Louis de Broglie javasolta ezt 1924-ben, ezért ezt **de Broglie hipotézisnek** hívjuk. A redukált Planck-állandóval $p = \hbar k$.
- 1927-ben végezték el a **Davisson-Germer kísérletet** (lásd 16. ábra), amelynek során vákuumcsövek elektródjainak szekunder elektron-emisszióját mérték. Elektronnyalábot irányítottak egy nikkel céltárgyra, hogy az atomok elektromos terét, illetve a felület szerkezetét vizsgálják, csak a rugalmasan szórt elektronokat vizsgálva. Arra számítottak, hogy az elektronok számára még a legsimább kristályfelület is felbontható az atomos szerkezet miatt, és így erről lehet információt szerezni a szögeloszlásból.
- A kísérlet során oxigén került a vákuumcsöbe, amely oxidréteget képzett a nikkel felületen.



16. ábra. A Davisson-Germer kísérlet felépítése, eredménye és magyarázata

Ezt magas hőmérsékletre való fűtéssel érték el, nem tudván, hogy a nikkelt korábban polikristályos szerkezete egykristállyá változik így, illetve az elektronnyaláb számára azonos kristályfelület fog látszódni. Az újra elvégzett kísérletben már a kristálysíkok befolyásolták az elektronszórás. Már 1913 óta (Laue és Bragg munkája alapján) ismert volt, hogy ilyenkor röntgensugaraknál az interferenciamintázatban $n\lambda = 2d \sin \theta$ hullámhosszaknál maximumok jelentkeznek, ahol θ a bejövő sugárzás kristálysíkkal bezárt szöge, és $\phi = \pi - 2\theta$ a szórás szöge. Ha ennek megfelelő mintázatot találnak az elektron-szórásban, akkor **elektron-interferencia** jött létre, tehát az anyag tehát hullámként viselkedett!

- 54 V gyorsítófeszültség mellett a detektor $\phi = 50$ fokos állásánál tapasztalták az első intenzitásmaximumot, ami $\theta = 65$ foknak felel meg, és így a nikkelt 0,091 nm-es ráctávolságának ismeretében $\lambda = 2d \sin \theta = 0,165$ nm Ez elég jó egyezést adott a de Broglie hipotézissel:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{1,225 \text{ nm} \cdot \text{V}^{1/2}}{\sqrt{U}} \quad (99)$$

ami 54 V feszültségre 0,167 nm-t ad.

- Miután az erősítés feltétele $2d \sin \theta = n\lambda$, a hullámhossz pedig $\lambda = h/\sqrt{2meU}$, innen az erősítésnek megfelelő feszültség

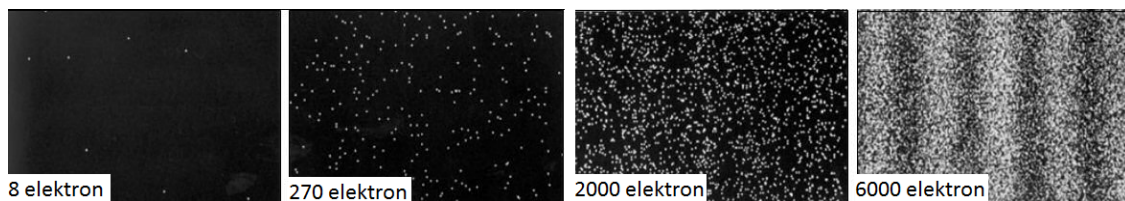
$$\sqrt{U} = \frac{hn}{2d \sin \theta \sqrt{2me}} = K \cdot n, \text{ ahol } K = \text{konstans.} \quad (100)$$

Ha a kilépő nyaláb intenzitását vizsgáljuk ennél a fix θ szögnél, akkor a gyorsítófeszültség gyökének függvényében maximumokat tapasztalunk, méghozzá éppen a fenti K konstans egész számú többszöröseinél, ahogy az a 16. ábrán látható.

- Fontos korrekció, hogy kis n esetén jelentős eltérést tapasztalhatunk, ennek oka, hogy a kilépési munkát is figyelembe kell venni. Itt $\lambda = h/\sqrt{2me(U - W)}$, tehát $U = K^2 n^2 + W$.
- Későbbi kísérletek: kristály szélén való elhalás (Boersch, 1940), áthaladó nyalábbal (Ruska, TEM, 1934), mesterséges vonalrácsra vagy szákkal (Düker, 1956), kétréskísérlet (1974, Jonsson) és alacsony intenzitású nyalábokkal, **akár egy elektronnal is** (Merli, 1974 és Tonomura, 1989). Összességében az elektronok hullámtulajdonsága bizonyított, amelyet egyetlen elektron is mutat (ld. 17. ábra), és a hullámhossz nagy pontossággal $\lambda = h/p$. A helyzet tehát hasonló az elektromágneses jelenségekhez. Felmerül a kérdés, hogy ha kétutas interferenciánál a két úton egy-egy detektort helyezünk el, és a rendszerben mindig csak egy foton van, akkor mindkét detektor megszólal-e. Ilyenkor azonban mindig csak az egyik detektor szólal meg: lehetetlen interferenciát megfigyelni és az elektron útját is követni!

6.2. Atom- és molekulanyalábok elhajlása

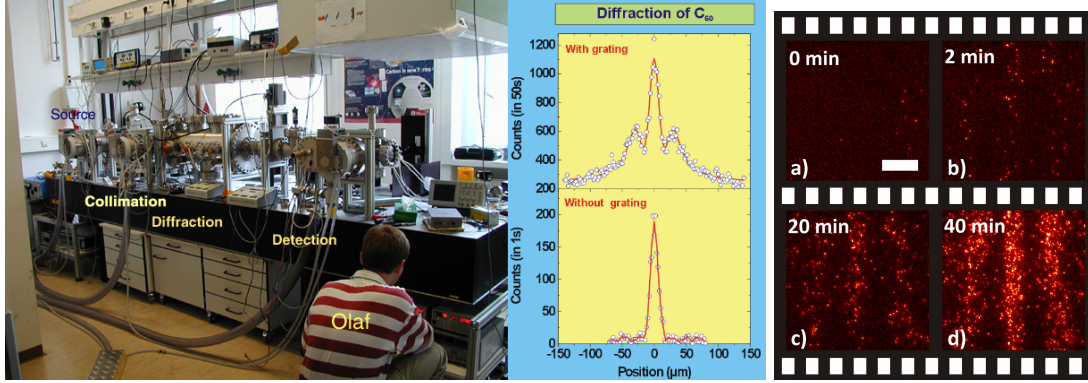
- Fontos kérdés, hogy az **anyagnak általában van-e hullámtulajdonsága**, vagy az elektron speciális mikrorészecske ilyen szempontból? Ez ma is aktívan kutatott terület (bár egyér-



17. ábra. Egyelektronos interferencia

telmüen azt gondoljuk, hogy minden anyagdarab mutatja ezt a viselkedést), és a Nature címlapjára lehet kerülni ilyen tárgyú kísérletekkel ma is.

- Az Otto Stern által kifejlesztett molekulanyalábos módszerrel 1929-ben sikerült kimutatni ezt a jelenséget. Adott hőmérsékletű gázban az atomok átlagos hullámhossza $\lambda = h/\sqrt{3mkT}$, azaz 300 K hőmérsékletű He gáz esetén (tudva, hogy 1 K kb. $86 \mu\text{eV}$ -nak felel meg, a He tömege pedig $3,73 \text{ GeV}/c^2$, míg $h = 197 \text{ MeVfm}/c$) $\lambda = 0,01 \text{ nm}$, H_2 gázban $0,016 \text{ nm}$, tehát elég alacsony sebesség esetén is nagy hullámhosszat kapunk.
- A fontos kísérleti különbség az, hogy ezek a nyalábok nem hatolnak be az anyagba, csak a felületi réteggel lépnek kapcsolatba, így kétdimenziós rácson való diffrakciót kell figyelembe venni. Itt az útkülönbségből ϕ_0 szögű bejövő és ϕ szögű kimenő nyaláb esetén $a(\cos \phi - \cos \phi_0) = n\lambda$ esetén van interferencia. Ha a nyaláb a rácsnak megfelelő síkban esik be, egyébként külön a két rács-irányban lehet vizsgálni a szögeltérést, tehát ekkor $a(\cos \phi - \cos \phi_0) = n_x \lambda$ és $a(\cos \psi - \cos \psi_0) = n_y \lambda$ esetén van erősítés, utóbbi feltétel $\psi = \psi_0 = \pi/2$ esetén eltűnik. Az első erősítés szimmetria esetén van, ahol $\phi = \phi_0$ (azaz $n = 0$), további maximumok $n = 1, 2, \dots$ esetén.
- Konkrétan H_2 és He szórását vizsgálták alkáli-halogén sókristályon, és tényleg megfigyelték az $n = 1$ -hez tartozó csúcsokat. A kísérletek nehezek, mert monoenergiás nyaláb és pontos detektor kell, de megállapítható, hogy a hullámviselkedés az anyag általános tulajdonsága.
- Ma is kutatott terület ez, például 1999-ben fullerénnel figyelték meg (C_{60} nyalábbal, 900 K-nek megfelelő energiánál, ahol a sebesség átlagosan 210 m/s, a hullámhossz kb 2.5 pm, azaz lényegesen kisebb az 1 nm-es méretnél). Ez elméletileg nagyon érdekes, mert a C_{60} molekulának 174 vibrációs módusa van, és szinte szilárd testként tud feketetest-sugárzást kibocsátani, nem kezelhető egyszerű rendszerként. A kísérletek során 100 nm-es SiN rácst alkalmaztak, majd 1 méternyi szabad út után Argon-ion lézerrel ionizálva a molekulákat, detektálhatták őket (18. ábra). Egyértelműen interferenciavonalakat láttak, az elmélet és a kísérlet jó egyezést mutatott, noha a molekulák bonyolultak, erősen gerjesztettek, széles sebesség-eloszlással rendelkeznek, és többféle izotóp volt a mintában. A hiba javarészt a kollimáció hiányából, a sebességeloszlás szélességéből és a résvastagság bizonytalanságából adódik.
- Az elmúlt években sikerült egyatomos interferenciát is kimutatni (Parazzoli, 2012). Itt egy Mach-Zehnder típusú interferométerben vizsgálták egy lézercsipesz (optical tweezer) segítségével szabadesésbe helyezett cézium atom interferenciáját. Az atomot Raman-átmenetre kényszerítették (ahol a szórt foton energiájának egy része az atomot gerjeszti, és csökkent energiájú foton halad tovább). Ezután az atom két ($F = 3$ ill. $F = 4$ hiperfinom indexű, ennek jelentését lásd a következő fejezetben) állapot koherens szuperpozíciójába kerül, majd a lézercsipesz segítségével újra egyesítik őket. A folyamat során összegyűjtött fáziseltéréstől függően az interferométerben vagy jelentkezik az atom hatása, vagy nem. 813 egyedi atom vizsgálata után szépen kirajzolódik az interferenciamintázat (a fázistolás függvényében észlelt kumulált atomszám az $F = 3$ állapotban).
- Egymolekulás interferenciát is sikerült létrehozni (Juffmann, 2012). A kísérletben > 1000 tömegegységnyi molekulákat (ftálocianin származékokat) 10 nm vastagságú anyagba vágott rácstra irányítottak egyesével, és ténylegesen megfigyelték az interferenciakép kialakulását, lásd a 18. ábra jobb oldalán.
- Neutronokkal is végeztek hasonló kísérletet (Rauch, 1974), reaktorból származó alacsonyenergiás, monokromatikus neutronokkal. Itt is lényegében Mach-Zehnder-interferométert használtak, de tükrök helyett természetesen más módszert kellett alkalmazni. A nyalábot monolitikus, tökéletes szilíciumkristállyal osztották két részre, majd egyesítették újra (egy-egy közbenső



18. ábra. Bal oldalt a C_{60} molekulák interferenciáját kimutató kísérlet és a megfigyelt mintázat, ráccsal (van interferencia) és rács nélkül (nincs interferencia). Jobbra Juffmann egymolekulás interferencia-kísérletének eredménye.

kristállyal egyesítve a nyalábokat). A kristályoknak a rácsállandónak megfelelő skálán belül párhuzamosnak kellett lennie. Ekkor az egyenesen továbbhaladó és az eltérülő nyaláb intenzitását kiszámítva valóban az útkülönbségből adódó fázistolás adja meg, hogy konstruktív vagy destruktív interferencia jön-e létre. A mérések eredményeképpen a detektorban észlelt intenzitás x útkülönbség esetén pontosan $\cos \phi = \cos kx = \cos px/\hbar$ módon adódik, az útkülönbséget változtatva szépen mérhető a koszinuszos intenzitásfüggés. Érdekesség, hogy a gravitáció szerepe is kimutatható: a bejövő nyalábot függőleges helyzetbe állítva a Coriolis-hatás megjelenik. A forgatás szögének függvényében szépen kirajzolódik a szinuszos interferencia-mintázat: keleti és nyugati irányban a Coriolis-hatás nem jelentkezik, míg északi és déli irányban ellentétes. Mindezek részletesen olvashatóak Patkós András „Bevezetés a kvantumfizikába” c. könyvében.

6.3. A hullámfüggvény

- Az anyaghullámok tehát **kísérleti tényként kezelendők**, a kísérletek megkövetelik, hogy a részecskékhöz interferenciaképes amplitúdót kell hozzárendelni. Próbáljuk meg az anyaghullámokat az elektromágneses hullámoknak megfelelően kidolgozni. A kétrés-kísérletben a két nyaláb időbeli fejlődése (például az elektromos térerőssége) egy adott térbeli pontban

$$A_1 = a_1 e^{i(\omega t + \phi_1)} \text{ és} \quad (101)$$

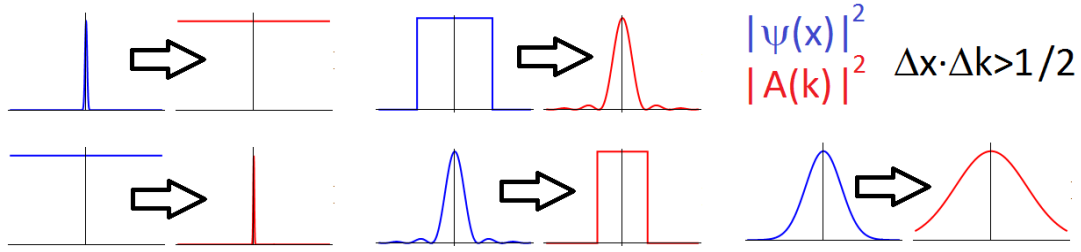
$$A_2 = a_2 e^{i(\omega t + \phi_2)}, \quad (102)$$

azaz a fáziskülönbség $\delta = \phi_2 - \phi_1$. Ekkor az ernyőn mért intenzitás az amplitúdó négyzete:

$$I_{12} = |A_1 + A_2|^2 = |e^{i\omega t}|^2 \left| a_1 e^{i\phi_1} a_2 e^{i(\phi_1 + \delta)} \right|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta \quad (103)$$

azaz $I_1 = I_2 = I$ esetén $0 \leq I_{12} \leq 4$. Anyaghullámokkal hasonló a tapasztalat, de kérdés, hogy mi az A mennyiség?

- Ha bevezetünk egy $P(x)$ megtalálási **valószínűsége-sűrűséget** (x és $x + dx$ között $P(x)dx$), akkor ez lehetne az amplitúdó négyzete (ahogy az elektromágneses sugárzás esetén az intenzitás az elektromos és/vagy a mágneses tér négyzetével arányos). Tehát legyen $P(x) = |\Psi(x)|^2$, ahol Ψ komplex függvény.
- Ha kísérletben észlelni próbáljuk (pl. fotocellával megmérjük), hogy melyik résen megy át az elektron vagy a foton, és ezt koincidenciába kötjük a mintázattal, akkor szimplán az $I = |A_1|^2 + |A_2|^2 = I_1 + I_2$ értéket kapjuk vissza. Tehát a csak akkor tapasztalunk interferenciát, ha nem tudjuk, hogy az elektron/foton melyik utat választotta. Ha vizsgáljuk a részecske útját, akkor oszthatatlannak tűnik, és „választ” a lehetőségek között. Ha tehát több út lehetséges egy részecske számára, akkor az egyes utak valószínűség-amplitúdói összeadódnak, és $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$, és $P = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$. Ez több lehetőségre is kiterjeszthető, és akkor érvényes, ha nem lehet eldönteni, hogy melyik valósult meg. Ha eldönthető, akkor $P = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$.



19. ábra. Adott $\Psi(x)$ -hez tartozó $A(k)$ eloszlások. Nem lehet mindkettőt lokalizálni, azaz létezik egy határozatlansági reláció, $\Delta x \Delta k \geq 1/2$ vagy $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

- Kérdés, hogy mit válasszunk Ψ alakjából (mielőtt matematikailag megalkothatnánk egy „valódi” elméletet). A síkhullámnak megfelelően lehetne $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$. Kérdés, hogy k és ω hogyan legyen megválasztva. Miután $px - Et$ Lorentz-invariáns, azaz értelmes mennyiségnek tűnik, válasszuk ezt, azaz legyen $E = \hbar\omega$ és $p = \hbar k$, és ekkor

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (px - Et) \right]. \quad (104)$$

Ha p és E határozott, értéket vesz fel, akkor ez így nem lokalizálható térben és időben! Ha Ψ -t úgy akarjuk megkonstruálni, hogy lokalizált részecskét adjon, akkor nem lehet határozott energiát/impulzust megadni, márpedig csak lokalizált részecske észlelhető és közvetíthet jelet!

6.4. Határozatlanság

- Ha két hullámot veszünk ω_1 és ω_2 frekvenciával (és k_1 és k_2 hullámszámvektorral), akkor az összeadás után $2 \exp(i(k_1 + k_2)x - (\omega_1 + \omega_2)t)/2 \cos((\Delta kx - \Delta\omega t)/2)$ hullámfüggvény jön létre, a cos-os tag a görbe burkolója lesz, azaz egyfajta **hullámcsomagot** hoz létre. A burkoló fázissebessége $\Delta\omega/\Delta k$ lesz (ez az a sebesség, amellyel a fázis, azaz a maximumok helye halad), ez lesz valójában a csoportsebesség, a teljes hullám fázissebessége az összegek hányadosa lesz. Ekkor mindenesetre a részecske helye adott t esetén egy $2\pi/\Delta k$ intervallumon adott csak, tehát $\Delta x \Delta k = 2\pi$ (mivel $\Delta kx/2$ a cos argumentuma).
- A valóságban, igazi hullámcsomagokban a **hullámszámok egy tartományban folytonosan vannak jelen**, azaz megjelenik egy $A(k)$ amplitúdó, azaz

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk \quad (105)$$

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx \quad (106)$$

tehát ezek egymás Fourier-transzformáltjai. Ekkor egy **lokalizálatlan hullámfüggvényhez** (síkhullámhoz) egy Dirac-delta módon **lokalizált** $A(k)$ **tartozik** és fordítva. Egy Gauss-görbe szerűen térben lokalizált hullámfüggvényt egy inverz szélességű $A(k)$ Gauss-görbe ad, míg egy adott a intervallumon konstans $A(k)$ -hoz $4\pi/a$ szélességű hullámcsomag tartozik (amely még ezen túl is oszcillál, mint egyfajta csillapított oszcillátor). Kiderül, hogy bármely függvényre $\Delta x \Delta k$ alulról korlátos, és Gauss alaknál a legkisebb, itt $\Delta x \Delta k = 1/2$, azaz

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (107)$$

ez a **Heisenberg-féle határozatlansági reláció**, amely kiterjeszthető az $\exp i\omega t$ tagra is:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (108)$$

- A kvantumelmélet ezt még jobban megmutatja majd, hogy tehát az energiabizonytalanság és a rendszer karakterisztikus ideje (pl. a részecske élettartama) nem lehet egyszerre nagyon kicsi,

a kettő szorzata alulról korlátozott a fentiek szerint. A kvantumelméletben tehát nincsenek pontos koordináták, a pályafogalom értelmetlen, és egyes fizikai mennyiségek nem határozhatóak meg egyszerre. Később látjuk: a mérhető mennyiségek operátorok, mérésük esetén a hullámfüggvény az operátor sajátfüggvénye lesz, értéke pedig a sajátérték, és csak kommutáló operátoroknak megfelelő mennyiségek mérhetőek egyszerre, mivel ezek sajátállapotai megegyeznek.

- A határozatlanság a mikrovilág objektív törvényszerűsége és nem a kísérletező ügyetlensége, a mérőrendszer és az objektum kölcsönhatása nem tarthat a nullához.
- Egy-elektronos interferencia-kísérlet ténylegesen elvégezhető (Feynman még azt írta, hogy ezt még ugyan senki sem látta, de így kell, hogy legyen), és tényleg a pontosan azonos elektronok egyike itt csapódik be, a másik ott, és sok elektron alakítja ki az interferenciamintázatot, amely lényegében tényleg $|\Psi|^2$ -nek megfelelően adódik. Tehát az események **valószínűségi jellege** valahogy elsődleges tulajdonsága a fizikának, vagy nem értjük valamely rejtett, de mérhető változók időbeli fejlődését? A fizika a reprodukálható kísérleteken nyugszik, ugyanakkor csak átlagos viselkedés reprodukálódik (nem úgy, mint a kinetikus hőtanban, ahol csak nem tudjuk mindegyik részecskét követni, hanem valahogy nagyon mélyen).
- **Interpretációk** lehetnek szükségesek a fentiek „feldolgozásához”
 - A hullámfüggvény ténylegesen a térbeli töltéeloszlást jelenti (Schrödinger)
 - A hullámfüggvény nem jelent fizikailag semmit szinte, csak valószínűségi amplitúdó (Kopenhága, Bohr és Heisenberg)
 - Minden hullámfüggvény egyszerre megvalósul (sokvilág, Everett, Wheeler, DeWitt)
 - Nincs szükség interpretációra, „shut up and calculate” (instrumentalizmus, Mermin, Feynman)
 - A hullámfüggvény önmagában nem értelmezendő, csak egy sokaság részeként (statisztikus interpretáció, Born)
 - A tudat okozza a hullámfüggvény összeomlását méréskor (Neumann, Wigner)
 - A kvantumelmélet nem teljes, és vannak valamilyen rejtett változók, amelyek időbeli fejlődése adná meg a determinisztikus viselkedést („Isten nem kockajátékos”, a természet determinisztikus, Einstein, de Broglie); Bell szerint azonban csak nemlokális rejtett változók lehetségesek (ld. összefonódott állapotok), az elméletek viszont lokálisak kell, hogy legyenek.

6.5. A kvantummechanika matematikai képe, a Schrödinger-egyenlet

- A kvantummechanika matematikai képe az, hogy egy részecske állapota egy $\Psi(x)$ **állapotfüggvény**. Ezen állapotfüggvények a négyzetesen integrálható függvények teréből kerülnek ki. A fizikai mennyiségek pedig ezen a téren ható **lineáris operátorok**. A lineáris operátoroknak vannak **sajátállapotaik**, amelyekre $\hat{A}\Psi = A\Psi$, ahol az A szám az operátor **sajátértéke**. Egy fizikai mennyiség egy adott részecskére (az energiája, impulzusa, helye stb.) akkor mérhető, ha a részecske a megfelelő operátor sajátállapotában van, és ekkor a mérés eredménye az ennek a mennyiségnek megfelelő operátor sajátértéke az állapoton. A mérés során a kvantummechanika szerint a megfigyelt rendszer hullámfüggvénye „összeomlik”, és a sok sajátállapot szuperpozíciója helyett egy adott sajátállapotba kerül. A kérdés, hogy a folytonos időfejlődés mellett miként értelmezhető a nemfolytonos hullámfüggvény-összeomlás, és pontosan mi számít mérésnek, jelenleg is aktívan kutatott. Ez a téma (sajnos?) ugyanakkor nem feltétlenül a „mainstream” részecskefizika része, még ha olyan elmék is foglalkoznak vele, mint t. Hooft vagy éppen Penrose.
- A Stern-Gerlach kísérletben azt tapasztaltuk, hogy a mágneses momentum és ennek megfelelően a perdület irányától függően térültek el az atomok, néhány lehetséges diszkrét irányba. Ennek oka az, hogy az adott irányú perdület operátorának ezek a lehetséges sajátértékei. Érdekes, hogy az atomok perdületének valamely másik irányba vett vetületét is vizsgálhatjuk további felbontással. Ennél a megismételt felbontásnál az a fontos, hogy a két mágnes közötti átmenet az atom belső elektromágneses válaszához képest legyen gyors, ami megvalósítható. Ha egy z , majd egy x irányú felbontás után megint egy z irányú felbontást vizsgálunk (mindig csak az egyik komponenst továbbbontva), akkor megint felbomlik a nyaláb, ez mutatva, hogy nem szelekció történik, hanem megváltozik az atomok állapota a „mérés” során.

- Érdekes, hogy akárcsak két vetületet sem lehet *egyszerre* pontosan meghatározni, ezekre ugyanolyan határozatlansági reláció vonatkozik! Később kiderül: ez az operátorok nem-kommutálása miatt van, az $SU(2)$ algebra szerint. Ha két operátor kommutál, a sajátvektoraik azonosak, így egyszerre mérhetőek az ezeknek megfelelő mennyiségek. Itt azonban nem ez a helyzet! Az algebrában a Casimir-operátor kommutál mindenivel, így azzal egyszerre meghatározható valamely vetület, így két kvantumszám lesz érvényes: l és l_z , ahol előbbi az $L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ operátor sajátértékéből adódik, míg utóbbi az L_z sajátértéke lesz. Egész pontosan a teljes L^2 operátor sajátértéke $\hbar^2 l(l+1)$, míg L_z -e $\hbar l_z$, ahol $|l_z| \leq l$.
- A helyoperátor egyszerűen az állapotfüggvény x -szel való szorzásaként definiálható. Az impulzus-operátort is könnyen „kitalálhatjuk”. Ha a síkhullámot vesszük alapul, ott

$$\frac{d}{dx}\Psi(x) = ike^{i(kx-\omega t)} = ik\Psi(x) \quad (109)$$

és mivel $p = \hbar k$, így azt tehetjük föl, hogy az impulzus-operátor

$$\hat{p} = i\hbar\nabla. \quad (110)$$

- A hely- és az impulzusoperátor tehát különböző sajátállapotokkal rendelkezik. Kommutáló operátorok sajátállapotai azonosak, ezért ezek egyszerre mérhetőek. Az idő- és az energia-operátor illetve a hely- és az impulzusoperátor nem kommutál, ezért határozatlansági reláció vonatkozik rájuk.
- Ha egy részecske egy adott, helyfüggő $V(x)$ potenciális energia által kialakított térben (pl. gravitációs vagy elektromos helyzeti energia) mozog, akkor $E = E_{\text{kin}} + V(x)$. Tekintsünk az energiára és az impulzusra, mint operátorokra, ekkor

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = \hat{E}\Psi(x). \quad (111)$$

Ha a részecske energia-sajátállapotban van, akkor $\hat{E}\Psi = E\Psi$. Ezt figyelembe véve megkapjuk a **Schrödinger egyenletet**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (112)$$

Itt tehát $V(x)$ a részecske mozgását befolyásoló potenciál avagy energia. Potenciál nélkül a hullámegyenletet kapjuk, és ebből $\Psi(x)$ -re síkhullám alak adódik.

7. A hidrogénatom részletes spektruma

7.1. A hidrogénatom a Schrödinger-egyenlet alapján

- A Bohr-modellt vizsgálva felmerül a probléma, hogy a kvantumelmélet szerint a klasszikus pályafogalom értelmetlen. A határozatlanságot figyelembe véve, ha $\Delta p = p/2$ és $\Delta r = r$, akkor jön ki a legkisebb perdület, $pr = \hbar$. A hidrogénatombeli elektron energiája ekkor $p^2/2m - ke^2/r$, azaz $\hbar^2/(2mr^2) - ke^2/r$. Tehát önmagában az r -nél kisebb térrészbe záráshoz szükséges energia és a Coulomb-energia összege (illetve az utóbbi negatív, hiszen annál kedvezőbb a helyzet, minél távolabb vagyunk a magtól) nem nulla, de rendelkezik egy minimummal, 53 pm körül, ez éppen -13.6 eV! Tehát ez a pályafogalom nélkül is kijön, csak a határozatlanságból (és némi becslésből...). A hidrogénatom modelljét azonban ennél pontosabban kell kidolgoznunk.
- A hidrogénatom spektrumának központi szerepe volt a kvantummechanika kidolgozásánál, ugyanis **egyszerű, zárt kétrészecske rendszer**, amelyben csak az elektromágneses kölcsönhatás játszik szerepet, és a kísérleti eredmények is nagy pontosságúak. Bonyolultabb rendszerekben már a magfizika is szerepet játszhat, ahol a kölcsönhatás sokkal kevésbé számolható, főleg nehezen vizsgálható kísérletileg. Ha a mag nem is befolyásolja az állapotokat, a nagyobb atomok esetében a többrészecske-rendszerekkel kell számolni, ami lényegesen nehezebb. Ezek állapotait a hidrogénatom alapján lehet általánosítani.

- A legegyszerűbb kvantumelméleti leírást úgy kaphatjuk, ha megpróbáljuk a hidrogénatom elektronjának hullámfüggvényét megadni. Abból indulunk ki, hogy az elektron egy

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r} = -\frac{\alpha \hbar c}{r} \quad (113)$$

potenciálban mozog. Ezzel a **Schrödinger-egyenlet** hidrogén-atomra felírva:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x) - \frac{\alpha \hbar c}{r} \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (114)$$

Ezt kell tehát megoldanunk. Mivel a potenciál csak a radiális koordinátától függ, átírhatjuk a Laplace-operátort gömbi koordinátákba:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Psi(r, \phi, \theta) - \frac{\alpha \hbar c}{r} \Psi(r, \phi, \theta) = E \Psi(r, \phi, \theta) \quad (115)$$

Ezt aztán megpróbálhatjuk megoldani. Észrevehetjük azt is, hogy ha p_r a sugárirányú impulzus és L a perdület, akkor ez a kinetikus energia tag (a Laplace-operátor) felbomlik egy $p_r^2/2m$ és egy $L^2/2mr^2$ tagra, a gömbi koordinátákban vett Laplace második két tagja tehát éppen a perdület-operátor, ennek később komoly jelentősége lesz. Mindenesetre a megoldásnál felbonthatjuk $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ módon, ahol a perdületoperátor értékét a második tag adja, ezek a gömbfüggvények lesznek, l és $m = -l \dots l$ indexekkel, a potenciáltól függetlenül. A radiális rész már a potenciálon múlik, itt az általánosított Laguerre-polinomok jönnek ki, az $n - l - 1$. polinom méghozzá (és még egy exponenciálissal szorozva, illetve és $2l + 1$ indexekkel. Látható, hogy $n = 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, 1, \dots, n - 1$ és $m = -l, \dots, l$, azaz adott n -hez $\sum_l (2l + 1) = n^2$ különböző hullámfüggvény tartozik, méghozzá

$$\Psi_{nlm}(r, \phi, \theta) = \sqrt{\left(\frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \cdot Y_l^m(\theta, \phi), \quad (116)$$

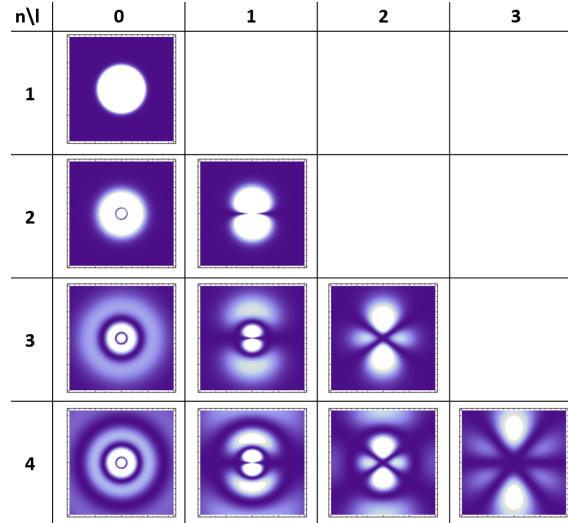
ahol $\rho = 2r/na$, és $a = \hbar/mc\alpha$, a Bohr-sugár. Ezeknek a lehetséges hullámfüggvényeknek felelnek meg a hidrogén elektronjának állapotait, lásd 20. ábra.

- A hullámfüggvény alapján kiszámolhatóan az energiaszintek, és a Bohr-modellel azonosan az

$$E_{n,l,m} = E_n = -\frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{mc^2 \alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \quad (117)$$

összefüggés adódik, tehát az energia l és m szerint degenerált. Az l szerinti degeneráció konkrétan a Coulomb-kölcsönhatás alakjából adódik, mivel a radiális részre vonatkozó eredmény még elvileg függhetne l -től. Az állapotokat összességében az n és az l megadásával jelöljük, ahol az $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ értékeknek az s, p, d, f stb. betűk felelnek meg: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f stb. állapotok lehetségesek.

- A fenti hullámfüggvény tehát nem csak a Hamilton-operátor sajátállapota (azaz energia-sajátállapot E_n sajátértékekkel), de az L^2 perdületoperátornak is, $l(l+1)\hbar$ sajátértékkel, illetve az L_z operátornak is, $m\hbar$ sajátértékkel.
- Az m szerinti energia-degeneráció a gömbfüggvényekbe van „kódolva”, de **mágneses tér jelenlétében felhasadás figyelhető meg**, mivel ettől függ a perdület iránya, azaz a mágneses momentum. Az ebből adódó felhasadás energiája $\Delta E = -\mu B$, és ha $\mu = -\mu_B L/\hbar$, akkor a perdületoperátor sajátértékei alapján $\mu = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$, illetve a z -komponensre $\mu_z = -\mu_B m$, és ezzel arányos a felhasadás. Mivel a Bohr-magneton értéke $5,8 \cdot 10^{-5}$ eV/T, ezért 1 T mágneses térben a felhasadás egy százezred eV nagyságrendű. Ez a Zeeman-felhasadás lényegében.
- A fenti gondolatmenet már két elektronra sem működik, mert nem tudjuk zárt alakban felírni a hullámfüggvényt, azaz megoldani a Schrödinger-egyenlet háromrészesekes verzióját.



20. ábra. A hidrogénatom elektronjának lehetséges hullámfüggvényei abszolútérték-négyzetének kétdimenziós vetületei a Schrödinger egyenlet megoldásai alapján. Láthatólag a nulla valószínűségű felületek az első oszlopban koncentrikus gömbök, és l egyre nagyobb értékei esetén egyre több gömb cserélődik sík felületre, míg $l = n - 1$ esetén l darab síkot látunk. Az m különböző értékei az eloszlások különböző 3D elforgatásainak felelnek meg.

7.2. A finomfelhasadás

- A fenti leírás jól egyezik a kísérletekkel, de nagy felbontású spektrométerrel kiderül, hogy a vonalak megkettőződnek, azaz egyfajta **finomszerkezet** jelenik meg. Ennek két oka van: a spin és a pálya kölcsönhatása, és a relativisztikus hatások megjelenése. Az ezekből adódó korrekciót a perturbációszámítás segítségével határozzuk meg: eszerint ha a Hamilton-operátorhoz egy $\lambda \hat{V}$ operátort adunk hozzá, akkor $\lambda \ll 1$ esetén az új energiasajátértékek $E_n = E_n^{(0)} + \lambda \Delta E_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta E_n^{(2)} + \dots$ módon adódnak, ahol $E_n^{(k)}$ a perturbációszámítás k . rendjében vett korrekciót jelenti. Az elsőrendű korrekció

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle V \rangle_n = \langle \Psi_n^{(0)} | V | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (118)$$

módon adódik, ahol $\Psi_n^{(0)}$ a megfelelő sajátállapot a 0. közelítésben, azaz a perturbáció nélkül. A továbbiakban a λ paramétert belefoglaljuk a perturbáló operátorba, és az energiaszintek eltolódását egyszerűen $\Delta E_n = \langle V \rangle_n$ módon számoljuk.

- A **relativisztikus hatást** úgy foglalkoztatjuk össze, hogy az energia valójában nem $p^2/2m$ formában írható, hanem $\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2$ (ami kis korrekció, ha $p \ll m$), és ennek sorbafejtése

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots \quad (119)$$

- Ebből az elsőrendű korrekció az első tagnak felel meg, tehát ennek energiáját kell vizsgálnunk. Az eredmény ezen operátor n, l állapotbeli várható értékéből számolható ki, a

$$-\frac{p^4}{8m^3 c^2} = -\frac{1}{2mc^2} E_{\text{kin},n}^2 = -\frac{1}{2mc^2} (E_n - V)^2 = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{mc^2 \alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha \hbar c}{r} \right)^2 \quad (120)$$

összefüggés felhasználásával, $\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{an^2}$ és $\langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{1}{a^2 n^3 (l+1/2)}$ ismeretében (ahol $a = \frac{\hbar}{m\alpha}$)

$$\Delta E_{n,l}^{\text{rel.korr.}} = -\frac{mc^2 \alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{n} \right) \quad (121)$$

ahol $\alpha = ke^2/\hbar c$ a finomszerkezeti állandó. Ez az l -függő felhasadás az alapállapotban ($n = 1$, $l = 0$) kb. $9 \cdot 10^{-4}$ eV korrekciót jelent. Ezt a korrekciót a valóságban a Dirac-egyenlettel kellene megtenni, a fenti levezetés matematikailag nem teljesen korrekt az $l = 0$ esetre, de elsőrendben helyes.

- A **spin-pálya csatolás** abból adódik, hogy ha az elektron mozgó rendszeréből vizsgáljuk, a mágnesnek van mágneses tere is, és ezzel kölcsönhat az elektron sajátperdületével. A mozgó töltés mágneses tere $\vec{B} = \vec{v} \times \vec{E}/c^2$, és miután a skalárpotenciál alakja $V = -ke^2/r$, így $\vec{E} = -\vec{\nabla}V = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{ke}{r^2}$, a mag mágneses tere pedig az impluzus $\vec{p} = \vec{v}/m$ kifejezésével

$$\vec{B} = -\frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{E} = -\frac{ke}{mc^2 r^3} \vec{p} \times \vec{r} = \frac{ke\vec{L}}{mc^2 r^3}. \quad (122)$$

A mag fentiek szerinti mágneses terét és az elektron $\mu = g_s \mu_B S/\hbar = g_s eS/2m$ mágneses momentumát skalárszorozva kapjuk meg a perturbáló operátort, azaz a Hamilton-operátorhoz hozzáadott tagot. Ez az igen naív számolás majdnem helyes eredményt ad, ugyanis a korrekt eredmény

$$\hat{V}^{\text{spin-pálya}} = \frac{1}{2} \frac{ke^2 g_s}{2m^2 c^2 r^3} \vec{L} \vec{S} = \frac{ke^2}{2m^2 c^2 r^3} LS = \frac{\alpha \hbar}{2m^2 c r^3} \vec{L} \vec{S} \quad (123)$$

ahol felhasználtuk a $\mu_B = e\hbar/2m$ összefüggést.

- A fenti (??) egyenletben az első $1/2$ faktort Llewellyn Thomas számolta ki, a koordinátarendszer-váltás következtében jön be. Szemléletes magyarázata a Thomas-precessió: a sebességtér a relativitáselméletben hiperbolikus, azaz egy vektor kör mentén való körbevitel esetén a végeredmény nem ugyanabba az irányba fog mutatni (a sebességösszeadás nem-asszociativitása miatt). Valójában a Schrödinger-egyenlet relativisztikus verziója, a Dirac-egyenlet adja meg a fentiek konzisztens magyarázatát.
- A végeredményben tehát az LS szorzat szerepel. A $J = L + S$ vektoros összefüggés négyzetéből, és a sajátértékek $j(j+1)$, $l(l+1)$ és $s(s+1)$ viselkedéséből (L, S, J egyszerre megfigyelhetők), $s = 1/2$ és $j = |l + s|$ miatt, $l > 0$ esetén

$$\langle \vec{L} \vec{S} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \Rightarrow \begin{cases} j = l + 1/2 \rightarrow 2 \langle LS \rangle = \hbar^2 l \\ j = l - 1/2 \rightarrow 2 \langle LS \rangle = -\hbar^2 (l+1) \end{cases} \quad (124)$$

de $l = 0$ esetén $j = 1/2$ így $\langle \vec{L} \vec{S} \rangle = 0$. Az r^{-3} operátor várható értéke (ha $l > 0$)

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{m^3 c^3 \alpha^3}{n^3 \hbar^3} \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l+1)} = \frac{a^3}{n^3} \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l+1)} \quad (125)$$

és innen meghatározható a tényleges vonalfelhasadás. Minden állandót csoportosítva

$$\Delta E_{n,l,+1/2}^{\text{spin-pálya}} = l \gamma_{n,l} \quad (126)$$

$$\Delta E_{n,l,-1/2}^{\text{spin-pálya}} = -(l+1) \gamma_{n,l}, \text{ ahol} \quad (127)$$

$$\gamma_{n,l} = \frac{mc^2 \alpha^4}{2n^3} \frac{1}{2l(l+1)(l+1/2)} \quad (128)$$

ami az $n = 2$ és $l = 1$ esetén tehát ($l = 0$ esetén $\Delta E = 0$) $mc^2 \alpha^4/96$, azaz kb $1,5 \cdot 10^{-5}$ eV, és ez egyúttal $n = 2$ esetén az s és a p pálya energiájának különbsége.

- Egy további korrekciót ad az úgynevezett **Darwin-tag**, amelyet Charles Darwin unokája, Sir Charles Galton Darwin fedezett fel, a Dirac-egyenlet nemrelativisztikus közelítésének vizsgálatával. Ez szemléletesen az elektron relativisztikus „rezgéséből”, a Zitterbewegungból adódik: a Dirac-egyenletből adódó negatív és pozitív energiájú állapotok között ingadozik az elektron, amely térbeli „rezgésként” nyilvánul meg, kb. $2mc^2/\hbar$ frekvenciával és nagyságrendileg $\hbar/mc$ amplitúdóval. Ez elkeni a mag által kifejtett potenciált, és az ebből adódó energiaváltozás $\hbar^2 \Delta V/8m^2 c^2$, azaz az $1/r$ potenciál Laplace-a szerepel benne. Ez $r \neq 0$ esetén nulla, de ott nem nulla értékű függvénnyel szorozva véges értéket ad, így operátor értelemben a $\delta^3(\vec{r})$

operátorral lesz arányos. Eerre az adott n állapotban $l = 0$ esetén $\langle \delta^3 \rangle = m^3 c^4 \alpha^4 / \pi \hbar^2 n^3$ (ez lényegében $|\Psi(0)|^2$ -tel egyezik meg, ami $l > 0$ esetén nulla), innen pedig

$$\Delta E^{\text{Darwin}} = \frac{mc^2 \alpha^4}{2n^3} \quad (129)$$

adódik.

- Az első két korrekció alapján az s és a p állapotok energiája különböző lenne, de a Darwin-tag miatt az energiaszintek végül l és s helyett csak j -től függenek. A fenti három faktoriala felhasadás és a **finomszerkezetbeli energiaszintek** megadhatóak:

$$\Delta E_{n,l} = -\frac{mc^2 \alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{n} \right), \text{ azaz} \quad (130)$$

$$E_{n,l,s} = E_n \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n} \right)^2 \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (131)$$

- Az $n = 1$ pályával összességében nem történik semmi (hiszen itt $j = 1/2$ mindenképpen). Mi a helyzet $n = 2$ esetén? A relativisztikus korrekció az s és a p pályára is hat, utóbbira kisebb mértékben. Ugyanakkor a spin-pálya kölcsönhatás csak a p pályát módosítja (illetve két részre osztja), míg a Darwin-tag csak az s pályát. Összességében az $n = 2$ pályák két részre szakadnak, a $2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ azonos energiájú, a $2p_{3/2}$ ezzel szemben egy másik energiaszintet ad.

7.3. A hiperfinom felhasadás

- A **proton mágneses momentuma** a $g_p = 5,58$ giromágneses faktoriala és a mag-magneton $\mu_N = e\hbar/2m_p$ definíciójával kifejezve

$$\vec{\mu}_p = \frac{eg_p}{2m_p} \vec{S}_p = g_p \mu_N \frac{\vec{S}_p}{\hbar}, \quad (132)$$

ahol $\vec{S}_p$ a proton spinje. Ez a mágneses momentum mágneses teret kelt, ami hat az elektron mágneses momentumára, az energiaeltolódás pedig $\vec{\mu}_e B_{\mu,p}$ várható értéke lesz (ezt úgy is mondhatjuk, hogy a proton mágneses momentuma érzi az elektron által keltett mágneses teret). A $\vec{\mu}_p$ mágneses momentum vektorpotenciálja $\vec{A} = -kc^2 \frac{\vec{\mu}_p \times \vec{r}}{r^3}$, és ebből a mágneses tér $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ módon adódik, azaz

$$\vec{B} = kc^2 \left(\frac{3(\vec{\mu}_p \vec{r})\vec{r} - \vec{\mu}_p r^2}{r^3} \right) + \frac{8\pi kc^2}{3} \mu_p \delta^3(\vec{r}) \quad (133)$$

Ehhez szükség lesz a δ^3 várható értékére, ami csak az $l = 0$ pályákra nem nulla, itt $1/(\pi a^3 n^3)$.

- Az elektron mágneses momentuma $\vec{\mu}_e = e(g_s \vec{S} + g_l \vec{L})/m_e = g_j e \vec{J}/m_e$ módon írható (ahol g_j a Landé-féle g-faktor, ami $g_s \approx 2$ és $g_l = 1$ értékeiből az s, l, j kvantumszámok függvényében adódik, $l = 0$ esetén $g_j = g_s \approx 2$). Ezzel felírható az energiaeltolódás, amelyben a mágneses tér és a momentum szorzata miatt J és S_p szorzata szerepel. Eerre az előzőekhez hasonlóan

$$2 \langle \vec{J} \vec{S}_p \rangle = \hbar^2 (f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)) \quad (134)$$

ahol f az $\vec{F} = \vec{J} + \vec{S}_p$ operátor sajátértékét leíró kvantumszám. A teljes számolást nem csináljuk itt végig, a konkrét eredmény:

$$\Delta E^{\text{hiperfinom}} = \frac{4}{3} \frac{m_e}{m_p} \alpha^4 m_e c^2 g_p \frac{1}{n^3} \left\langle \frac{\vec{J} \vec{S}_p}{\hbar^2} \right\rangle = \frac{A}{2} (f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)) \quad (135)$$

ahol A az úgynevezett intervallumfaktor, továbbá $s_p = 1/2$ a proton spinje. Az $1s$ pálya (ahol $j = 1/2$) esetén az $f = j + s_p = 1$ vagy $f = j - s_p = 0$ állapotok fordulnak elő, ekkor az egyik energia $A/4$, a másik pedig $-3A/4$. Itt tehát a két pálya közötti felhasadás felhasadás

$$\Delta E^{f=0 \text{ vs. } f=1} = A = \frac{4}{3} \frac{m_e}{m_p} \alpha^4 m_e c^2 g_p \approx 5,88 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \quad (136)$$

azaz 1418,9 MHz-es sugárzás, amelynek hullámhossza 21 cm, és a rádiócsillagászatban sokszor látszódik, ugyanis ez áthatol a csillagközi poron. Annyira fontos, hogy a Pioneer-táblára is rákerült. Ugyanakkor kísérletileg 1420,2 MHz adódik, azaz még mindig nincs egyezés, tehát hiányzik még egy korrekció! Ennek az az oka, hogy eddig az elektron spinjére a $g_s = 2$ értéket használtuk, illetve a Dirac-egyenlet eredményeit, az azonban ennyire pontos csak. A kvantumelektrodinamika elmélete adja meg a kísérleti eredményeket a legpontosabban.

7.4. A Lamb-féle eltolódás

- A **kvantumtérelmélet** szerint az elektron bármikor kibocsáthat egy fotont magából, ha azt el is nyeli (ez az úgynevezett egyhurok korrekció), lényegében az energiahatározatlanság miatt. Ezek a **virtuális fotonok** „körbelengik” az atom elektronjait, és lecsökkentik az elektron „effektív” tömegét és töltését (és ezt később **renormálás** néven ismerjük majd). Az elektromos tér egy kicsit kisebb lesz, de igazán csak kis távolságon lesz ennek hatása, tehát az s állapotot befolyásolja igazán, amely a mag körül nagy sűrűségű. Ezen kölcsönhatás miatt lesz különbség a $2s_{1/2}$ és $2p_{1/2}$ pályák energiái között, illetve a $g_s = 2$ összefüggés is emiatt nem teljesül. Igazából ezt az eltolódást három effektus okozza, a „vákuumpolarizáció” (mikor a foton elektron-positron párrá „fluktuál”, majd újra egyesül), az elektron tömegének módosulása (renormálása, amelyet a fluktuációként kibocsátott és elnyelt foton okoz) és az elektron anomális mágneses momentuma (amelyet a fotonnal való kölcsönhatás egyhurok-korrekciójával lehet illusztrálni, ld. az elektron anomális mágneses momentumáról szóló alfejezetet).
- **Lamb és Retherford** 1947-es kísérlete mutatta ezt ki (lásd 21. ábra). Az energiaeltolódás igen kicsi, rádiófrekvenciás tartományban van, $4,4 \cdot 10^{-6} eV$ az értéke. Ezt optikai úton nem lehet kimutatni, csak nagyfrekvenciás rezonanciával, ami azért szerencsés, mert így a Doppler-kiszéledés nem jelent problémát (mert az a frekvenciával arányos). A fő kísérleti kérdés, hogy a sok átmenet között hogyan különböztetjük meg éppen a $2s_{1/2}$ és $2p_{1/2}$ közöttit?
- A kísérlet lényege, hogy egy 2500 fokok kályhából bocsátották ki a hidrogén-atomokat, amelyek az $1s_{1/2}$ alapállapotban voltak. Ezt a nyalábot elektronokkal bombázták, és ennek hatására némely atomok átkerültek a metastabil $2s_{1/2}$ állapotba (mivel a kiválasztási szabályok szerint az ebből az alapállapotba való átmenet nagyon gyenge, és így az állapot élettartama tizedmásodperc nagyságrendű). Az atomok eztán átmennek egy gigahertzes elektromágneses téren, és ha itt egy atom átmegy az $2p_{1/2}$ állapotba (ami akkor következik be tömegesen, ha a gerjesztő tér frekvenciája éppen ennek a $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ átmeneti energiának felel meg), az már milliárdod másodperc alatt alapállapotba bomolhat. Ezen tér után az atomok egy volfrám fóliába ütköznek, és a még mindig $2s_{1/2}$ állapotban lévő atomok elbomlanak, és a fóliából úgynevezett Auger-elektronokat bocsátanak ki¹. A $2s_{1/2}$ és az $2p_{1/2}$ állapot közötti energiát a nagyfrekvenciás generátorral eltalálva lényegesen kevesebb ilyen Auger-elektront fogunk észlelni (mivel ekkor a $2p_{1/2}$ hidrogén egyből alapállapotba bomlik, azaz $1s_{1/2}$ hidrogén érkezik a volfrámlapra), tehát meghatározható a $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ átmenet energiája! A mérésük szerint ez kb. 1 GHz volt, mai számított értéke 1057,833(4) MHz, mért értéke pedig 1057,845(3) MHz. A számolás eredménye szerint

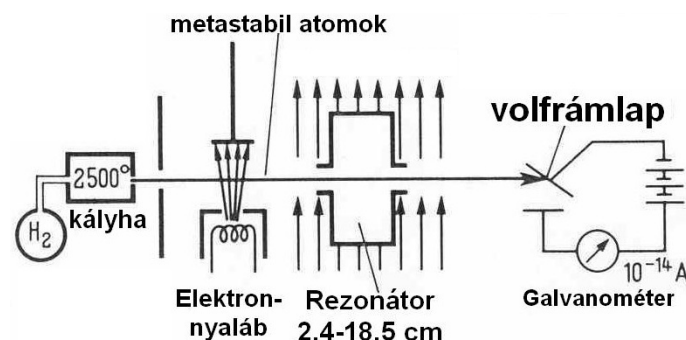
$$\Delta E^{\text{Lamb}} = \alpha^5 mc^2 \frac{\xi_n}{4n^3} \quad (137)$$

ahol $\xi_n \approx 13$, és n -től gyengén függ. A hidrogénatom spektrumát ezzel a lehető legnagyobb pontossáig értjük (lásd 22. ábra)!

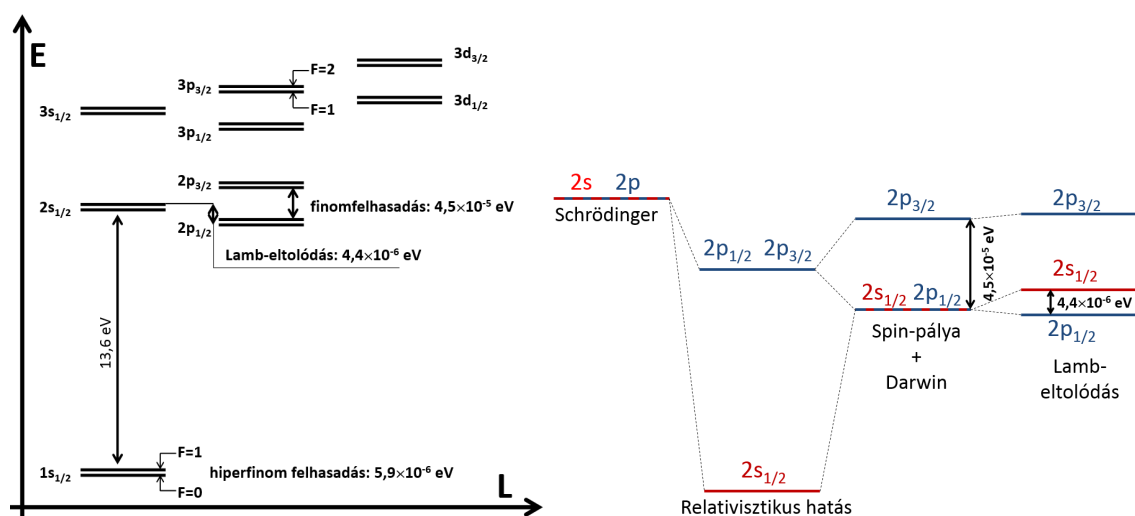
7.5. Többelelektronos atomok szerkezete

- Ezeket az atomokat a **soktestprobléma** bonyolultsága miatt analitikusan sem tudjuk jól kezelni.
- Az elektronszerkezetet alakító legfontosabb tényezők:
 1. Coulomb-vonzás a mag és az elektronok között

¹ Az Auger-emisszió során először fotonelnyelés vagy más hatás miatt az egyik belső elektron kilép az atomból, így ott egy „lyuk” keletkezik az elektronszerkezetben. Ezt egy külső elektron betölti, és az energiafelszabadulás egy további elektront lökhet ki az atomból. Ez utóbbit hívjuk Auger-elektronnak.



21. ábra. A Lamb-Retherford kísérlet.



22. ábra. A hidrogénatom energiaszintjeinek részletes szerkezete. A főkvantumszám szerinti felhasadás a Coulomb-kölcsönhatásból adódik, a perdulatok szerinti felhasadás (finomszerkezet) ennek relativisztikus korrekciójából és a spin-pálya csatolásból (melynek során a mag elektron által észlelt mágneses tere hat az elektron saját mágneses nyomatékára). A Lamb-féle eltolódás oka a kvantumelektrodinamikában keresendő, míg a hiperfinom felhasadás az elektron mágneses terének és a mag spinjének kölcsönhatásából adódik. A jobb oldali ábrán a finomszerkezet és a Lamb-féle eltolódás látható „kinagyítva”

2. Coulomb-taszítás az elektronok között
 3. Spin-pálya csatolás
 4. Elektronspinből eredő mágneses momentumok kölcsönhatása
 5. Elektronpályából eredő mágneses momentumok kölcsönhatása
 6. Elektronspin-magspin kölcsönhatása
 7. Elektronpályamomentum-magspin kölcsönhatása
 8. Relativisztikus korrekciók
 9. Fermion-hullámfüggvény antiszimmetriájából adódó energiaeltolódás
- Ezt általában perturbatív próbáljuk kezelni, centrális tért feltételezve, és valamilyen maradékkölcsönhatást számolva. A legfontosabb ebben: 2, 3 és 9.