

Magfizika gyakorlat - vázlatok

Nagy Márton

2015.

A magfizika gyakorlatok anyaga, sok kibővítéssel, kiegészítéssel, elméleti megalapozással, ami az előadás anyagának elsajátításához is hasznos lehet.

Tartalomjegyzék

1. Energiaviszonyok, kinematika	3
1.1. Kötési energiák	3
1.2. Neutron tömege, ütközése	4
1.3. Hatáskeresztmetszetek definíciója, mérése	4
2. Cseppmodell, Weizsäcker-formula	5
2.1. A kötésienergia-formula	5
2.2. Stabilitási völgy, vastócsa	6
2.3. A Yukawa-potenciál	7
2.4. Elektrosztatikus energia	7
2.5. Aszimmetria-energia, Fermi-gáz modell	8
2.6. Párenergia	8
3. Héjmodell	9
3.1. Mágikus számok	9
3.2. Gömbszimmetrikus harmonikus oszcillátor I. — derékszögű koordináták	9
3.3. Gömbszimmetrikus harmonikus oszcillátor II. — gömbi koordináták	10
3.4. Héjak az atommagban, spin-pálya kölcsönhatás	11
3.5. A nívók betöltési sorrendje	12
3.6. Alapállapotú magok „spinje” és paritása, példák	12
4. Atommagok mágneses momentuma	13
4.1. Mágneses magrezonancia	13
4.2. Schmidt-modell	14
4.3. Bonyolultabb esetek	14
5. Kvantummechanikai szóráselmélet	15
5.1. Rugalmas szórás: alapvető megfontolások, szórásmatrix*	15
5.2. Unitaritás, optikai tétel*	16
5.3. Parciális hullámok	16
5.4. Born-közelítés	17
5.5. Kvázidiszkrét energiaszintek*	19
5.6. Szórás kvázidiszkrét energiaszinten*	19
5.7. Rugalmatlan szórás*	19
6. Elektromágneses átmenetek (γ-sugárzás)	19
6.1. Fotonok gömbhullámjai*	20
6.2. Példák	20

7. Gerjesztett állapotok	20
7.1. Vibrációs energiaszintek*	21
7.2. Forgási gerjesztések*	21
7.3. Kvadrupólmomentumok*	21
A. függelék: Gömbhullámok	22
B. függelék: A Helmholtz-egyenlet Green-függvénye*	23
C. függelék: Egy egydimenziós példa kvázidiszkrét energiaszintekre*	24

1. Energiaviszonyok, kinematika

1.1. Kötési energiák

Itt alapvetően az $E = mc^2$ képletet kell virtuózan alkalmazni. Néhány tömeg (körülbelüli) értéke:

- Atomi tömegegység: $1 \text{ amu} = 1,660565 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, ez a ^{12}C mag tömegének 12-edé.
- $1 \text{ pJ} = 6,24 \text{ MeV}$. $1 \text{ amu} \cdot c^2 = 931,5 \text{ MeV}$.
- Az m_N nukleontömege kb. $1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ -t lehet venni, azaz az N_A Avogadro-szám kb. $6 \cdot 10^{23}$.
- A proton tömege kb.: $m_p = 1,007825 \text{ amu}$, $m_p c^2 = 938,3 \text{ MeV}$.
- A neutron tömege kb.: $m_n = 1,00866 \text{ amu}$, $m_n c^2 = 939,6 \text{ MeV}$.
- Az elektron tömege kb.: $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$.
- A deutériummag (D) tömege: $m = 2,014102 \text{ amu}$.
- A tríciummag (T) tömege: $m = 3,01605 \text{ amu}$.
- A ^3He mag tömege: $m = 3,01603 \text{ amu}$. A trícium β -bomlásának energiája ezekből adódik: $18,6 \text{ keV}$.
- A ^4He mag tömege: $m = 4,0026 \text{ amu}$.
- Az atomi tömegegységhez: a ^{12}C mag kötési energiája 92 MeV , összhangban az eddigiekkel.

• Mekkora a deuteronban a magerők potenciálja a tömeghiány alapján?

Behelyettesítve a tömegek alapján: $E = (m_p + m_n - m_D)c^2 = 0,002383 \text{ amu} \cdot c^2 = 2,22 \text{ MeV} = 0,36 \text{ pJ}$.

Megjegyzés: ez elég sekély. A deutérium „alig létezik”.

• Mekkora a magfúzió energiatöbblete?

$\text{D} + \text{T} \rightarrow ^4\text{He} + \text{n}$: $\Delta E = (m_D + m_T - m_{^4\text{He}} - m_n) = 0,0189 \text{ amu} \cdot c^2 = 17,6 \text{ MeV}$. A tömegarány alapján ennek kb. 4/5-ét, $14,3 \text{ MeV}$ -et a neutron visz el, a maradékot a ^4He . $\text{D} + \text{D}$, $\text{T} + \text{T}$ ugyanígy számolható.

Megjegyzés: A $\text{D} + \text{T}$ fúzió zajlik a hidrogénbombákban, és ez a legígéretesebb a szabályozott fúzióra is. A kilépő neutronok energiája, $14,3 \text{ MeV}$ egy „kedvelt” energia: nem öfenntartó, hanem pl. gyorsítóval csatolt fúzióval könnyű illet előállítani.

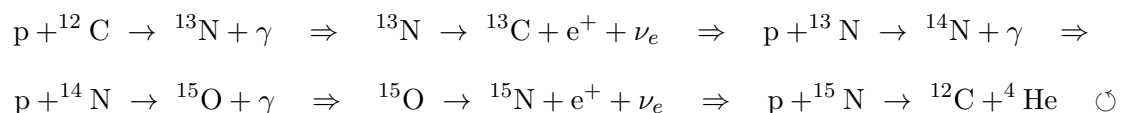
• Mekkora energia szabadul fel az alábbi maghasadási reakcióban: $^{235}\text{U} + \text{n} \rightarrow ^{90}\text{Kr} + ^{143}\text{Ba} + 3\text{n}$? Adott az ^{235}U , ^{143}Ba , ^{90}Kr magok tömegdefektusai: rendre -41 MeV , 74 MeV , 75 MeV .

Egy mag tömege $M = A/12 * M_{^{12}\text{C}} - D = A \cdot 1 \text{ amu} - D$, ahol D a defektus, definíció szerint. Így tehát $Q = M_U - M_{\text{Kr}} - M_{\text{Ba}} - 2m_n$, vagy másképp: $Q = D_{\text{Kr}} + D_{\text{Ba}} - D_U + 2 \text{ amu} - 2m_n$, ki lehet számolgatni. $Q = 173,8 \text{ MeV}$ jön ki.

Megjegyzés: Egy nehéz atommag (urán, plutónium) hasadásakor átlagosan kb. $32 \text{ pJ} = 200 \text{ MeV}$ energia szabadul fel, ez az eredeti nyugalmi energia kb. 0,09%-ának felel meg. (Ökölszabály: 1 kg urán hasadása 1 GW teljesítményt tud leadni 1 napig.) A 200 MeV -ből átlagosan kb. $6\text{--}10 \text{ MeV}$ jut a neutronokra, a prompt γ -sugárzásra és a leányelemek bomlására, a többi jórészt a hasadási termékek kinetikus energiája. Ezek a számok persze hasadó magonként kicsit mások és mások.

• A CNO-ciklussal számolva mekkora volna a Földön a Napból jövő neutrínók fluxusa?

A CNO-ciklus a következő folyamat:



Ismert, hogy a béta-bomlásokban mindkettőben $Q = 1,2 \text{ MeV}$ energia szabadul fel, ennek átlagosan $2/3$ -át viszik el a neutrínók, és a Földre érkező napteljesítmény $\Phi_E = 1350 \text{ W/m}^2$.

Feltehetjük, hogy a neutrínók által elvitt energiát kivéve a felszabaduló energia minden formája végül elektromágneses sugárzássá alakul, és hozzáadódik a napállandóhoz. A $4\text{p} \rightarrow ^4\text{He}$ folyamatban felszabaduló energia: $4 \cdot 1,007825 - 4,0026 \text{ amu} = 26,7 \text{ MeV}$, ebből a neutrínók járulékát levonva $25,13 \text{ MeV}$ marad; egy ilyen folyamat során két neutrínó keletkezik, tehát minden $12,6 \text{ MeV}$ -nyi energiára jut egy neutrínó. A napteljesítményből visszszámolva négyzetméterenként kb. $6,7 \cdot 10^{14}$ db neutrínó adódik.

1. megjegyzés: A Nap energiájának nagy részét valójában nem a CNO-ciklus adja, hanem a proton-proton ciklus, mely a következő: $p + p \rightarrow D + e^+ + \nu_e$, $D + p \rightarrow {}^3\text{He}$, ${}^3\text{He} + {}^3\text{He} \rightarrow {}^4\text{He} + p + p$, ennek során a kötési energiákból ugyanennyi energia szabadul fel, egyetlen különbség, hogy kicsit más mennyiséget visznek el a neutrínók, tehát így számolva is kb. ennyi jött volna ki.

2. megjegyzés: Mint ismert, a Napból kb. harmadannyi ν_e érkezik, mint ezek alapján „kellene”: egy részük útközben átalakul müion-neutrínóvá (neutrínóoszilláció), és a müion-neutrínót az elektron-neutrínóra érzékeny berendezések nem veszi észre.

3. megjegyzés: Érdekes megjegyezni néhány energiaértéket: a $4p \rightarrow {}^4\text{He}$ fúzióban a felszabaduló energia kb. a komponensek össztömegének 0,72%-a, több, mint a D+T fúzióban, ahol ez kb. 0,37%. A Nap teljesítménye kb. $3,85 \cdot 10^{26}$ W, ez másodpercenként kb. 600 millió tonna H fuzionálásával történik, az elmenő energia tömege pedig kb. 4,3 millió tonna másodpercenként. Az évmilliók előrehaladtával ez lassan növekszik; a kialakuláskor még csak a mai 70%-a volt.

1.2. Neutron tömege, ütközése

Chadwick a neutron tömegét úgy mérte meg, hogy ütköztette atommagokkal, és nézte, melyiknek mennyi energiát ad át. (Tömegspektroszkópia nem lehet, mert semleges.) Lássuk: legyen M a mag tömege, v_0 és v a beeső és a kimenő neutron sebessége, v' a meglökött mag sebessége. Maximum mekkora energiát ad át a neutron? Ez akkor van, ha a neutron visszaszóródik, ekkor az impulzus- és energiamegmaradásból:

$$m_n v_0 = M v' - m_n v, \quad \frac{1}{2} m_n v_0^2 = \frac{1}{2} M v'^2 + \frac{1}{2} m_n v^2 \Rightarrow v = \frac{2m_n}{M + m_n} v_0, \quad (1.1)$$

vagyis az átadott energia $\Delta E = \frac{4x}{(1+x)^2} E_0$, ahol E_0 az eredeti energia és $x = \frac{m_n}{M}$. A kísérlet szerint ez hidrogénre a legmagasabb, vagyis $m_n \simeq m_p$. Valóban.

1. megjegyzés: A neutron energiája ekkor $\frac{(x-1)^2}{(x+1)^2}$ -edrésszére csökken, azaz az elveszített energia az eredetinek $\frac{4x}{(1+x)^2}$ -szerese. Ha a tömegközépponti rendszerben a neutronszórás izotrop (kis neutronenergiákra így is van, ld. a parciális hullámoknál), akkor kiszámítható, hogy egy ütközésben a leadott átlagos neutronenergia az eredetinek $\frac{2x}{(1+x)^2}$ -szerese. Feladat: ellenőrizzük!

2. megjegyzés: A neutron tömegét persze pontosabban meg lehet mérni a magok tömegeinek és kötési energiáinak mérésével; persze csak akkor, ha már tudjuk, hogy létezik neutron, és hogy egy A tömegszámú mag Z protonból és $A - Z$ neutronból áll. Chadwick felfedezésének lényege az egyedi részecskéként való kimutatás és a körülbelüli tömegmérés.

1.3. Hatáskeresztmetszetek definíciója, mérése

Ha egy szórócentrumra beeső részecskenyaláb fluxusa Φ (ez a négyzetméterenként másodpercenként áthaladó részecskék száma, $[\Phi] = \frac{1}{\text{m}^2 \text{s}}$), és egy adott folyamatból másodpercenként B -t észlelünk (azaz $[B] = \frac{1}{\text{s}}$), akkor az ennek a folyamatnak megfelelő mikroszkopikus hatáskeresztmetszet, σ definíciója:

$$\sigma = \frac{B}{\Phi}, \quad (1.2)$$

ez terület dimenziójú, szokásos egysége a barn: $1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2$. A „folyamat” lehet pl. adott térszögbe való szórás, akármilyen szórás, maghasadás, elnyelés, elnyelés és gerjesztés, stb., így beszélhetünk szórási differenciális hatáskeresztmetszetről, teljes szórási, hasadási, elnyelési, stb. hatáskeresztmetszetekről. A teljes rugalmas szórási hatáskeresztmetszet (σ_e , „elasztikus”) a differenciális hatáskeresztmetszet integrálja:

$$\sigma_e = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (1.3)$$

Ha σ a teljes hatáskeresztmetszet, és egy makroszkopikus anyagban n a szórócentrumok sűrűsége, akkor egy (vékony) dx vastagságú fóliára F felületen eső I intenzitású nyaláb (ennek fluxusa tehát $\Phi = \frac{I}{F}$) $dx \cdot F \cdot n$ darab szórócentrummal találkozik, a kölcsönhatások száma másodpercenként tehát $\Phi \cdot F n \sigma dx = I n \sigma dx$, vagyis a nyalábból kiszóródott részecskékkel felírható a következő egyenlet:

$$\frac{dI}{dx} = -n\sigma I \Rightarrow I(x) = I_0 \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right), \quad \text{ahol } \lambda = \frac{1}{n\sigma}. \quad (1.4)$$

λ neve: átlagos szabad úthossz, ez itt a nyaláb „behatolási mélysége”. Vékony céltárgyra a nyalábból „elvezett” (valamilyen folyamatban részt vett) részecskék száma $I \frac{dx}{\lambda}$ időegységenként. Vékony céltárgynál ilyen igaz minden részfolyamatra is: egy adott esemény bekövetkezési frekvenciája

$$B_i = N\sigma_i\Phi = \sigma_i \frac{I}{F} = nFdx \frac{I}{F} \Rightarrow B_i = n\sigma_i dx, \quad (1.5)$$

ahol az i index a folyamatokat különbözteti meg, N az érintett szórócentrumok száma, F a nyaláb területe.

Az $n\sigma$ neve *makroszkopikus hatáskeresztmetszet*, mértékegysége $\frac{1}{m}$. Minden részfolyamat (pl. adott szögbe szórás, elnyelés, maghasadás) makroszkopikus hatáskeresztmetszete, Σ_i definiálható ezzel analóg módon: $\Sigma_i = n\sigma_i$, de általában csak a teljes $n\sigma_{tot}$ értelmezhető az átlagos szabad úthossz reciprokaként¹.

• **Példa: beütésszám kiszámítása adott hatáskeresztmetszet alapján:**

Egy $A = 200$ tömegszámú atommagokból álló céltárgyra $3,2 \mu A$ áramú, 5 MeV -es ${}^3\text{He}$ nyalábot irányítunk. A rugalmas szórás izotrop, a teljes hatáskeresztmetszet $\sigma_{tot} = 1,25$ barn. A kijövő ${}^3\text{He}$ részecskéket egy $S = 10 \text{ mm}^2$ felületű, $d = 10 \text{ cm}$ távolságban elhelyezett 100% -os hatásfokú detektorral észleljük. A céltárgy vastagsága $1 \mu m$, sűrűsége $\rho = 20 \text{ g/cm}^3$. Mekkora a detektorban a B beütésszám?

Megoldás: a nyaláb részecskéinek kinetikus energiája jóval kisebb a nyugalmi tömegnél: lehet nemrelativisztikus képletet használni. A ${}^3\text{He}$ tömege jóval kisebb a céltárgy atommagokénál, úgyhogy a tömegközépponti és a laborrendszer azonosnak vehető (tehát nincs visszalökődés). Így a szórás a laborrendszerben is izotrop. A detektor térszöge $\Delta\Omega = S/d^2 = 10^{-3}$, az izotropia miatt $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma_{tot}}{4\pi}$, azaz a detektorra való szórásra $\Delta\sigma = \frac{\sigma_{tot}}{4\pi} \Delta\Omega$, ekkor tehát $B = nd\Delta\sigma I = \frac{\rho}{Am_N} dx \cdot \frac{\sigma_{tot}}{4\pi} \Delta\Omega \cdot \frac{3,2\mu A}{2e} \simeq 6000 \frac{1}{s}$.

• **Példa: vastag céltárgy:**

Egy $d = 0,1 \text{ mm}$ vastag, dúsított uránból készült fóliára ($\sigma_{tot} \simeq 1000$ barn, $\rho = 20 \text{ g/cm}^3$, $A = 235$) termikus neutronokat lövünk. Hányad részük halad át?

Megoldás: a szórócentrumok sűrűsége $n = \frac{20000 \text{ kg/m}^3}{235 m_N} = 5,1 \cdot 10^{28} \frac{1}{m^3}$, a szabad úthossz tehát $\lambda = \frac{1}{n\sigma_{tot}} \simeq 200 \mu m$. Ezen tehát a nyaláb $e^{-0,1 \text{ mm}/200 \mu m}$ -ad része, kb. 60% -a halad át.

Megjegyzés: Látszik tehát, hogy a céltárgy vékonysága a szabad úthosszhoz viszonyítva értendő.

2. Cseppmodell, Weizsäcker-formula

Legtöbb magra jó közelítés a gömbalak (kivéve a forgási spektrummal rendelkező magokat, ld. később). A magok térfogata tapasztalat szerint az A tömegszámmal arányos, ezt értelmezhetjük úgy, mintha a maganyag egyfajta összenyomhatatlan folyadék lenne. A sugárra kísérletileg az adódik, hogy

$$R \simeq r_0 A^{1/3}, \quad \text{ahol } r_0 \sim 1,2 \text{ fm}. \quad (2.1)$$

2.1. A kötésienergia-formula

Főleg nem túl könnyű magok kötési energiáira meglepően jó eredményt ad az igen egyszerű ún. *Weizsäcker-féle félempirikus formula*, melyben 5 paraméter van:

$$E = \alpha_V A - \alpha_S A^{2/3} - \alpha_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - \alpha_A \frac{(A - 2Z)^2}{A} + \delta(A, Z), \quad (2.2)$$

ahol A a tömegszám, Z a rendszám, az együtthatók pedig:

- $\alpha_V \simeq 15,8 \text{ MeV}$. Ez a tag a térfogati energia: ez a nukleonok számával arányos, mert mindegyik a szomszédjaival hat kölcsön. Ez a magerők rövid hatótávolságát fejezi ki (ld. alább).

¹Pl. neutronokra a maghasadási makroszkopikus hatáskeresztmetszet reciproka (ha a neutron másképp is elnyelődhet, nemcsak hasítással, mint ahogy ez általában igaz is), *nem* egyenlő az „egy hasításig megtett átlagos távolsággal”.

- $\alpha_S \simeq 18,3$ MeV. Ez a felületi tag: a felületen lévő nukleonoknak kevesebb szomszédjuk van, tehát kevésbé járulnak hozzá a kötési energiához.
- $\alpha_C \simeq 0,714$ MeV. Ez a Coulomb-tag, a protonok taszítását írja le. Ezt — ismerve a magsugár és $A^{1/3}$ közötti arányosságot — tényleg ki lehet számítani (alább ki is számítjuk).
- $\alpha_A \simeq 23,2$ MeV. Ez az aszimmetriatag vagy Pauli-tag: a minél szimmetrikusabb (protonszám és neutronszám minél egyenlőbb) konfigurációkat favorizálja². Ha a magot ideális Fermi-gáznak tekintjük, kijön, hogy ez az energiatag így függ A -tól és Z -tól, ld. lentebb.
- $\delta(A, Z)$ a párenergia; kifejezi, hogy a magerő spinfüggő, és ezért a páros-páros atommagoknak (ahol azonos spinbeállítás lehetséges) erősebben kötöttek. $\delta(A, Z)$ alakjára empirikusan az adódik, hogy ennek értéke rendre $\frac{\alpha_P}{A^{1/2}}$, 0 , $-\frac{\alpha_P}{A^{1/2}}$ ha páros-páros, páros-páratlan, ill. ha páratlan-páratlan atommagról van szó. α_P értéke kb. 12 MeV.

2.2. Stabilitási völgy, vastócsa

Kiszámíthatjuk, hogy adott A -ra melyik Z a legstabilabb: jelöljük ezt $Z_0(A)$ -val. A (2.2) adott A melletti Z szerinti deriváltjának zérushelye (a párenergiát most elhagyva):

$$-\alpha_C \frac{2Z}{A^{1/3}} + 4\alpha_A \frac{A-2Z}{A} = 0 \quad \Rightarrow \quad Z_0(A) = \frac{A}{2} \frac{1}{1 + \frac{\alpha_C}{4\alpha_A} A^{2/3}}. \quad (2.3)$$

A stabilitási völgy: adott A -kra a $Z_0(A)$ környéke, ez az A - Z térképen egy „völgyként” jelenik meg.

Mivel $\frac{\alpha_C}{4\alpha_A}$ értéke kb. $7,694 \cdot 10^{-3}$, kis atommagoknál $Z_0(A) \approx A/2$ (ez tehát a Pauli-energia miatt van). Nagyobb magoknál az elektromos taszításból származó energia eltolja az egyensúlyt a nagyobb neutronszámok irányába. Ennek ismert fenomenológiai következményei vannak: maghasadás során felszabadul pár fölös neutron, hasadási láncreakció lehetséges. A hasadásban keletkező izotópok szinte mind β^- -bomlók (mivel neutrondúsak), alig akad β^+ -bomló. (A párenergia miatt van néhány).

Kiszámíthatjuk azt is ezek után, hogy melyik a legerősebben kötött atommag, azaz melyikben jut egy nukleonra a legtöbb kötési energia. Beírva $Z_0(A)$ -t (2.2)-be, a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d}{dA} \left[\alpha_V - \frac{\alpha_S}{A^{1/3}} - \alpha_C \frac{Z_0^2}{A^{4/3}} - \alpha_A \frac{(A-2Z_0)^2}{A^2} \right] = 0. \quad (2.4)$$

A Z_0 természetesen függ A -tól, a (2.3)-ban megadott módon. Kicsit tovább alakítva azt kapjuk, hogy³

$$\frac{\alpha_S}{3A^{1/3}} + \frac{4Z_0^2}{A^2} \left(2\alpha_A + \frac{\alpha_C}{3} A^{2/3} \right) - 2\alpha_A \frac{2Z_0}{A} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_S + \frac{\alpha_C \alpha_S}{2\alpha_A} A^{2/3} + \frac{\alpha_C^2 \alpha_S}{16\alpha_A^2} A^{4/3} - \frac{\alpha_C}{2} A = 0. \quad (2.5)$$

Ez negyedfokú egyenlet $A^{1/3}$ -ra, meg lehet keresni a megoldását. A fent (a (2.2) formula után) megadott paraméterekkel a megoldás $A_0 = 72$, $Z_0 = 32$ -nek adódik. A minimumhely elég „lapos”, a paraméterek egészen kis változtatása is lényegesen odébbtolja. Mindenesetre látszik, hogy a közepes atommagoknak a legmélyebb a kötésük: a Coulomb-energia még nem taszítja szét őket, de a felületi energia már kicsi: be tudnak kapcsolódni a vonzásba sokan. A valóságban az $A_0 = 56$, $Z_0 = 26$ -os vas a legmélyebben kötött mag, eszerint a vasig bezárólag mind a maghasadás, mind a fúzió energiát szabadít fel.

²Ha „héjakra” gondolunk, akkor minden héjon 2 proton és 2 neutron lehet (ezek fermionok, érvényes rájuk a Pauli-elv); amelyikből több van magban, azok „pazarlóbban” tudják csak betölteni a héjakat: többen kerülnek magasabb energiájú állapotba, mintha minden héjra juthatna 4 nukleon.

³Egy segítség: az A -tól való függés megjelenik expliciten és $Z_0(A)$ -n keresztül is, de $Z_0(A)$ -t éppen az mondta meg, hogy ennek a függvénynek (illetve A -szorosának, de az lényegtelen) fix A mellett Z szerinti deriváltja legyen 0. Tehát elég az explicit A -függés deriváltját kiszámolni, a $Z_0(A)$ -függésen keresztüli közvetett deriválással nem kell törődnünk.

2.3. A Yukawa-potenciál

A térfogati tag jellegéből — mindegyik nukleon csak a szomszédjával hat kölcsön — a magerő rövid hatótávolságára lehet következtetni. A Yukawa-potenciál az első ötlet volt ilyen potenciálra; eredeti levezetése egy m tömegű részecske, mint közvetítő részecske relativisztikus hullámegyenletén alapul, mely a Φ térmennyiségre így írható (a fotonnak, mint az elektromágneses kölcsönhatás közvetítőjének analógiájára):

$$\square\Phi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - \Delta\Phi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \square\Phi + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Phi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - \Delta\Phi + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Phi = 0. \quad (2.6)$$

Keressünk sztatikus gömbszimmetrikus megoldást⁴, azaz amikor $\varphi(r)$ függés van. A Laplace-operátor gömbi koordinátás kifejezése alapján ekkor a megoldandó egyenlet és a megoldás:

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Phi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Phi) = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}(r\Phi) \quad \Rightarrow \quad r\Phi = \beta_1 e^{-\frac{r}{b}} + \beta_2 e^{\frac{r}{b}}, \quad \text{ahol } b = \frac{\hbar c}{m}. \quad (2.7)$$

Az exponenciálisan növekvő tényezőt elhagyva a Yukawa-potenciál tehát a következő alakú:

$$\Phi(r) = -\frac{g^2}{r} e^{-r/b}, \quad b = \frac{\hbar c}{m}, \quad (2.8)$$

ahol β_1 helyett bevezettük a g -vel jelölt *csatolási állandót*. Az ilyen erő hatótávolsága tehát kb. az itt bevezetett b mennyiség. Tudva, hogy ez kb. 1 fm, a részecske tömegére nagyságrendileg 200 MeV adódik. A *pion* nevű részecske közvetíti a Yukawa-kölcsönhatást; ez pszeudoskálár, azaz leírhatja a Φ mező. Háromféle van: π^\pm (ezek egymás antirészecskéi) és π^0 ; $m_{\pi^\pm} = 139$ MeV, $m_{\pi^0} = 135$ MeV.

2.4. Elektrosztatikus energia

Egy egyenletesen töltött, R sugarú, Q töltésű gömb $E(r)$ elektromos tere a gömbön belül és kívül:

$$E_{bent}(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{r}{R^3}, \quad E_{kint}(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2}. \quad (2.9)$$

A teljes $U = \frac{\epsilon_0}{2} \int E^2 d\mathbf{r}$ térenergia:

$$U = \frac{\epsilon_0}{2} \frac{Q^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \left(4\pi \int_0^R r^2 \frac{r^2}{R^6} dr + 4\pi \int_R^\infty r^2 \frac{1}{r^4} dr \right) = \frac{3}{5} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}. \quad (2.10)$$

Másképp is megkaphatjuk ezt: kiszámolva a munkát, amikor a végtelenből a töltött, dr vastagságú gömbhéjakat egymás után a már odakerült töltés tere ellenében odavisszük. A ρ töltéssűrűség $\frac{Q}{(4/3)\pi R^3}$, ezzel:

$$U = \int_0^R \frac{4}{3} r^3 \pi \rho \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \cdot 4\pi r^2 \rho dr = \frac{4\pi\rho^2}{3\epsilon_0} \int_0^R r^4 dr = \frac{4\pi}{3\epsilon_0} \left(\frac{Q}{\frac{4}{3}R^3\pi} \right)^2 \frac{R^5}{5} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{5} \frac{Q^2}{R}. \quad (2.11)$$

Az eredmény ugyanaz, mint előbb⁵. Ha $R = 1,2$ fm $\cdot A^{1/3}$, akkor, mivel $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{1,2 \text{ fm}} \simeq 1196$ keV, az α_C -re 0,718 MeV adódik, ami tényleg kb. annyi, mint a Weizsäcker-formulában szereplő empirikus paraméter.

⁴ A síkhullám-megoldások $e^{ikr-i\omega t}$, $\omega^2 = (ck)^2 + m^2c^2/\hbar^2$ alakúak, tehát az itt bevezetett m tényleg a részecske tömege.

⁵ Kitekintés: nyilván hasonló képlet adja meg egy homogén gravitáló gömb „összeállásakor” felszabaduló energiát. Számítsuk ki ezt pl. a Napra, és azt is, hogy csupán ez az energia mennyi ideig fedezné a Nap mai teljesítményét!

2.5. Aszimmetria-energia, Fermi-gáz modell

Képzeljünk el, hogy az atommag egy $V = \frac{4}{3}R^3\pi$ térfogatú gömbbe zárt, Z darab protonból és $A - Z$ darab neutronból álló nulla hőmérsékletű ideális, azaz kölcsönhatásmentes Fermi-gáz! (A nukleonok fermionok.) Egy N részecskét V térfogatban tartalmazó Fermi-gázban $T = 0$ hőmérsékleten a 0-tól a p_F Fermi-impulzusig minden lehetséges állapot betöltődik. A p_F impulzushoz tartozó gömb (a Fermi-gömb) térfogata $4\pi p_F^3/3$, egy $d^3\mathbf{p}$ fázistér-cellában $gVd^3\mathbf{p}/h^3$ darab állapot „fér el”, ahol g a spin-degeneráció (elektronra, protonra, neutronra $g = 2$). Ha összesen N részecskénk van, akkor a Fermi-impulzus:

$$\frac{gV}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3 = N \quad \Rightarrow \quad p_F = h \sqrt[3]{\frac{3}{4g\pi}} \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}, \quad (2.12)$$

és ezt használva⁶ az E összenergia (m a részecske tömege):

$$E = \frac{gV}{h^3} \int_0^{p_F} 4\pi p^2 \frac{p^2}{2m} dp = \frac{2\pi g V p_F^5}{5 m h^3} = \frac{3N}{5} \frac{p_F^2}{2m} = \frac{3N}{5} \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4\pi g}\right)^{2/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \quad (2.13)$$

Nézzünk most V térfogatban Z protont és $A - Z$ neutron! Az m tömeg ekkor az m_n nukleontömeg, az összenergia pedig, bevezetve az $x = (A - 2Z)/A$ „aszimmetria-paramétert”, a következő:

$$E = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m_n} \left(\frac{3}{4\pi g V}\right)^{2/3} \left(Z^{5/3} + (A - Z)^{5/3}\right) = \frac{3A}{5} \frac{h^2}{2m_n} \left(\frac{3A}{4\pi g V}\right)^{2/3} \frac{(1+x)^{5/3} + (1-x)^{5/3}}{2^{5/3}}. \quad (2.14)$$

Az x -ben másodrendig $(1+x)^{5/3} \simeq 1 + 5x/3 + 5x^2/9$, így kis x -ekre így alakíthatjuk az energia kifejezését:

$$E \simeq \frac{3A}{5} \frac{h^2}{2m_n} \left(\frac{3A}{8\pi g V}\right)^{2/3} + \frac{3A}{5} \frac{h^2}{2m_n} \left(\frac{3A}{8\pi g V}\right)^{2/3} \frac{5x^2}{9}. \quad (2.15)$$

Ha most beírjuk, hogy $V = A \frac{4\pi}{3} r_0^3$, akkor a következőt kapjuk:

$$E \simeq \frac{3}{20} \frac{h^2}{2m_n r_0^2} \left(\frac{9}{4\pi^2 g}\right)^{2/3} A + \frac{1}{12} \frac{h^2}{2m_n r_0^2} \left(\frac{9}{4\pi^2 g}\right)^{2/3} \frac{(A - 2Z)^2}{A}. \quad (2.16)$$

Kaptunk tehát egy térfogati energia jellegű és egy Pauli-jellegű tagot (ezek alakja olyan, mint a (2.2) formulában). Ebben a modellben (mint a valóságban is) a proton-neutron aszimmetria csökkenti a kötési energiát; az együttthatóra adódó kb. 11,15 MeV nagyjából fele a Weizsäcker-formula α_A együttthatójának. A térfogati energia viszont itt pozitív, a Weizsäcker-formulában pedig negatív (ez okozza a kötést): utóbbinak értelmezéséhez nyilván szükség van a (most elhagyott) vonzó kölcsönhatás figyelembevételére.

2.6. Párenergia

A párenergia miatt stabil páratlan-páratlan atommagok csak a periódusos rendszer elején vannak: $D=^2\text{H}$, ^6Li , ^{10}B , ^{14}N , több nincs is. Ezeknek is általában nagy a neutronbefogási hatáskeresztmetszetük. A ^{10}B -t atomreaktorok szabályozórúdjaiban ill. neutronelnyelőként alkalmazzák. A légkör nitrogénje (^{14}N) előszeretettel nyel el kozmikus neutron, kormeghatározásra alkalmas ^{14}C -t keltve: $^{14}\text{N} + n \rightarrow ^{14}\text{C} + p$. A lítium-6 tríciumot termel: $^6\text{Li} + n \rightarrow ^4\text{He} + T$, ld. „száraz” hidrogénbomba. (A D kivételnek tűnik: noha a trícium szinte sosem vesz fel neutron, a D is alig; az ^1H sokkal jobban „eszi” a neutronokat: emiatt útermészetes uránnal működő atomreaktorban könnyűvizet nem lehet moderátorként alkalmazni, nehézvizet viszont igen.)

Általában is egy atom páratlan neutronot tartalmazó izotópjai jobban befogják a neutronokat, mint a párosak. Néhány páratlan-páratlan atommag érdekes bomlásokat mutat, mint pl. a ^{40}K : ez β^+ és β^- bomló is; mindkettővel növelni tudja a kötési energiáját.

⁶ A (2.12) egyenletben $\sqrt[3]{3/\pi}$ értéke majdnem 1, a $\sqrt[3]{4g}$ értéke pedig $g = 2$ -re (vagyis szinte minden fermionra) 2. Hasznos ökölszabály tehát a következő: a gázban V/N az egy részecskére jutó térfogat, $(V/N)^{1/3}$ a becsült d_0 távolság a részecskék között, ebből a Fermi-impulzus $p_F \sim h/2d_0$, vagyis feleannyi, mint amit a de Broglie-hipotézis alapján ösztönösen várnánk.

3. Héjmodell

3.1. Mágikus számok

A cseppmodell nem tud a „mágikus számokról”: ezek a 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, ????. Az ilyen nukleonszámú magok különösen stabilak. (A következő mágikus szám még csak elméletileg jósolható.) Példák: az ónnak ($Z = 50$) van a legtöbb (10) stabil izotópja. Az ólom ($Z = 82$) nem bomlik tovább α -bomlással. A ^{135}Xe 81 neutronjához csak egy hiányzik, hogy 82 legyen: ez a legerősebb „reaktorméreg”, neutronbefogási hatáskeresztmetszete extrán nagy. A duplán mágikus magok gerjesztési energiái kiugróan nagyok, és nem szívesen vesznek fel újabb nukleont. Ilyenek pl.: ^4He ($A = 5$ -ös mag egyáltalán nincsen), ^{16}O , ^{40}Ca , ^{208}Pb .

A mágikus számok „héjakról” árulkodnak. Úgy tárgyaljuk őket, hogy feltesszük: a nukleonok a magban valamilyen (végső soron egymás által létrehozott) potenciálban mozognak: ez az *önkonzisztens tér*. Persze ezt a párkölcsönhatás pontos alakját ismerve kellene meghatározni, de ez nem egyszerű. Ehelyett induljunk ki valamilyen félig indokolható egyszerűbb közelítésből! Ismert pl. a Woods-Saxon-féle potenciális energia:

$$V_{WS}(r) = \frac{V_0}{\exp\left(\frac{r-R}{\sigma}\right) + 1}. \quad (3.1)$$

Ez kb. R méretű tartományban kb. konstans negatív, $r > R$ -re pedig gyorsan tart 0-hoz. Azonban ezt nem egyszerű megoldani. Próbálkozzunk először egy egyszerűbb esettel, a harmonikus potenciállal!

3.2. Gömbszimmetrikus harmonikus oszcillátor I. — derékszögű koordináták

• Mit mondhatunk az energiaszintekről, paritásról?

Az egydimenziós oszcillátor megoldása ismert. Az energiaszintek az $n \in \mathbb{N}_0^+$ kvantumszámmal kifejezve:

$$\hat{H}\psi^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^{(1)} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 \psi^{(1)} = E\psi^{(1)} \quad \Rightarrow \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0, \quad (3.2)$$

a normált $\psi_n^{(1)}(x)$ hullámfüggvények pedig a H_n Hermite-polinomokkal fejezhetők ki:

$$\psi_n^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \frac{\gamma}{\sqrt{\pi}} e^{-\gamma^2 x^2/2} H_n(\gamma x), \quad \gamma \equiv \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}, \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \quad (3.3)$$

A háromdimenziós oszcillátor energiaszintjeit tehát három $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}_0^+$ természetes szám jellemzi:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega_0 \left(N + \frac{3}{2}\right), \quad N \equiv n_1 + n_2 + n_3, \quad \psi(x, y, z) = \psi_{n_1}^{(1)}(x) \psi_{n_2}^{(1)}(y) \psi_{n_3}^{(1)}(z). \quad (3.4)$$

Az N megadása rögzíti az energiát, és a paritást is: a H_n Hermite-polinomok páros (páratlan) n esetén párosak (páratlanok), így $\psi_{n_1 n_2 n_3}$ páros vagy páratlan, ha $N = n_1 + n_2 + n_3$ páros vagy páratlan.

• Hány különböző, adott N -hez tartozó (azaz hány különböző adott energiájú) állapot van?

$N = 0$ -ra csak egy lehetőség, $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ van. $N = 1$ -re és $N = 2$ -re három, illetve hat:

	$N = 0$	$N = 1$			$N = 2$					$N = 3$	
n_1	0	1	0	0	2	0	0	1	1	0	...
n_2	0	0	1	0	0	2	0	1	0	1	...
n_3	0	0	0	1	0	0	2	0	1	1	...

Általában: ahányféleképpen N -et fel lehet bontani három nemnegatív egész szám összegére. Könnyű látni, hogy ez a szám éppen

$$\frac{(N+1)(N+2)}{2}. \quad (3.5)$$

A harmonikus oszcillátorból kapott energiaszintek felfoghatók „héjaknak”, amik egymás után töltődnek be. Egy héjon 4 nukleon foglalhat helyet: 2 proton és 2 neutron, mindkét pár ellentétes spinbeállással.

3.3. Gömbszimmetrikus harmonikus oszcillátor II. — gömbi koordináták

• A Schrödinger-egyenlet megoldása

Keressünk most határozott impulzuszórájú energiasajátállapotokat: az alábbi módon felvéve a hullámfüggvényt az impulzuszórájú nagysága és z tengelyre vett vetülete határozott lesz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{m\omega^2}{2}r^2\psi = E\psi, \quad \psi(r, \vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) R(r). \quad (3.6)$$

Behelyettesítve, áttérve r helyett a dimenziótlan x változóra, az $E = \hbar\omega_0\varepsilon$ jelöléssel azt kapjuk, hogy

$$r = \frac{x}{\gamma}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}, \quad E = \hbar\omega_0\varepsilon \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2R}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dR}{dx} - \frac{l(l+1)}{x^2}R - x^2R + 2\varepsilon R = 0. \quad (3.7)$$

Alakítsuk tovább, az alábbi módon bevezetett $g(x)$ függvényt tekintve ismeretlennek⁷:

$$R(x) = x^l e^{-x^2/2} g(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2g}{dx^2} + 2\left(\frac{l+1}{x} - x\right)\frac{dg}{dx} + 2\left(\varepsilon - l - \frac{3}{2}\right)g = 0. \quad (3.8)$$

Ez az egyenlet az $x = \sqrt{t}$ helyettesítéssel egy ismert alakra hozható:

$$x = \sqrt{t}, \quad \frac{d}{dx} = 2\sqrt{t}\frac{d}{dt}, \quad \frac{d^2}{dx^2} = 2\frac{d}{dt} + 4t\frac{d^2}{dt^2} \quad \Rightarrow \quad t\frac{d^2g}{dt^2} + \left(l + \frac{3}{2} - t\right)\frac{dg}{dt} - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \varepsilon\right)g = 0. \quad (3.9)$$

Az $a, b \in \mathbb{C}$, $-b \notin \mathbb{N}$ paraméterektől és a $z \in \mathbb{C}$ változótól függő $F(a, b, z)$ függvényt, az ún. elfajult hipergeometrikus függvényt az alábbi, minden z -re konvergens hatványsor definiálja, melyről könnyű ellenőrizni, hogy eleget tesz az ún. hipergeometrikus differenciálegyenletnek (itt a vessző z szerinti deriváltat jelent):

$$F(a, b, z) = 1 + \frac{a}{b}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)}\frac{z^2}{2!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k)\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b+k)}\frac{z^k}{k!}, \quad \Rightarrow \quad zF'' + (b-z)F' - aF = 0. \quad (3.10)$$

A (3.10) és (3.9) egyenletek alapján tehát összerakhatjuk a Schrödinger-egyenlet megoldását⁸:

$$\psi \propto r^l e^{-\gamma^2 r^2/2} F\left(\frac{l+3/2-\varepsilon}{2}, l + \frac{3}{2}, \gamma^2 r^2\right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (3.11)$$

Be lehet látni, hogy nagy z -re általában $F(a, b, z) \propto e^z$, ekkor (3.11) nem normálható hullámfüggvényt ad meg. Egyetlen kivétel az, ha $a = -n$ negatív egész szám: ekkor az $F(a, b, z)$ függvény a (3.10) definícióból láthatóan egy n -edfokú polinom⁹, és a hullámfüggvény normálható lesz. Tehát az energiaszintek:

$$\varepsilon = 2n + l + \frac{3}{2} \Leftrightarrow E = \hbar\omega_0\left(N + \frac{3}{2}\right), \quad N = 2n + l. \quad (3.12)$$

• Mint mondhatunk az állapotok paritásáról, elfajultságáról?

Összhangban a korábbiakkal, páros N -ek páros, páratlan N -ek páratlan állapotoknak felelnek meg, hiszen az l impulzuszórájú állapot paritása $(-1)^l$.

⁷Az exponenciális bevezetését az egydimenziós eset sugallja, az x^l szorzót pedig az, hogy minden $U(r)$ potenciálban, amire $\lim_{r \rightarrow 0} [r^2 U(r)] = 0$, vagyis legalábbis nem válik túl gyorsan végtelenné az origóban, a Schrödinger-egyenletet $r = 0$ környékén felírva könnyen belátható, hogy az l impulzuszórájú hullámfüggvények az origóban r^l hatvánnyal indulnak.

⁸Ezzel vigyázni kell: a (3.10)-ben szereplő differenciálegyenlet másodrendű, azaz van az $F(a, b, z)$ hipergeometrikus függvényen kívül egy másik lineárisan független megoldás is. Könnyen belátható, hogy b nem egész értéke esetén (ez van (3.9)-ben is) a $z^{1-b} F(a-b+1, 2-b, z)$ függvény jó másik megoldásnak. Az ebből (3.11) mintájára összerakott hullámfüggvény azonban $r = 0$ -ban szinguláris lesz, amint az látható az r hatványainak összeszámlálásából, ezért vetjük el ezt a lehetőséget. Más a helyzet egy dimenzióban: egészen hasonló átalakításokkal az egydimenziós (3.2) egyenlet is megoldható hipergeometrikus függvényekkel, és ott a páratlan n -ű állapotok ebből a másik lineárisan független megoldásból származnak. Feladat: ellenőrizzük! Egyúttal összefüggéseket fogunk találni a hipergeometrikus függvény és a Hermite-polinomok között.

⁹Ezen polinomok között megtalálhatjuk pl. a Hermite-polinomokat (ld. a 8. l. megjegyzetet is) és a Laguerre-polinomokat is.

Ha $N = 2k$ páros, akkor N -et $k + 1$ -féleképpen lehet (3.12) szerint n -nel és l -lel előállítani ($0 \leq l \leq 2k$ páros), és minden l -hez tartozhat $2l + 1$ darab különböző m kvantumszámú állapot: adott páros N -re az állapotok száma tehát $1 + 5 + 9 + \dots + (4k + 1) = (k + 1)(2k + 1) = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$. Ha $N = 2k + 1$ páratlan, akkor N -et $k + 1 = (N + 1)/2$ -féleképpen lehet n -nel és l -lel előállítani ($1 \leq l \leq 2k + 1$ páratlan), összeadva a lehetséges m -ek számát $3 + 7 + 11 + \dots + (4k + 3) = (k + 1)(2k + 3) = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$ adódik ismét.

Megkaptuk tehát, hogy a határozott impulzusmomentumú állapotokat összeszámolva is ugyanaz az adott N -hez tartozó szint elfajultsága, mint (3.5)-ben láttuk.

3.4. Héjak az atommagban, spin-pálya kölcsönhatás

• A nívók általános jellemzése

Bármilyen gömbszimmetrikus potenciálban a nívókat impulzusmomentumuk szerint (az l kvantumszámukkal) jellemezhetjük. A nukleonok feles spinje még állhat kétfelé a pályamomentumhoz képest: a teljes j impulzusmomentum $j = l + 1/2$ és $j = l - 1/2$ lehet. Ezeken kívül még valamilyen n „főkvantumszámot” kell bevezetni. Az l , n és j megadása már teljesen jellemzi a nívót; ez az m kvantumszám szerint még $2j + 1$ -szeresen elfajult. Az $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 \dots$ értékeket szokás szerint az $s, p, d, f, g, h, i, \dots$ betűkkel jelöljük az $n + 1$ mellett, a teljes impulzusmomentumot indexbe írjuk¹⁰. Így tehát pl. a $3f_{7/2}$ állapot az $n = 2$ főkvantumszámú, $l = 3$ kvantumszámú (emiatt páratlan paritású) nívó, melyre $j = l + 1/2$. Ebben $2j + 1 = 8$ darab azonos nukleon lehet (különböző m -ekkel). Az előző szakasz szerint harmonikus potenciálban az n ökvantumszám lehet éppen a (3.12)-ben bevezetett n : ekkor az energia $\hbar\omega_0(N + 3/2)$, $N = 2n + l$. (Például az előbb említett $3f_{7/2}$ állapotra ekkor $N = 2n + l = 7$.) Ha az önkonzisztens tér potenciáljára mást teszünk fel, akkor az n főkvantumszám jelentése esetleg más lesz. Felmerül tehát a magnívók betöltési sorrendjének kérdése.

• A spin-pálya kölcsönhatás szerepe

A nukleon spinjét és pályamomentumát csatoló kölcsönhatás jelentős effektusokhoz vezet; operátora

$$\hat{V}_{sl} = -f(r)\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{s}} = -\frac{f(r)}{2} \left[(\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}})^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2 \right] = -\frac{f(r)}{2} \left[\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2 \right], \quad (3.13)$$

ahol $f(r)$ valamilyen függvény, $\hat{\mathbf{s}}$, $\hat{\mathbf{l}}$ és $\hat{\mathbf{j}}$ pedig a spin, a pálya- és a teljes impulzusmomentum operátorai. A (3.13) kölcsönhatás megjelenése azt okozza, hogy a $j = l \pm 1/2$ állapotok energiái eltolódnak:

$$\Delta E_{j=l+\frac{1}{2}} = -\frac{\bar{f}}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] = -\frac{\bar{f}}{2} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = -\frac{\bar{f}}{2} l, \quad (3.14)$$

és hasonlóan

$$\Delta E_{l-\frac{1}{2}} = -\frac{\bar{f}}{2} \left[\left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = \frac{\bar{f}}{2} (l+1). \quad (3.15)$$

Itt a (3.13)-beli $\hat{\mathbf{j}}^2$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ és $\hat{\mathbf{s}}^2$ operátorokat a sajátértékeikkel helyettesíthetjük (a nívó impulzusmomentuma határozott volt), az \bar{f} pedig az f függvénynek a nívó r -függésével vett (l -től, j -től és s -től független) átlaga.

Noha az önkonzisztens tér spinfüggetlen (és eszerint a $j = l \pm 1/2$ -es nívók energiája meg kellene egyezzen), a tapasztalat szerint adott l -re a $j = l + 1/2$ -es állapotok kisebb energiájúak a $j = l - 1/2$ -eseknél¹¹. Ezt tehát a spin-pálya kölcsönhatás okozza: levonhatjuk a következtetést, hogy $f(r)$ pozitív¹².

¹⁰Két megjegyzés: 1) A főkvantumszámot itt $n = 0, 1, 2 \dots$ értékekkel szokás venni, azaz $n = 0$ a legalacsonyabb; ez megfelel a harmonikus oszcillátornál látottaknak. 2) Az s állapotokban ($l = 0$) a j mindig $1/2$, ezt ki sem írjuk sokszor.

¹¹Érdekes megfigyelni, hogy a $2j + 1 = 2(l + 1)$ darab $j = l + \frac{1}{2}$ -es nívó energiája l -lel arányosan lefelé, a $2j + 1 = 2l$ darab $j = l - \frac{1}{2}$ -es nívó energiája pedig $l + 1$ -gyel arányosan felfelé tolódik el, vagyis a nívók „átlagos” energiája nem változik.

¹²Egyből csak az látszik, hogy \bar{f} pozitív, mivel azonban ez minden nívó koordinátafüggésére képzett átlagra igaz, minden bizonyos igaz az $f(r) > 0$ feltétel is.

3.5. A nívók betöltési sorrendje

- A harmonikusoscillátor-modellben a nívók növekvő $N = 2n + l$ szerint vannak sorba téve, azaz: $N = 0$ ($1s$), $N = 1$ ($1p$), $N = 2$ ($2s, 1d$), $N = 3$ ($2p, 1f$), $N = 4$ ($3s, 2d, 1g$), stb.
- A valósághoz hűbb potenciálok lassabban nőnek nagy r -re: a nagyobb l -ű (azaz a középponttól átlagosan távolabb elhelyezkedő) nívók energiája nem olyan nagy. Megszűnik tehát az adott N -es nívók elfajultsága (azonos $N = 2n + l$ -re a kisebb n , nagyobb l -ű állapotok lejjebb kerülnek, mint a nagyobb n , kisebb l -űek). A sorrend így ilyesmi lenne: $1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 3s$, stb.
- A spin-pálya kölcsönhatás miatt a $j = l + 1/2$ -es és a $j = l - 1/2$ -es nívók energiája különböző lesz. Bonyodalmat okoz, hogy ez a felhasadás nagyobb lehet, mint a nívók eredeti távolsága, így azok „összekeveredhetnek”. Ez is történik; a megfigyelt nívósorrend a következő (**ezt kell megjegyezni**):

$$\underbrace{1s}_{2\text{db}} \underbrace{1p_{\frac{3}{2}} 1p_{\frac{1}{2}}}_{6\text{db}} \underbrace{1d_{\frac{5}{2}} 2s 1d_{\frac{3}{2}}}_{12\text{db}} \underbrace{1f_{\frac{7}{2}}}_{8\text{db}} \underbrace{2p_{\frac{3}{2}} 1f_{\frac{5}{2}} 2p_{\frac{1}{2}} 1g_{\frac{9}{2}}}_{22\text{db}} \underbrace{2d_{\frac{5}{2}} 1g_{\frac{7}{2}} 1h_{\frac{11}{2}} 2d_{\frac{3}{2}} 3s}_{32\text{db}} \underbrace{2f_{\frac{7}{2}} 1h_{\frac{9}{2}} 1i_{\frac{13}{2}} 2f_{\frac{5}{2}} 3p_{\frac{3}{2}} 3p_{\frac{1}{2}} \dots}_{44\text{db}} \quad (3.16)$$

Egy j indexű nívóban $2j + 1$ darab állapot lehet; feltüntettük, hogy hogyan állnak össze ezek a nívók a mágikus számokká: kijönnek a 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 mágikus számok¹³.

3.6. Alapállapotú magok „spinje” és paritása, példák

Elnevezés: atommagok spinjén a teljes impulzusmomentumukat értjük.

- A tapasztalat szerint a nukleonok számára előnyös, ha nulla teljes impulzusmomentumú pp ill. nn párokba rendeződnek. Így a *páros-páros* magok (páros neutron, páros proton) alapállapotú spinje 0, paritása pozitív.
- *Páros-páratlan magok* alapállapotának j „spinjét” és π paritását az előző szabály alapján általában a páratlanul maradt nukleon héjbesorolásával lehet meghatározni. Az 1. táblázatban láthatunk erre néhány példát. Ez a szisztéma azonban nem minden esetben (sarkosabban: kb. az esetek felében) ad helyes eredményt.

Mag	A	Z	N	nívó	n	l	j	π	mért
⁷ Li	7	3	4	$1p_{3/2}$	0	1	3/2	-	$3/2^-$
¹³ C	13	6	7	$1p_{1/2}$	0	1	1/2	-	$1/2^-$
²³ Na	23	11	12	$1d_{5/2}$	0	2	5/2	+	$3/2^+$ (*)
²⁹ Si	29	14	15	$2s$	1	0	1/2	+	$1/2^+$
³⁵ Cl	35	17	18	$1d_{3/2}$	0	2	3/2	+	$3/2^+$
⁵⁷ Fe	57	26	31	$2p_{3/2}$	1	1	3/2	-	$1/2^-$ (*)
⁶⁷ Zn	67	30	37	$1f_{5/2}$	0	3	5/2	-	$5/2^-$
⁹⁵ Mo	95	42	53	$2d_{5/2}$	1	2	5/2	+	$5/2^+$
¹¹³ Cd	113	48	65	$1h_{11/2}$	0	5	11/2	-	$1/2^+$ (*)
¹³⁵ Xe	135	54	81	$3s$	2	0	1/2	+	$3/2^+$ (*)
¹⁹⁷ Au	197	79	118	$2d_{3/2}$	1	2	3/2	+	$3/2^+$

1. táblázat. Példák páros-páratlan magok alapállapotának héjmodell-konfigurációjára. A megoldás menete: az A tömegszám és Z rendszám adott, $N = A - Z$ a neutrons szám. A páratlan nukleont a (3.16)-beli héjsorrend szerint „beosztjuk”. Leolvassuk a nívó jelét, j , l kvantumszámait, a paritás $(-1)^l$. Kövessük végig a gondolatmenetet! A *-gal jelölteknél az eredmény nem helyes. Általában is ez a héjmodell a magok kb. felére működik csak.

¹³ Hangsúlyozni kell, hogy itt azért inkább a kísérlet által „vezetett” elméleti erőlködésről, mint az elmélet kényszerítő erejű következményéről van szó; a spin-pálya kölcsönhatásnál látott \tilde{f} -ban és a potenciál nem harmonikus volta miatti torzításban nagy a „szabadság”; nem meglepő, hogy ezeket hozzá lehet hangolni a megfigyelt nívósorrendhez.

• *Páratlan-páratlan magok* alapállapotában két nukleont kell besorolnunk; ezek l indexe meghatározza az eredő paritást, de a proton és a neutron j kvantumszámát többféleképpen is össze lehet rakni eredő impulzusmomentummá (magspinné); hogy ezek közül melyik valósul meg, arra nincs általános szabály. A 2. táblázatban láthatunk erre példákat. Megjegyzésre érdemes a ^{40}K , aminek $j = 4$ -es spinje az oka a hasonló stílusú β -bomlásokhoz képest igen lassú ($T_{1/2} = 1,3 \cdot 10^9$ év) bomlásnak.

Mag				neutron			proton			Mért
Jel	A	Z	N	nívó	l_n	j_n^π	nívó	l_p	j_p^π	J^π
D (^2H)	2	1	1	1s	0	1/2 ⁺	1s	0	1/2 ⁺	1 ⁺
^6Li	6	3	3	1p _{3/2}	1	3/2 ⁻	1p _{3/2}	1	3/2 ⁻	1 ⁺
^{10}B	10	5	5	1p _{3/2}	1	3/2 ⁻	1p _{3/2}	1	3/2 ⁻	3 ⁺
^{14}N	14	7	7	1p _{1/2}	1	1/2 ⁻	1p _{1/2}	1	1/2 ⁻	1 ⁺
^{22}Na	22	11	11	1d _{5/2}	2	5/2 ⁺	1d _{5/2}	2	5/2 ⁺	3 ⁺
^{40}K	40	19	21	1d _{3/2}	2	3/2 ⁺	1f _{7/2}	3	7/2 ⁻	4 ⁻
^{60}Co	60	27	33	1f _{7/2}	3	7/2 ⁻	1f _{5/2}	3	5/2 ⁻	5 ⁺
^{82}Br	82	35	47	1f _{5/2}	3	5/2 ⁻	1g _{9/2}	4	9/2 ⁺	5 ⁻
^{134}Cs	134	55	79	2d _{5/2}	3	5/2 ⁻	2d _{3/2}	3	3/2 ⁻	4 ⁺
^{196}Au	196	79	117	2d _{3/2}	3	3/2 ⁻	2f _{5/2}	4	5/2 ⁺	2 ⁻

2. táblázat. Néhány páratlan-páratlan mag héjmodell-konfigurációja. Az utolsó páratlan nukleon besorolása ugyanúgy történik, mint a páros-páratlan esetben (ld. 1. táblázat). A kísérletileg ismert magspint és paritást nézve látszik, hogy a két páratlan nukleon j -i hol így, hol úgy adódnak össze eredő J magspinné. Ellenőrizzük a táblázatot! (Megjegyzés: az első négy izotópon kívül egyik sem stabil.)

4. Atommagok mágneses momentuma

A mágneses momentum egy adott árameloszlásra $\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})$, ha minden mozgó töltésre a töltés és a tömeg aránya állandó $\frac{q}{m}$, akkor $\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m} \mathbf{J}$, ahol \mathbf{J} a mechanikai impulzusmomentum. Elektronra viszont $\mu = g \frac{e}{2m_e} s = g \frac{e}{2m_e} \frac{\hbar}{2}$: mivel itt nem érvényes a „pörgő töltés” kép, be kell vezetni a g tényezőt (*giromágneses arány*), ami klasszikusan 1 lenne. A Dirac-egyenletből $g = 2$ jön ki, vagyis eszerint az elektron mágneses momentuma a $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$, az ún. *Bohr-magneton*, értéke $9,27 \cdot 10^{-24}$ J/T. (A valóságban az elektron g -faktora kicsit nagyobb 2-nél.)

Nukleonok mágneses momentumát *magmagneton* egységekben mérhetjük, ennek értéke: $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,05 \cdot 10^{-27}$ J/T. (Itt m_p a protontömeg; látszik, hogy ez az érték kb. 2000-szer kisebb az elektron mágneses momentumánál a nukleonok nagyobb tömege miatt.) A proton mágneses momentuma $2,79\mu_N$, a neutroné $-1,92\mu_N$ (azaz a neutron mágneses momentuma a spinjével ellentétes irányba mutat), tehát a protonra $g = 5,59$, neutronra $g = -3,93$. Összetett atommagoknak is van mágneses momentuma, ezzel foglalkozunk most. j spinű atommag g -faktora nyilván így definiálható: $\mu = g\mu_N j$.

4.1. Mágneses magrezonancia

Egy $\mu = g\mu_N j$ nagyságú mágneses momentum z irányú vetülete az m kvantumszámú impulzusmomentumvetületű állapotban nyilván $g\mu_N m$. A mágneses magrezonancia jelenségéhez praktikus oldalról elég megjegyezni, hogy B mágneses térbe helyezett atommagokra rezonáns elnyelést tapasztalunk ω frekvenciájú (általában rádiófrekvenciás) térre, ha teljesül, hogy $g\mu_N B = \hbar\omega$, a kvantumfeltétel az energiára¹⁴. Legjel-

¹⁴ „Tisztességesebben” tárgyalva egy spin mozgását rádiófrekvenciás külső EM térben megkaphatjuk ezt a feltételt.

lemzőbb a proton (hidrogénmag) esete; itt g értéke 5,59, $j = 1/2$, 1 T mágneses térnek megfelelő frekvencia tehát (az $m = \pm 1/2$ állapotok közötti átmenetre) $f = 42,63$ MHz frekvencia adódik.

• **Példa:**

Mekkora a ^{13}C atommag g -faktora, ha $B = 0,8$ T mágneses térben $f = 8,57$ MHz-nél látunk rezonanciát? Válasz: a ^{13}C mag feles spinű (ld. pl. korábban, a héjmodellnél, vagy táblázatból), a $2\mu B = hf$ képletből a mag mágneses momentuma $\mu = 3,55 \cdot 10^{-27}$ J/T, a $\mu = g \cdot \mu_N \cdot \frac{1}{2}$ összefüggés alapján ebből $g = 1,406$.

4.2. Schmidt-modell

• **Levezetés:**

A héjmodell keretein belül meghatározhatjuk magok mágneses momentumát, ha csak egy (páratlan) nukleon mozgása okozza azt¹⁵. Egy nukleon mágneses momentumának operátora $\hat{\mu} = \mu_N (g_l \hat{\mathbf{l}} + g_s \hat{\mathbf{s}})$, ahol \mathbf{l} és \mathbf{s} a pályamomentum és a spin operátorai (a páratlan nukleon héjkonfigurációja megmondja az l és j kvantumszámait); g_l és g_s a megfelelő giromágneses tényezők ($g_l = 1$, $g_s = 5,59$ protonra, és $g_l = 0$, $g_s = -3,93$ neutronra — a neutron a pályamozgással nem kelt mágneses momentumot). A teljes mágneses momentum nyilván $\hat{\mathbf{j}}$ irányába mutat; a mag g -faktora így írható: $\hat{\mu} = g\mu_N \hat{\mathbf{j}}$. A nukleon magban való mozgásra átlagolva, és kihasználva, hogy $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ az átlagokra is¹⁶, μ_N -nel egyszerűsítve írhatjuk, hogy

$$g\hat{\mathbf{j}} = g_l \hat{\mathbf{l}} + g_s \hat{\mathbf{s}} = \frac{g_l + g_s}{2} (\overline{\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}}) + \frac{g_l - g_s}{2} (\overline{\hat{\mathbf{l}} - \hat{\mathbf{s}}}) \Rightarrow g\hat{\mathbf{j}}^2 = \frac{g_l + g_s}{2} \overline{\hat{\mathbf{j}}\hat{\mathbf{j}}} + \frac{g_l - g_s}{2} (\overline{\hat{\mathbf{l}} - \hat{\mathbf{s}}}) (\overline{\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}}) \quad (4.1)$$

Az átlagolás a z irányú vetületek lehetséges értékeire történik adott teljes j , l és s esetén: a $\hat{\mathbf{j}}^2$, $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{\mathbf{s}}^2$ operátorokat ezért sajátértékeikkel helyettesíthetjük. Továbbá $(\overline{\hat{\mathbf{l}} - \hat{\mathbf{s}}}) (\overline{\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}}) = \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2$, és $j = l \pm \frac{1}{2}$ lehet, s nagysága pedig $\frac{1}{2}$, azaz $s(s+1) = \frac{3}{4}$. Ezeket összerakva, végigszámolva azt kapjuk, hogy

$$g = \frac{g_l + g_s}{2} + \frac{g_l - g_s}{2} \frac{l(l+1) - s(s+1)}{j(j+1)} \Rightarrow g = \frac{g_l + g_s}{2} + \frac{g_l - g_s}{2} \frac{(l - \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2})}{(l \pm \frac{1}{2})(l + 1 \pm \frac{1}{2})} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \dots \Rightarrow g = g_l \mp \frac{g_l - g_s}{2l + 1}, \quad \text{ha } j = l \pm \frac{1}{2}. \quad (4.2)$$

Nem mindegy persze, hogy neutron vagy proton a páratlanul maradt nukleon (g_l és g_s értéke más rájuk).

• **Példák:**

Határozzuk meg az alábbi magok giromágneses tényezőjét a héjmodell alapján! Be kell sorolni a páratlan nukleont (mit a héjmodellnél), majd az előző (4.2) képletet használni. A helyzet nem javul: eléggé pontatlan eredményeket ad a modell a legtöbb magra. Annyi igaz, hogy a legtöbb magra a giromágneses tényező a (4.2) egyenletből számított két érték közé esik: a $j = l + \frac{1}{2}$ és $j = l - \frac{1}{2}$ értékekhez ez alapján számolt g -ket mint l függvényeit *Schmidt-vonalaknak* hívjuk. (Persze ezek különbözőek protonra és neutronra).

4.3. Bonyolultabb esetek

Ha a mágneses momentumot nem egy nukleon mozgása okozza, akkor megpróbálhatjuk összeadni az egynukleon-járulékokat, de ettől nem várunk túl pontos eredményt (már az egyrészesek Schmidt-modell sem vezet túl jó eredményre, mint láttuk). Két, j_1 és j_2 impulzusmomentumú, g_1 és g_2 giromágneses tényezőt adó (ezeket pl. a Schmidt-modellből vehetjük) nukleon mágneses momentumát mindenesetre össze tudjuk adni, ha az eredő impulzusmomentum J : ehhez ugyanolyan módszert használhatunk, mint az előbb

¹⁵ Ez akkor lehet, ha a többi nukleon betöltött héjban van (csak egy „lóg ki”), vagy ha csak egy hiányzik a héj betöltéséhez.

¹⁶ Itt az átlagolást úgy kell érteni, hogy egy adott J teljes impulzusmomentumú és J_z vetületű állapot előáll, mint adott j_1 és j_2 teljes impulzusmomentumú állapotok lineárokombinációja (ld. Clebsch-Gordan-együtthatók). Esetünkben a pályamomentumról és a spinről van szó; minden ilyen lineárokombinálandó állapotban más és más lesz a $g_l \hat{\mathbf{l}} + g_s \hat{\mathbf{s}}$ operátor hatása, és ezeket kell mintegy súlyozva összeadni, ezt jelenti az „átlagolás”. A szövegben azt látjuk, hogy ezt egyszerűbben is megtehetjük.

Mag	A	Z	N	nívó	l	j	g (számolt)	g (mért)
^{13}C	13	6	7	$1p_{1/2}$	1(p)	1/2	1,277	1,405
^{15}N	15	7	8	$1p_{1/2}$	1(p)	1/2	-0,53	-0,567
^{17}O	17	8	9	$1d_{5/2}$	2(d)	5/2	-0,766	-0,758
^{33}S	33	16	17	$1d_{3/2}$	2(d)	3/2	0,766	0,429
^{37}Cl	37	17	20	$1d_{3/2}$	2(d)	3/2	0,082	0,456

3. táblázat. A Schmidt-modell alkalmazása néhány magra. A páratlan nukleon félkövérrrel van szedve, amelynek járulékát a (4.2) képlet szerint lehet kiszámítani. Ezek mind olyan magok, amelyekre teljesülnek a 15. lábjegyzet feltételei. Ellenőrizzük ezt, és a táblázatban szereplő értékeket!

a pályamomentum és a spin összezatolásánál (most $\hat{\mathbf{l}}$ és $\hat{\mathbf{s}}$ szerepében $\hat{\mathbf{j}}_1$ és $\hat{\mathbf{j}}_2$ áll, továbbá $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$.) Az eredő giromágneses tényező legyen g , ekkor az előbbi értelemben átlagolva:

$$\begin{aligned}
g\hat{\mathbf{J}} &= g_1\hat{\mathbf{j}}_1 + g_2\hat{\mathbf{j}}_2 = \frac{g_1 + g_2}{2} (\hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2) + \frac{g_1 - g_2}{2} (\hat{\mathbf{j}}_1 - \hat{\mathbf{j}}_2) \Rightarrow g\hat{\mathbf{J}}^2 = \frac{g_1 + g_2}{2} \hat{\mathbf{J}}^2 + \frac{g_1 - g_2}{2} (\hat{\mathbf{j}}_1^2 - \hat{\mathbf{j}}_2^2) \Rightarrow \\
&\Rightarrow g = \frac{g_1 + g_2}{2} + \frac{g_1 - g_2}{2} \frac{j_1(j_1 + 1) - j_2(j_2 + 1)}{J(J + 1)}. \tag{4.3}
\end{aligned}$$

Három vagy több nukleon járulékának összeadása csak egyéb speciális feltételezések mellett lehetséges. Ugyanez igaz a nem gömbszimmetrikus magokra is, ezeket most nem tárgyaljuk.

5. Kvantummechanikai szóráselmélet

5.1. Rugalmas szórás: alapvető megfontolások, szórásmátrix*

A $\hbar k$ impulzusú részecske rögzített centrumon való rugalmas szórását leíró hullámfüggvény a szórócentrumtól nagy távolságban egy befutó síkhullám és egy ugyanolyan hullámszámú kifutó gömbhullám összege:

$$\psi_k \approx e^{ikz} + \frac{f(\vartheta, \varphi)}{r} e^{ikr} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2. \tag{5.1}$$

Itt $f(\vartheta, \varphi)$ a szórásamplitúdó (ϑ és φ a szórás irányát megadó szögek), a $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ hatáskeresztmetszetre pedig a kimenő gömbhullám és a befutó síkhullám áramsűrűségének hányadosaként adódik a fenti összefüggés. A szórásamplitúdót a Schrödinger-egyenlet ilyen aszimptotikus viselkedésű megoldásának megkeresésével kaphatjuk meg. Erre több módszer is van: bizonyos értelemben „kis” potenciálokra alkalmazható a perturbációs számításra alapuló Born-közelítés, valamint általános vizsgálatokhoz hasznos a parciális hullámok módszere (ezeket ld. lentebb¹⁷). Előzetesen azonban hasznos lesz néhány általános megfontolás.

Ha a részecske valamilyen általános \mathbf{n}' irányban esik be, akkor a hullámfüggvény aszimptotikus alakja

$$\psi_k(\mathbf{r}) \approx e^{ikr\mathbf{nn}'} + \frac{f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')}{r} e^{ikr}, \tag{5.2}$$

ahol \mathbf{n}' a bejövő irány, \mathbf{r} pedig a hullámfüggvény változója, $r = |\mathbf{r}|$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Még általánosabban olyan szórási állapot is elképzelhető, amely ilyeneknek a lineáris kombinációja, az \mathbf{n}' függvényében megadott tetszőleges $B(\mathbf{n}')$ együtthatókkal (együttható-függvénnyel):

$$\psi_k(\mathbf{r}) \approx \int d\Omega' B(\mathbf{n}') e^{ikr\mathbf{nn}'} + \frac{e^{ikr}}{r} \int d\Omega' f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') B(\mathbf{n}'), \tag{5.3}$$

¹⁷Néhány esetben egzakt megoldás is található (pl. a Coulomb-térben), ezekkel most nem foglalkozunk.

ahol $d\Omega'$ az \mathbf{n}' térszögelemét jelenti. Az első tagot az $r \rightarrow \infty$ esetre gondolva átalakíthatjuk¹⁸:

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &\approx \frac{2\pi}{ikr} \left[e^{ikr} B(\mathbf{n}) - e^{-ikr} B(-\mathbf{n}) \right] + \frac{e^{ikr}}{r} \int d\Omega' f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') B(\mathbf{n}') \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{ik}{2\pi} \psi_k(\mathbf{r}) \approx -\frac{e^{-ikr}}{r} B(-\mathbf{n}) + \frac{e^{ikr}}{r} \int \left[\delta_{\mathbf{nn}'} + \frac{ik}{2\pi} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \right] B(\mathbf{n}') d\Omega'. \end{aligned} \quad (5.4)$$

5.2. Unitaritás, optikai tétel*

A szórásmatrix unitér: adott normájú bejövő részecskenyalázból ugyanakkor

Felírhatjuk ezt a feltételt a szórásamplitúdó-függvénnyel, $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ -vel kifejezve is:

Ebből egy érdekes összefüggés kapható, az $\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}'$ határesetben, amit az *előreszórás* esetének nevezhetünk¹⁹:

Ez az ún. optikai tétel, ami kapcsolatot teremt az előreszórás amplitúdója és a teljes hatáskeresztmetszet között.

Megjegyzés: Mivel csupán az S -mátrix unitaritását használtuk ki, érthetőnek látszik, hogy az optikai tétel sokkal általánosabb keretek között is igaz, nemcsak a most tárgyalt nemrelativisztikus kvantummechanikai rugalmas szórás esetében. Jelentősége azért nagy, mert a teljes hatáskeresztmetszet mérésére ad módszert csupán az előreszórás vizsgálatával.

5.3. Parciális hullámok

• Elméleti összefoglaló:

Rátérünk arra, hogy hogyan lehet kiszámítani a szórásamplitúdót, először centrális potenciálban (ekkor a szórásamplitúdó csak ϑ -tól függ). A parciális hullámok módszerében a Schrödinger-egyenlet $\hbar k$ nagyságú impulzusú részecske mozgását leíró $\psi_k(\mathbf{r})$ megoldását gömbfüggvények szerinti sorfejtéssel (azaz határozott impulzusmomentumú állapotok lineárkombinációjaként) keressük; a sugárirányú egyenlet a következő lesz:

$$\psi_k = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \vartheta) R_{kl}(r), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \frac{d^2 R_{kl}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{kl}}{dr} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) - k^2 \right] R_{kl}. \quad (5.5)$$

Az R_{kl} -ekkel felírt határozott impulzusmomentumú állapotok nem (5.1) alakúak, viszont az A_l -ek alkalmas választásával ki lehet belőlük keverni olyat, ami az. Állítás: ha a V potenciál elég gyorsan eltűnik $r \rightarrow \infty$ -re, akkor elérhető, hogy az R_{kl} -ek $r \rightarrow \infty$ -re érvényes kifejezéseiben az alábbi módon kerüljene elő a δ_l ún. fázistolások; ezekkel aztán kifejezhetjük az A_l -eket is:

$$R_{kl} \rightarrow \frac{2}{r} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right), \quad \text{ha } r \rightarrow \infty \Rightarrow A_l = \frac{2l+1}{2k} i^l e^{i\delta_l}. \quad (5.6)$$

¹⁸ Azt lehet mondani, hogy az $e^{ikr\mathbf{nn}'}$ nagy r esetén az \mathbf{n}' integrálási változó függvényében általában nagyon gyorsan oszcillál; csak onnan kapunk nem nulla járulékot, ahol \mathbf{nn}' -nek szélsőértéke van: az $\mathbf{n}' = \mathbf{n}$ és az $\mathbf{n}' = -\mathbf{n}$ körüli kis tartományokból, ahol viszont a B együttható-függvény konstansnak tekinthető. Eggyel precízebben: legyen ϑ és φ az \mathbf{n}' polárszögei a fix \mathbf{n} vektorhoz képest, $y = \cos \vartheta$, továbbá legyen $\tilde{B}(\vartheta) = \int_0^{2\pi} d\varphi B(\vartheta, \varphi)$. Parciális integrálást használva írhatjuk, hogy

$$ikr \int d\Omega' B(\mathbf{n}') e^{ikr\mathbf{nn}'} = ikr \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \tilde{B}(\vartheta) e^{ikr \cos \vartheta} = ikr \int_{-1}^1 \tilde{B}(y) e^{ikry} dy = e^{ikry} \tilde{B}(y) \Big|_{y=-1}^{y=1} - \int_{-1}^1 e^{ikry} \tilde{B}'(y) dy.$$

Az $r \rightarrow \infty$ esetben a második tag nullához tart, így (mivel egy konstans 0-tól 2π -ig integrálva egyszerűen 2π -vel szorzódik)

$$\lim_{r \rightarrow \infty} ikr \int d\Omega' B(\mathbf{n}') e^{ikr\mathbf{nn}'} = e^{ikr} \tilde{B}(1) - e^{-ikr} \tilde{B}(-1) = 2\pi e^{ikr} B(\mathbf{n}) - 2\pi e^{-ikr} B(-\mathbf{n}).$$

¹⁹ Ez tehát nem a szórás nélküli továbbhaladás esete, hanem, ami nem ugyanaz, a szórásnak a szórási szöggel nullához való tartásával kapott eset.

Az ilyen R_{kl} -ek tulajdonképpen egyforma nagyságú amplitúdóval kifutó és befutó gömbhullámok összegei; azért kell így választani az A_l -eket, hogy az R_{kl} -ekből kikeverhessünk egy (5.1) alakú állapotot, ahol is a befutó gömbhullámok lineárkombinációja a megkövetelt beeső síkhullámot adja aszimptotikusan. A részletes levezetéseket ld. pl. a Landau III-ban, az A. függelékben tömören összefoglalom ezeket.

A szórásamplitúdót is megkaphatjuk:

$$f(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \vartheta), \quad f_l = \frac{S_l - 1}{2ik} \quad \text{ahol} \quad S_l = e^{2i\delta_l} \quad \Rightarrow \quad (5.7)$$

$$\Rightarrow \quad \sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \text{ahol} \quad \sigma_l = 4\pi (2l+1) |f_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (5.8)$$

Itt ki kellett használni a P_l -ek ortogonalitási tulajdonságait. Az f_l mennyiségeket *parciális szórásamplitúdóknak* is szokták nevezni. Az itt felidézettek jelentik a parciális hullámok szerinti kifejtés lényegét.

• Parciális hullámok a gyakorlatban:

A parciális hullámok módszere tehát a szórási hatáskeresztmetszetnek (ill. a szórásamplitúdónak) l szerinti sor alakjában való felírása. Elvben minden l -re meghatározható δ_l a Schrödinger-egyenlet megoldásából, ezekből pedig az f_l mennyiségek²⁰.

Kis energiájú részecskék szóródásakor kiderül, hogy csak az első néhány (határesetben csak az $l=0$) index fog számottevő járulékot adni. Hogy melyek, azt szemiklasszikusan egyszerűen megbecsülhetjük: ha a potenciál valamilyen értelmű „hatótávolsága” b , akkor ez játssza az ütközési paraméter szerepét, így a beeső részecske maximális impulzusmomentumára a $p \cdot b$ becslést tehetjük, ahol p az impulzus. l indexű állapotban az impulzusmomentum kb. $\hbar l$, ebből tehát megbecsülhetjük, hogy mekkora a legnagyobb, még szerepet játszó l ²¹. Neutronszórásra például azt állíthatjuk, hogy kis energiájú neutronokra a szórás izotrop, mivel a nulladik Legendre-polinom, $P_0(\cos \vartheta) = 1$. Ahogy növeljük a neutron energiáját, úgy a hatáskeresztmetszet ϑ -függésében megjelenik először az $l=1$ -nek megfelelő $P_1(\cos \vartheta) = \cos \vartheta$ -s (cos ϑ -ban lineáris) tag, utána a $P_2(\cos \vartheta)$ -s tag, így tovább, nagy energiákon a szórás már nem izotrop.

• Számpéldák:

- $E=200$ keV-es neutronokkal bombázunk protonokat. Milyen a szórás szögeloszlása?
Válasz: A proton mérete $a=1,2$ fm, $1,2$ fm \cdot 5 MeV energiájú neutron impulzusa $p\sqrt{2m_n E} = 1,05 \cdot 10^{-20}$ Ns, azaz $pa = 0,12 \cdot \hbar$. Ez alapján azt mondhatjuk, hogy csak az $l=0$ -ás szórás játszik szerepet, tehát a szórás izotrop lesz.
- Milyen parciális hullámok játszanak szerepet a $^{128}\text{Te} + n$, $E_n = 50$ MeV reakcióban?
Válasz: az „ütközési paraméter” a mag sugara: $b = \sqrt[3]{128} \cdot 1,2$ fm = 6 fm, a neutron impulzusa $p = 1,63 \cdot 10^{-19}$ Ns, tehát $\frac{bp}{\hbar} = 9,3$, vagyis az $l=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ mind szerepet játszik.

5.4. Born-közelítés

• Általános megfontolások:

Ha a potenciális energia perturbációnak tekinthető, a Schrödinger-egyenletet három dimenzióban meg lehet oldani egyfajta szukcesszív approximációval²² (ld. pl. Landau III, 45.§ és 126.§-ok). A megoldást nullad-, első- stb. rendű járulékok összegeként keressük (a másodrendűvel már nem foglalkozunk). Feltételezzük,

²⁰ Azok az esetek, ahol V nem elég gyorsan tűnik el $r \rightarrow \infty$ -re (ilyen pl. a Coulomb-eset is), külön megfontolásokat igényelnek.

²¹ Ez az egész persze elnagyolt kép, a valóságban folytonosan változnak a különböző l indexű szórási folyamatok járulékai.

²² A levezetésből látszani fog, hogy a módszer miért nem működik alacsonyabb dimenziószámú problémákra: a megfelelő Green-függvények divergens integrálokra vezetnének.

hogy $\psi_1 \ll \psi_0$ és hogy V és ψ_1 ugyanolyan (kicsiny) nagyságrendű, ezzel a megmaradó egyenletek:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi, \quad \psi = \psi_0 + \psi_1 \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_0 = E\psi_0, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_1 + V(\mathbf{r})\psi_0 = E\psi_1. \quad (5.9)$$

A ψ_0 -ra tehát szabad mozgást leíró egyenlet adódik, megoldása egy adott \mathbf{k} hullámszámú síkhullám:

$$\psi_0 = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad (\Delta + k^2)\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2}\psi_0 = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (5.10)$$

Ez ψ_1 -re egy inhomogén differenciálegyenlet. Ennek megoldása a megfelelő Green-függvénnyel adható meg. A szórásproblémában majd a kifutó hullámokat tartalmazó megoldás fog érdekelni, a megfelelő $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ Green-függvény, amelyre $\Delta_{\mathbf{r}}G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ a következő (ld. a B. függelékét is):

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad \Rightarrow \quad \psi_1(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (5.11)$$

Nyilván akkor jó ez a közelítés, ha az így kapott ψ_1 -re tényleg $\psi_1 \ll 1$. Az (5.11)-ben az integrál nagyságrendjét megbecsülhetjük: legyen V_0 a potenciálgödör tipikus mélysége, a pedig a mérete, ekkor ha $ka < 1$ vagy $ka \simeq 1$, akkor az exponenciálist eggyel helyettesítve az integrál nagyságrendje:

$$\psi_1 \simeq \frac{ma^2}{2\pi\hbar^2} V_0, \quad \text{ha } ka \simeq 1. \quad (5.12)$$

Ha $ka \gg 1$, akkor érdemes (5.10)-re visszatérni, és $\psi_1(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$ alakban keresni a megoldást. Behelyettesíthetünk, és mivel $ka \gg 1$, csak a \mathbf{k} -t legmagasabb hatvánnyal tartalmazó tagokat kell megtartani:

$$2i(\mathbf{k}\nabla)f + \Delta f = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad 2i(\mathbf{k}\nabla)f = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad \psi_1 \simeq \frac{maV_0}{\hbar^2 k}, \quad \text{ha } ka \gg 1. \quad (5.13)$$

A nagyságrendi becslés abból adódott, hogy ψ_1 egy \mathbf{k} irányú egydimenziós integrálással kapható meg. Összerakva (5.12)-t és (5.13)-at, azt kapjuk, hogy az itt látott perturbációs számítás akkor működik, ha az alábbi két feltétel közül *legalább az egyik* teljesül (a második elég gyors részecskékre mindig teljesül):

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad \text{vagy} \quad V_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka. \quad (5.14)$$

Azok a potenciálok, ahol nincsen jellemző „hatótávolság” (pl. a Coulomb-tér), itt is külön megfontolásokat igényelnek, ezzel most nem foglalkozunk.

• A szórásamplitúdó Born-közelítésben:

Ha tehát a potenciális energia perturbációnak tekinthető, a szórásprobléma is megoldható az előbb látott perturbációs módszerrel: ennek neve Born-közelítés. Minket most ψ_1 alakja nagy $|\mathbf{r}| \equiv r$ -eknél érdekel, ahonnan majd leolvashatjuk a szórásamplitúdót, ezért a ψ_1 -re vonatkozó előző képletben a nevezőben r -et írhatunk, a számlálóban pedig $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{n}'\mathbf{r}'$ -t, ahol bevezetjük az $\mathbf{n}' = \mathbf{r}/r$ jelölést:

$$\psi_1(\mathbf{r}) \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\mathbf{r}' e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}'), \quad \mathbf{k}' \equiv \mathbf{k} - \mathbf{n}'. \quad (5.15)$$

Ebből leolvashatjuk a szórásamplitúdót, ami tehát Born-közelítésben a potenciál Fourier-transzformáltja (argumentuma pedig az átadott impulzus, amit szokásosan \mathbf{q} -val jelölünk):

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}', \quad f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'}, \quad d\sigma = |f|^2 d\Omega. \quad (5.16)$$

A közelítés megengedhetősége az (5.14) feltétel teljesülése alapján dönthető el.

• Példa: Szórás gömb alakú potenciálvölgyön Born-közelítéssel

A háromdimenziós potenciálvölgyben legyen legyen $V = -V_0$, ha $r < a$, és $V = 0$, ha $r > a$. Born-közelítésben a hatáskeresztmetszet Fourier-transzformációval adódik; ezt gömbi polárkoordinátákban célszerű csinálni, melyeket úgy veszünk fel, hogy a z tengely a \mathbf{q} vektor irányába mutasson:

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} V(r) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} &= - \int_0^a dr \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin\vartheta e^{iqr \cos\vartheta} V_0 = -2\pi V_0 \int_0^a dr r^2 \int_{-1}^1 dy e^{iqr y} = \frac{4\pi V_0}{q} \int_0^a dr r \sin(qr) = \\ &= \frac{4\pi V_0}{q^3} [\sin(qa) - qa \cos(qa)] \Rightarrow f = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} [\sin(qa) - qa \cos(qa)]. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Ebből a hatáskeresztmetszet úgy kapható, mint fent.

• Fermi-féle pseudopotenciál:

Neutronok szórásánál néha hasznos, ha a potenciált Dirac-deltának képzeljük:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f \delta(\mathbf{r}) \Rightarrow d\sigma = |f|^2 d\Omega. \quad (5.18)$$

Ha erre az esetre kiszámoljuk a Born-közelítést, a szórásamplitúdó nyilván tényleg az így bevezetett f mennyiséggel lesz egyenlő, iránytól függetlenül²³, noha a Dirac-deltára a valóságban nem alkalmazható a Born-közelítés. Láttuk viszont a parciális hullámoknál, hogy alacsony energiájú szórásnál a neutronszórás izotrop: ezt tehát „le lehet írni” ezzel a „pseudopotenciállal”, hozzávéve utasításként, hogy Born-közelítéssel kell számolni. Ez kristályrácsok neutronszórásának vizsgálatakor hasznos: ilyenkor nem annyira a magfizikai szórásfolyamat, mint inkább a kristályrács rezgési állapotváltozása érdekel minket. Ekkor tehát az egyedi szórás leírására lehet ezt a sémát alkalmazni, noha sem a Born-közelítés, sem a potenciál nem reális.

• Példa: Szórás Yukawa-potenciálban Born-közelítéssel:

A Yukawa-potenciál Fourier-transzformáltját a potenciálvölgyéhez hasonlóan számolhatjuk ki:

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} V(r) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} &= -2\pi g^2 \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\vartheta r e^{-\frac{r}{b}} e^{iqr \cos\vartheta} = -\frac{2\pi g^2}{iq} \int_0^\infty dr \left\{ e^{-r(\frac{1}{b}+iq)} - e^{-r(\frac{1}{b}-iq)} \right\} = \\ &= \frac{4\pi g^2}{\frac{1}{b^2} + q^2} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2 g^4}{\hbar^4} \frac{1}{\left(\frac{1}{b^2} + 2k^2(1 - \cos\vartheta)\right)^2}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

ahol felírtuk q -t k -val és a szórási ϑ szöggel, mint $q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}$. Ezt pl. proton-proton szórással lehet vizsgálni. A képlet szerint különböző a $\vartheta = 0$ és a $\vartheta = \pi$ (az előre- és a hátraszórási) hatáskeresztmetszet. A valóságban proton-proton szórásban szimmetriát találtak; ennek oka az, hogy kicserélődhetnek a protonok.

5.5. Kvázidiszkrét energiaszintek*

5.6. Szórás kvázidiszkrét energiaszinten*

5.7. Rugalmatlan szórás*

6. Elektromágneses átmenetek (γ -sugárzás)

Egy atommag különböző energiaszintjei közötti átmeneteket általában gammasugárzás kíséri, ennek energiája a szintek energiáinak különbsége, korrigálva a visszalökődésre²⁴. Feltesszük, hogy a kezdő- és a végállapot magnívó J teljes impulzusmomentum- és π paritás-quantumszámai ismertek, ekkor az ezekre vonatkozó megmaradási tételek korlátozzák a lehetséges elektromágneses átmenetek típusait; ezekkel foglalkozunk a következőkben.

²³Ellenőrizzük, hogy ugyanez adódik a potenciálvölgyre kapott (5.17) képletből is az $a \rightarrow 0$, $V_0 a^3 = \text{const}$ határesetben!

²⁴Ha ΔE a szintek energiakülönbsége, és M a mag tömege, akkor a $\Delta E \ll Mc^2$ (gyakorlatilag mindig teljesülő) esetben az R visszalökődési energia $R = \frac{(\Delta E)^2}{2Mc^2}$, azaz kicsi. Mégis van jelentősége, pl. a Mössbauer-effektusnál.

6.1. Fotonok gömbhullámai*

A vákuumban \mathbf{E} -re és \mathbf{B} -re érvényes Maxwell-egyenletek átírhatók egyedül az \mathbf{A} vektorpotenciálra²⁵:

$$\nabla \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}, \quad c^2 \nabla \times \mathbf{B} = \partial_t \mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}, \quad (6.1)$$

és az \mathbf{A} -ra adódó független egyenletek a divergencia-egyenlet és a hullámeqyenlet, mely harmonikus, $e^{-i\omega t}$, $\omega \equiv ck$ időfüggés esetén vektoriális Helmholtz-egyenletté válik:

$$\nabla \mathbf{A} = 0, \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \Delta \mathbf{A} = 0. \quad \mathbf{A}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-ickt} \quad \Rightarrow \quad \nabla \mathbf{A} = 0, \quad (\Delta + k^2) \mathbf{A} = 0. \quad (6.2)$$

Keressük ezeknek gömbi szimmetriájú megoldásait: könnyű belátni, hogy \mathbf{rA} -ra (itt \mathbf{r} az origóból mutató helyvektor) valódi Helmholtz-egyenlet vonatkozik (hiszen $\Delta(\mathbf{rA}) = 2\nabla \mathbf{A} + \mathbf{r}\Delta \mathbf{A}$, és most $\nabla \mathbf{A} = 0$):

$$(\Delta + k^2) \mathbf{A} = 0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta + k^2) (\mathbf{rA}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{rA} = C \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(kr) Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

6.2. Példák

• Milyen átmenetek kötik össze az alábbi gerjesztett és alapállapotokat?

A táblázatban megadunk gerjesztett- és alapállapotokat (ezek spinjét és paritását), ezekből kell kitalálni, hogy milyen átmenetek lehetségesek közöttük, valamint melyik a legintenzívebb. Első szabály: paritásváltásnál $E1, M2, E3, M4, \dots$ átmenetek, paritás nem változásánál $M1, E2, M3, E4, \dots$ átmenetek lehetnek. Második szabály: a kezdő- és végállapot spinjeire, valamint a fotonhullám λ spinjére a háromszögszabály érvényes, azaz a kezdőállapot J_1 impulzusmomentuma kiadódhasson az elektromágneses hulláméból (λ) és a végállapotéból (J_2): $|J_1 - J_2| \leq \lambda \leq J_1 + J_2$. $\lambda = 0$ -s átmenet nincs. Harmadik szabály: általában a legalacsonyabb megengedett átmenet valósul meg, a mágneses pedig el van nyomva az elektromoshoz képest ($E2$ és $M1$ általában kb. azonos nagyságrendű).

Kezdő- és végállapot		Paritásváltás $= \pi_1 \pi_2$	λ határok		Lehetséges átmenetek (az eddigiekből)
$J_1^{\pi_1}$	$J_1^{\pi_2}$		$ J_1 - J_2 $	$J_1 + J_2$	
1^+	$\rightarrow 1^-$	$-$	0	2	E1, M2
0^+	$\rightarrow 2^+$	$+$	2	2	M2,
1^-	$\rightarrow 0^-$	$+$	1	1	M1,
2^+	$\rightarrow 3^-$	$-$	1	5	E1, M2, E3, M4, E5
3^+	$\rightarrow 1^-$	$-$	2	4	M2, E3, M4,
1^+	$\rightarrow 0^-$	$-$	1	1	E1
$7/2^+$	$\rightarrow 3/2^+$	$+$	2	5	E2, M3, E4, M5

4. táblázat. Néhány elektromágneses multipólus-átmenet beazonosítása.

7. Gerjesztett állapotok

Az atommagoknak rengetegféle gerjesztett állapota lehetséges, ezeket kísérletileg a megfelelő γ -átmenetek mérésével lehet vizsgálni. Létrehozni őket kísérletben pedig rugalmatlan mag-mag ütközésekkel lehet, továbbá radioaktív átalakulások közvetlen leánymagjai gyakran gerjesztett állapotok.

²⁵ Könnyű ellenőrizni, hogy forrásmentes ($\rho \equiv 0, \mathbf{j} \equiv 0$) esetben alkalmas mértéktranszformációval ez valóban megtehető, azaz a Φ skalárpotenciálra kiköthetjük a $\Phi \equiv 0$ feltételt.

7.1. Vibrációs energiaszintek*

Van a gerjesztéseknek néhány könnyebben azonosítható típusa, ilyenekkel foglalkozunk most; először a maganyag „sajátrezgéseiként” azonosítható vibrációs energiszintekkel²⁶. Ezekről azt várjuk, hogy valamilyen ω_0 frekvenciának megfelelő $\hbar\omega_0, 2\hbar\omega_0, 3\hbar\omega_0, \dots$ távolsággal az alapállapot energiája fölött fekszenek.

Mi lehet az ilyen gerjesztett állapotok spinje és paritása? Foglalkozunk először páros-páros magokkal, ezek alapállapotában $j^\pi = 0^+$. Az adott (gömb)alakúnak tekintett maganyag normálrezgéseit elképzelve lehetnek monopól, dipól, kvadrupól, oktupól, stb. rezgési módusok: ezekben a rezgő felszín alakja rendre a P_0, P_1, P_2, P_3 , stb. gömbfüggvényekkel írható le.

7.2. Forgási gerjesztések*

Forgási energiaszintjei csak egy jól körülhatárolható csoportba tartozó atommagoknak vannak, ezek a $150 < A < 190$ és az $A > 220$ tömegszámú magok. A többi mag önkonzisztens tere gömbszimmetrikusnak tekinthető, ilyenben pedig ugyan vannak különböző l kvantumszámú nukleonállapotok, de ezek nem az egész mag forgási gerjesztései.

7.3. Kvadrupólmomentumok*

²⁶Ez egy típusa az ún. kollektív gerjesztéseknek, amelyeket nem mint egyedi nukleonok energiaszintjeit, hanem inkább mint az egész mag együttes mozgását lehet megérteni.

A. függelék: Gömbhullámok

• Skaláris gömbhullámok:

Először oldjuk meg az (5.5) sugárirányú Schrödinger-egyenletet a $V = 0$ szabad mozgás esetében!

$$\frac{d^2 R_{kl}^{(0)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{kl}^{(0)}}{dr} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] R_{kl}^{(0)}, \quad x \equiv kr, \quad R_{kl}^{(0)}(x) \equiv \frac{\rho_l(x)}{\sqrt{x}} \quad \Rightarrow \quad (\text{A.1})$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2 \rho_l}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d\rho_l}{dx} + \left[\frac{(l + \frac{1}{2})^2}{x^2} - 1 \right] \rho_l \quad \Rightarrow \quad \rho_l(x) \propto J_{l+\frac{1}{2}}(x), \quad \Rightarrow \quad R_{kl}^{(0)}(x) = \mathcal{N}_{kl} \cdot j_l(x). \quad (\text{A.2})$$

Egyenletünket tehát Bessel-egyenletté alakíthattuk²⁷, és a feles indexű, ún. *gömbi Bessel-függvények* kerültek elő²⁸. (Érthető az elnevezés: éppen gömbi szimmetriájú rendszert vizsgálunk, tulajdonképpen a Helmholtz-egyenletet.) A normálási feltétel:

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_{klm}(\mathbf{r}) \psi_{k'l'm'}(\mathbf{r}) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta\left(\frac{k-k'}{2\pi}\right) \quad \Rightarrow \quad \int_0^\infty dr r^2 R_{kl}^{(0)}(r) R_{k'l}^{(0)}(r) = 2\pi \delta(k-k'), \quad (\text{A.3})$$

ahol ugye $\psi_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}^{(0)}(r) Y_{lm}(\mathbf{n})$ a teljes térfüggő hullámfüggvény. A divergáló normaintegrál kiszámításához elég $R_{kl}^{(0)}$ -nek az $r \rightarrow \infty$ aszimptotikus alakját tudnunk²⁹, így adódik az \mathcal{N}_{kl} normálási tényező:

$$j_l(x) \simeq \frac{(-1)^l}{x} \sin\left(x + \frac{l\pi}{2}\right) = \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right), \quad \text{ha } x \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \mathcal{N}_{kl} = 2k. \quad (\text{A.4})$$

• Síkhullámok sorbafejtése gömbhullámok szerint:

Egy részecske határozott $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ energiájú és $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ impulzusú állapotát leíró $\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{ikz}$ ($z = r \cos \vartheta$) síkhullámot ki lehet fejteni az előbb tárgyalt (ugyanilyen E energiájú, de az l, m számokkal jellemzett határozott impulzuszórájú) $\psi_{klm}(\mathbf{r})$ állapotok szerint. Csak az $m = 0$ állapotok kerülnek elő, hiszen a helyzet hengersizmetrikus a z tengelyre. Állítás:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \psi_{kl0}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos \vartheta) j_l(kr), \quad \text{ahol } a_l = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} C_l, \quad C_l = \frac{2l+1}{2} i^l. \quad (\text{A.5})$$

²⁷ Felidézük a Bessel-egyenlet megoldásainak: a $J_{\pm\nu}$ Bessel-, az N_ν Neumann- és a H_ν^\pm Hankel-függvényeknek a definícióit:

$$J_{\pm\nu}(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{\pm\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(k \pm \nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k}, \quad N_\nu(x) = \frac{J_\nu(x) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(x)}{\sin \nu\pi}, \quad H_\nu^\pm(x) = J_\nu(x) \pm iN_\nu(x),$$

ezek mind kielégítik a Bessel-egyenletet; egy lineárisan független megoldaspárnak pl. J_ν és N_ν választható:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{df}{dx} + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) f = 0 \quad \Rightarrow \quad f(x) = J_{\pm\nu}(x), N_\nu(x), H_\nu^\pm(x), \quad \text{pl. } f(x) = AJ_\nu(x) + BN_\nu(x).$$

Egész $\nu = m$ -re a Neumann-függvény a $\nu \rightarrow m$ határesetként értendő. A $J_{-\nu}, N_\nu, H_\nu^\pm$ függvények $x = 0$ -ban nem regulárisak, J_ν viszont az (ezért (A.2)-ben csak ezt tartottuk meg).

²⁸ A Bessel-függvények közül az $l + \frac{1}{2}$ feles indexűek (itt l egész) kifejezhetőek elemi függvényekkel: a J_ν előző sorfejtett definícióját alkalmazva (és emlékezve, hogy $\Gamma(n + \frac{1}{2}) = \sqrt{\pi} (2n)! / (2^{2n} n!)$, valamint $x = \sqrt{l}$ -t helyettesítve) belátható, hogy

$$j_l(x) \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \quad n_l(x) \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{x}} N_{l+\frac{1}{2}}(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos x}{x}.$$

Ezeket a $j_l(x), n_l(x)$ függvényeket nevezzük gömbi Bessel- és Neumann-függvényeknek. Bevezethetők a $h_l^\pm(x)$ gömbi Hankel-függvények is a $h_l^\pm(x) = j_l(x) \pm i n_l(x)$ definícióval.

²⁹ Ez az előző lábjegyzet képletéből adódik. Az $\frac{1}{x} \frac{d}{dx}$ operáció l -szeri alkalmazása után adódó tagok közül az csökken a leglassabban, amelyikben egyik deriválás sem az $\frac{1}{x}$ -ekre, mindegyik a \sin -ra hatott (és így $+\pi/2$ -vel eltolta az argumentumot).

Indoklás: ugye $Y_{l0}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\vartheta)$, innen a_l és C_l összefüggése. A C_l úgy adódik, hogy a bal oldalon $z^l = (r \cos\vartheta)^l$ együtthatója $(ik)^l/l!$ a jobb oldalon pedig (a P_l -eket használva) $\cos^l\vartheta$ csak a legalább l indexű P_l -ekben fordul elő, r^l viszont csak a *legfeljebb* l indexű j_l -ekben, hiszen (a definíció és a 27. lábjegyzet első képlete alapján) kis r -ekre $j_l(kr) \approx \sqrt{\pi} (kr/2)^l \cdot 1/\Gamma(l + \frac{3}{2})$. Vagyis $z^l = r^l \cos^l\vartheta$ a jobb oldalon csak a $j_l(kr) P_l(\cos\vartheta)$ tagból jön, és itt ennek együtthatója³⁰ $C_l \cdot \frac{1}{2^l l!} \frac{(2l)!}{l!} \cdot \sqrt{\pi} (k/2)^l \cdot 1/\Gamma(l + \frac{3}{2}) = C_l \cdot \frac{1}{2^l l!} \frac{(2l)!}{l!} \cdot \sqrt{\pi} (k/2)^l \cdot 1/\sqrt{\pi} \cdot 2^{2l+2} (l+1)!/(2l+2)! = k^l/l! \cdot 2C_l/(2l+1)$. Ezt kell egyenlővé tenni az előbb látott $(ik)^l/l!$ -sal.

A most kapott sorfejtés $r \rightarrow \infty$ -re érvényes alakja a j_l -ek aszimptotikus alakját (A.4)-ből véve adódik:

$$e^{ikz} \simeq \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2kr} P_l(\cos\vartheta) i^l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right) P_l(\cos\vartheta). \quad (\text{A.6})$$

• Fázistolás és szórásamplitúdó:

A nemnulla $V(r)$ potenciál esetében az (5.5) sugárirányú Schrödinger-egyenlet megoldása (ha $r \rightarrow \infty$ esetén az egyenlet a $V=0$ -s egyenlettel helyettesíthető³¹) aszimptotikusan hasonló, mint az (A.4) egyenletben látott, csak tartalmaz egy szabad δ_l fázist, amit elvileg az egyenlet pontos megoldásából kell meghatározni: ez így szerepel az (5.6) egyenletben. Ha ezeknek (valamilyen A_l -ekkel vett) lineárkombinációjából levonjuk az e^{ikz} síkhullám iménti aszimptotikus (A.6) kifejezését, némi átalakítással azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \psi_k - e^{ikz} &\simeq \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\vartheta) \cdot \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) - \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right) P_l(\cos\vartheta) = \\ &= \frac{1}{ir} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\vartheta) \left\{ e^{ikr} \left(A_l (-i)^l e^{i\delta_l} - \frac{2l+1}{2k} \right) - e^{-ikr} \left(A_l i^l e^{-i\delta_l} - (-1)^l \frac{2l+1}{2k} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Ahhoz, hogy ez a kifejezés csak *kifutó* hullámot, azaz e^{ikr} -rel arányos tagokat tartalmazzon (vagyis: hogy az e^{-ikr} -et tagok kiessenek), A_l -et valóban $\frac{2l+1}{2k} i^l e^{i\delta_l}$ -nek kell választanunk, mint az (5.6) egyenletben felírtuk. Ebből aztán megkapjuk a szórásamplitúdó (5.7)-ben megadott kifejezését is.

B. függelék: A Helmholtz-egyenlet Green-függvénye*

• A megoldás és levezetése Fourier-transzformációval:

A Helmholtz-egyenlet minket érdeklő, kifutó gömbhullámot tartalmazó $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ Green-függvényét minden gond nélkül felírhatjuk „ösztönösen” is, a Laplace-egyenlet $1/r$ -es Green-függvényét kiegészítve:

$$(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \Leftrightarrow \quad G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (\text{B.1})$$

Ennek egy szokásos, formális levezetése a Fourier-transzformáció alkalmazásával történik. Először is kössük ki, hogy (a tér homogenitására apellálva) csak $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ -től függő megoldásokat keresünk, azaz \mathbf{r}' -t vehetjük $\mathbf{0}$ -nak. Így a Helmholtz-egyenletet és a Green-függvényt átírva Fourier-térbe, arra jutunk, hogy

$$\begin{aligned} (\Delta_{\mathbf{r}} + k^2) G(\mathbf{r}) &= \delta^{(3)}(\mathbf{r}), \quad G(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \tilde{G}(\mathbf{q}), \quad \delta^{(3)}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad (-q^2 + k^2) \tilde{G}(\mathbf{q}) &= 1 \quad \Rightarrow \quad \tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2} \quad \Rightarrow \quad G(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{k^2 - q^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

³⁰ Ugye $P_l(y) = 1/(2^l l!) \cdot \frac{d^l}{dy^l} (y^2 - 1)^l$, ebből $P_l(y)$ -ban az y^l -es tag (ami abból adódik, amikor az l darab deriválás az y^{2l} -re hat) együtthatója $(2l)!/l! \cdot 1/(2^l l!)$. Továbbá idézzük fel $\Gamma(n + 1/2)$ -nek a 28. lábjegyzetben megadott formáját!

³¹ Ehhez az kell, hogy $V(r)$ „elég gyorsan” eltűnjön $r \rightarrow \infty$ -re; belátható, hogy itt ez a $\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$ feltételt jelenti.

C. függelék: Egy egydimenziós példa kvázidiszkrét energiaszintekre*

Legyen egy egydimenziós $V(x)$ potenciálunk a következő:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } -\infty < x < -b, \\ V_0, & \text{ha } -b < x < -a, \\ 0, & \text{ha } -a < x < a, \\ V_0, & \text{ha } a < x < b, \\ 0, & \text{ha } b < x < \infty, \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

azaz a potenciál két darab, V_0 magasságú gát; a gödör szélessége közepén $2a$, a gátak vastagsága $b - a$. Keressük a Schrödinger-egyenlet megoldásait egy a szokásos esettől (végtelenben eltűnő hullámfüggvény, vagy pl. balról befutó hullám) eltérő határfeltétellel: a megoldás írjon le jobbra is, balra is kifutó hullámot! Ebben az esetben nyilvánvalóan nem kaphatunk szigorú értelemben stacionárius állapotot: a valószínűsősűrűség sehol sem lehet konstans, mindenhol csökkenni fog, mégpedig időben exponenciálisan (hiszen a kifele áramlás mértéke, a j valószínűségi áramsűrűség arányos lesz a $|\psi|^2$ -tel). Ebből következik, hogy az $i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi = E\psi$ egyenlet megoldása értelmében felfogott E „sajátérték” negatív képzetes részt fog tartalmazni: valóban, ekkor az időfüggés $e^{-iEt/\hbar}$ lesz, és ha $\text{Im}E < 0$, ennek abszolútértéke tényleg exponenciálisan csökken az időben.