

Csanád Máté

Atomok, atommagok és elemi részecskék fizikája

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

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \hat{L}_l$$

$$hf' = \frac{hf}{1 + \frac{hf}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} = \frac{hf}{1 + \xi (1 - \cos \theta)}$$

$$\langle \hat{A} \rangle_\Psi := \langle \Psi, \hat{A} \Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi$$

Atomok, atommagok és elemi részecskék fizikája

Atomok, atommagok és elemi részecskék fizikája

Csanád Máté

Budapest, 2022

A kötet az Eötvös Loránd Tudományegyetem tankönyv- és jegyzettámogatási pályázatán elnyert forrás felhasználásával jelent meg.

Szakmai lektor: Dr. Nagy Márton
A kézirat lezárva: 2022. január 23.

© Csanád Máté, 2022
ISBN 978 963 489 434 6 (pdf)



www.eotvoskiado.hu

Felelős kiadó: az Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Karának dékánja
Projektvezető: Csanádi-Egresi Nóra
Tördelés: Csanád Máté
Borítóterv: Balázs Andrea



Tartalomjegyzék

1. Az atomelmélet és az első atommodellek	12
1.1. Kémiai reakciók és az atomelmélet	12
1.2. Az elektron felfedezése, a Thomson-modell és az elemi töltés	14
1.3. A hatáskeresztmetszet fogalma	18
1.4. Részecskék szóródása centrális erőterben	22
1.5. Az atommag felfedezése, a Rutherford-modell	27
1.6. Az atomok mérete és tömege	28
2. Atomosság és kvantáltság makroszkópikus jelenségekben	32
2.1. A Brown-mozgás	32
2.2. Sörétzaj	35
2.3. Sűrűségingadozások gázokban	37
2.4. Fényszóródás	39
2.5. Energiaeloszlások gázokban	45
2.6. Feketetest-sugárzás	47
3. Az atomok energiaszintjei és az első kvantált atommodellek	50
3.1. Gázok abszorpciós és emissziós vonalai	50
3.2. Az atomok energiaszintjei	51
3.3. A Bohr-modell	53
3.4. Az atomok mágneses momentuma és perdülete	56
3.5. A Sommerfeld–Wilson-quantálás, a „régí kvantumelmélet”	58
3.6. A hidrogénatom Sommerfeld-modellje	62
4. Az elektromágneses sugárzás részecsketermészete	66
4.1. A fény hullámtermészete	66
4.2. A fotoelektromos jelenség	67
4.3. Az elektromágneses sugárzások kettős természete	70
4.4. A Compton-jelenség	71
4.5. Kísérletek a fény természetének megállapítására	77
4.6. Az elektromágneses tér spektruma	80
4.7. A foton impulzusa, Doppler-hűtés és Mössbauer-jelenség	86
5. Anyaghullámok	89
5.1. Elektronok elhajlása	89
5.2. Atom- és molekulanyalábok elhajlása	92
5.3. Terjedési amplitúdó és hullámfüggvény	96
5.4. Határozatlanság és hullámcsomagok	97
5.5. A kvantummechanika értelmezései, determinizmus	100

6. A kvantummechanika alapjai	104
6.1. A kvantummechanika matematikai képe	104
6.2. Fizikai mennyiségek határozatlansága	107
6.3. Az impulzus és a hely operátora	108
6.4. A Schrödinger-egyenlet	111
6.5. A harmonikus oszcillátor	112
6.6. A valószínűségi áram	114
6.7. A Schrödinger-egyenlet alkalmazásai	115
6.8. A radioaktivitás	118
6.9. Az időfüggetlen perturbációszámítás	119
7. Perdület és sajátperdület a kvantummechanikában	121
7.1. A perdületoperátor	121
7.2. Perdület-sajátállapotok	123
7.3. A perdület és a forgatások kapcsolata	124
7.4. A sajátperdület	126
7.5. A teljes perdület és a giromágneses faktor	127
7.6. A spinoperátor	130
7.7. A Pauli-egyenlet és a spin oszcillációja	133
7.8. Az anomális mágneses momentum	135
8. A hidrogénatom részletes spektruma	137
8.1. A hidrogénatom a Schrödinger-egyenlet alapján	137
8.2. A hidrogénatom perturbációi, a Zeeman-hatás	140
8.3. A finomfelhasadás	142
8.4. A hiperfinom felhasadás	147
8.5. A Lamb-eltolódás	148
8.6. A többielektronos atomok szerkezete	151
9. Atommagmodellek	155
9.1. A neutron felfedezése, a mageró	155
9.2. Atommagbomlások és kötési energia	160
9.3. A cseppmodell és a félempirikus formula	163
9.4. Az atommagok héjmodellje	167
10. A magfizika alkalmazásai	170
10.1. A maghasadás felfedezése	170
10.2. Az uránizotópok hasadási tulajdonságai	171
10.3. Az atombomba	175
10.4. Az atomreaktor	178
10.5. A Nap és a csillagok működése, a magfúzió és a nukleoszintézis	182
10.6. A termonukleáris fúzió	187

11.A részecskefizika alapjai	191
11.1. A radioaktivitás felfedezése, sugárzások	191
11.2. Részecskegyorsítók és detektorok	193
11.3. Történelmi jelentőségű részecskefizikai felfedezések	199
11.4. Különféle hadronok felfedezése, a kvarkmodell	203
11.5. A részecskefizika standard modellje és az alapvető kölcsönhatások	206
12. Nagyenergiás mag- és részecskefizika	212
12.1. Részecskegyorsítókkal az űsrobbanás nyomában	212
12.2. Nagyenergiás gyorsítók és detektoraik	213
12.3. Mérföldkövek a kvark-gluon plazma kutatásában	217
12.4. Az erős kölcsönhatás fázisdiagramja	225

„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

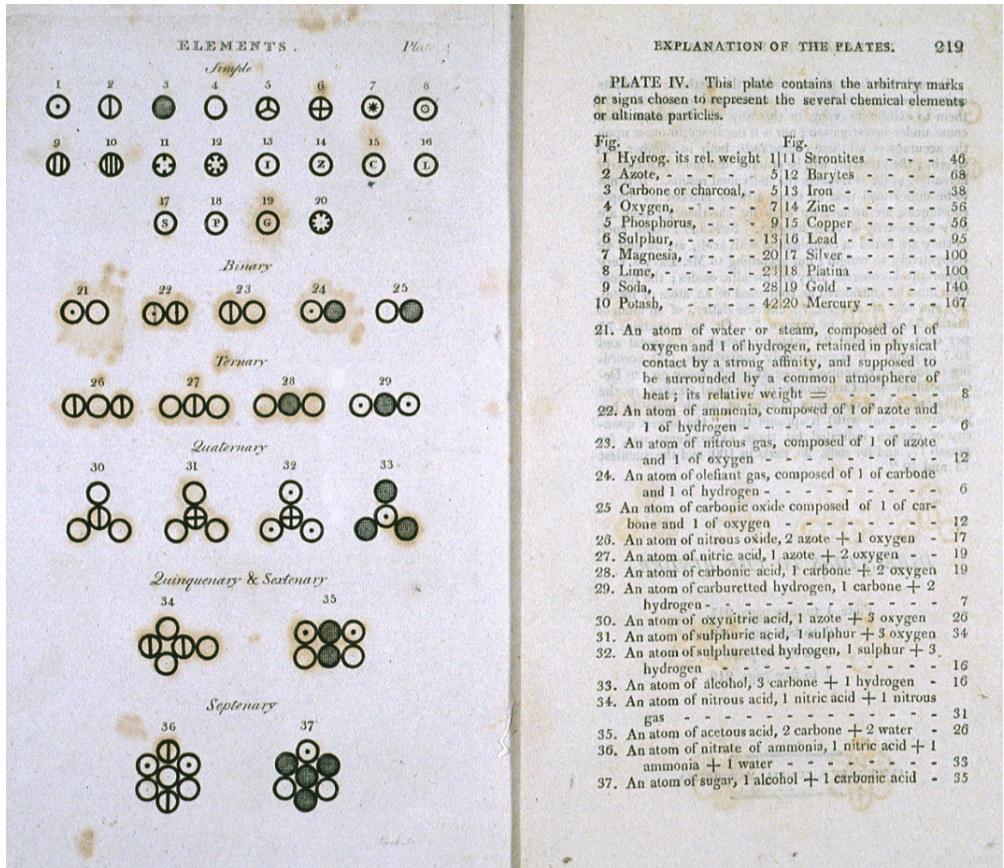
1. Az atomelmélet és az első atommodellek

1.1. Kémiai reakciók és az atomelmélet

Bár az atomelmélet filozófiai értelemben az ókori Görögországból származik, természet-tudományos értelemben a XIX. század elejére datálhatjuk megjelenését. Az első kísérleti előjelek a kémiai reakciókban mutatkoztak meg; alább ilyeneket sorolunk fel.

- Lavoisier, 1789: **tömegmegmaradás kémiai reakciókban**. Lavoisier arra jött rá, hogy kémiai reakciókban a reagensek és a termékek tömege azonos. (Ez gázne-mű reakciótermékek esetén minden bizonnyal nem volt teljesen egyértelmű a reakciótermékek megszökése, illetve a levegő nem elhanyagolható felhajtóereje okozta súlycsökkenés miatt. Ma már a speciális relativitáselmélet alapján azt is tudjuk, hogy a reakcióhő felszabadulása tömegveszteséggel jár, de ez a hatás kémiai reakciók esetén elhanyagolható.)
- Proust, 1794: **állandó arányok törvénye**. Proust cikkében azt állapította meg, hogy a vas-oxidban a vas és az oxigén aránya mindig ugyanannyi, és ez igaz ónnal, higannyal, ólommal és mindenféle egyéb anyaggal lefolyó hasonló kémiai reakcióra. Az eredményt kétségbe vonták, többek között azért, mert akkoriban nem mindenki számára volt világos az eltérés az oldatok kialakulása és a molekulák átalakulásával vagy létrejöttével járó kémiai reakciók között. Megemlíjtjük továbbá, hogy valójában a vas-oxid lehet FeO , Fe_2O_3 vagy Fe_3O_4 is, ahogy később Proust kísérleteiben meg is állapította (pontosabban: azt találta, hogy az oxigén tömegaránya vas-oxidban 27% vagy 48% lehet; míg réz-oxidban 18% vagy 15%).
- Dalton, 1804: **többszörös arányok törvénye**. Dalton ón-oxiddal (SnO) és ón-dioxiddal (SnO_2) kísérletezett, és azt találta, hogy 100 g ón 13,5 g vagy 27 g oxigénnel vegyül (illetve ennyi szabadulhat ki a keletkező vegyületből); az oxigén-mennyiségek egymáshoz viszonyított aránya 1:2. (Ma már tudjuk, hogy az SnO és SnO_2 vegyületek keletkezéséről van szó.) Hasonlóan nitrogén és oxigén vegyítésekor 1 gramm nitrogénre a végterméktől függően – amely lehet N_2O , N_2O_3 , NO , NO_2 stb. – más-más mennyiségű oxigén jut, de ezek arányai kis egész számokkal adódnak, 1:2, 2:3, 1:4 stb. (Ma már világos, hogy egyszerű molekuláknál jól működik ez; bonyolultaknál már kevésbé: pl. a $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ és a $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ szénhidrogéneknél adott tömegmennyiségű szén esetén 121:120 a kétféle vegyülethez szükséges H egymáshoz viszonyított tömegaránya.)
- Dalton ez alapján megalkotta az **atomelméletet** (1. ábra), amely szerint minden kémiai elem egyedülálló és egyedi atomokból áll, amelyeket nem lehet kémiailag 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 (ma pedig tudjuk, hogy az O_2 és a H_2 molekula tömegaránya a legjellemzőbb O- és H-izotópokat tekintve lényegében 16).
- Avogadro, 1811: **Avogadro törvénye**. Azonos térfogatú gázok azonos hőmérsékleten és nyomáson azonos mennyiségű molekulát tartalmaznak (azaz a térfogat nem függ a molekulatömegetől). Például ha két liter hidrogéngáz egy liter oxigéngázzal reagál, két liter vízgőz keletkezik (azonos hőmérsékletű és nyomású kiindulási illetve reakciótermék-gázok esetén; a gyakorlatban ezen feltételt nehézkes

lehet megvalósítani). Avogadro ez alapján ki tudta következtetni a kétatomos, egy elemből álló molekulák természetét. Ez alapján pontosabban meg tudta határozni az atomok tömegét, illetve megkülönböztette az elemeket és a molekulákat.



1. ábra. A Dalton-féle atomelmélet. Az első sor elemei sorban (1–8 számokkal jelölve): H, N, C, O, P, S, Mg, Ca. Az ezekből felépített első néhány molekula sorban (21–29-es számokkal): HO, HN, NO, HC, CO, N₂O, NO₂, CO₂, CH₂ stb. Az elmélet néhány molekulát helyesen, másokat hibásan épít fel. Például a CO₂ molekula helyesen szerepel (28-as számmal), míg a vízmolekula helytelenül (HO, 21-es).

Az atomelmélet a 19. század folyamán nem nyert elismerést, pusztán hipotézisnek vették, amelynek nincs köze a valósághoz. (Ez ma is aktuális kérdésfeltevés lehet: mennyire valóságosak a mai elemi részecskék, extra dimenziók, kölcsönhatási terek, illetve mennyire csak elméleti konstrukciók, amelyek segítenek leírni a valóságot? Van egyáltalán különbség a két szemléletmód között?)

A mai értelemben vett atomok létezése még a XIX. század második felében sem egyértelmű. Lord Kelvin 1867-es „Atomi vortexek” című tanulmányában amellől érvel, hogy az atomok valójában az éter (lásd a fénysebesség kutatását és a relativitáselmélet történetét) csomósodásai. Elméletével sokféle jelenséget le tudott írni – a csomók

rezgése és kölcsönhatásai jól magyarázták a megfigyeléseket. Az elmélet mögött érdekes matematika is húzódott (amelyben Peter Trait segített Lord Kelvinnek), de ennek részleteit csak később tárták fel: a csomók elmélete ma is aktívan kutatott matematikai tudományterület. Ez a történet kiváló példa arra, amikor a matematikai elegancia sajnálatos módon nem találkozik a kísérleti igazság később napvilágra kerülő részleteivel. (Érdekes kérdés, hogy a mai, bizonyos aspektusok tekintetében hasonló helyzet merre fejlődik majd a húrelmélet, a részecskefizika és a gravitáció tekintetében.) Nézzünk azonban néhány további kísérleti bizonyítékot, amelyet a mai értelemben vett atomelmélet kiválóan meg tudott magyarázni:

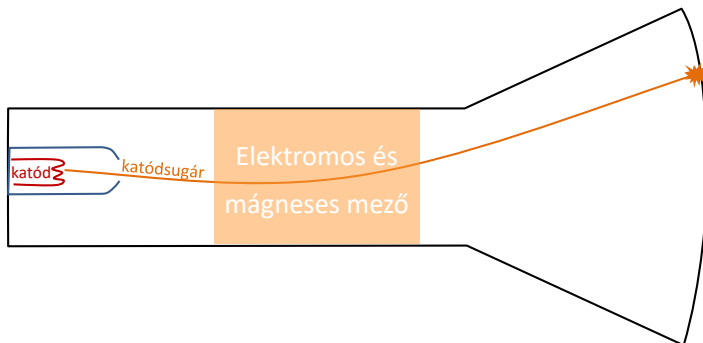
- Brown, 1827: **Brown-mozgás**. A pollenrészecskék a vízben látszólag ok nélkül véletlenszerűen mozognak. Ez lesz az atomelmélet első elfogadott bizonyítéka később. Részletesebben lásd a következő fejezetben.
- Faraday, 1834: **az elektrolízis törvénye**. Az elektródokon képződő anyag tömege (m) arányos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

$$Q = ZFn = Z \frac{F}{M} m, \quad (1.1)$$

ahol $F = 9,65 \cdot 10^4$ C/mol a Faraday-féle állandó (ami, mint később kiderült, egyszerűen az elemi töltés és az Avogadro-állandó szorzata, $1,6 \cdot 10^{-19}$ C \times $6 \cdot 10^{23}$ db/mol), Z pedig az adott elektrolizálható anyagra jellemző egész szám (mint később kiderült, az atomjában lévő kötési elektronok száma).

1.2. Az elektron felfedezése, a Thomson-modell és az elemi töltés

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 a 2. ábrát) kiderült, hogy a katódsugarakat, amelyek fényt keltenek a fluoreszcens rétegen, eltéríti az elektromos tér.



2. ábra. A katódsugárcső felépítése. Egy fűtött katódból elektronok lépnek ki, amelyeket a katód és az anód(ok) által létrehozott tér gyorsít. A sugárzást elektromos vagy mágneses mezővel is el lehet téríteni, ez volt Thomson felfedezésének legfontosabb pontja.

Thomson ez alapján leszűrte, hogy ezek a sugarak **nem a fény egy formáját** jelentik, hanem könnyű, **negatív töltésű részecskékből**, „korpuzkulákból” állnak. Thomson úgy vélte, hogy a részecskék a gáz molekuláiból válnak ki, azaz az atom felosztásáról van szó. A katódsugárban terjedő részecskéket később nevezték el elektronoknak.

A kísérletet mágneses térrel kiegészítve, a Lorentz- és a Coulomb-erő ismeretének felhasználásával Thomson megmérte az elektronok töltés/tömeg arányát is. Jelölje m egy elektron tömegét és e a töltésének nagyságát! Az elektromos tér okozta gyorsulás nagysága $a = F/m = eE/m$, a repülési idő pedig $t = l/v$, ahol l a bejárt úthossz, v pedig a repülő elektron sebessége. A mágneses tér okozta Lorentz-erő nagysága evB , iránya pedig a sebességre merőleges: az elektronok mágneses térben körpályára állnak, és a Lorentz-erő a centripetális erővel fog megegyezni: $mv^2/r = evB$. Így a következőket kapjuk a belépési repülési irányra merőleges elektromos, illetve mágneses tér esetén:

$$\text{elektromos térben az eltérülés: } y = \frac{1}{2}at^2 = \frac{eEl^2}{2mv^2}, \quad (1.2)$$

$$\text{mágneses térben a pályasugár: } r = \frac{mv}{eB}, \quad (1.3)$$

$$\text{a kettő mérésével: } \frac{e}{m} = \frac{El^2}{2B^2yr^2}. \quad (1.4)$$

Így a sebesség megmérése nélkül is megkapható a töltés/tömeg arány.

Thomson konkrét mérése kicsit másképpen haladt. Először megkereste adott E elektromos térhez az olyan B mágneses térerősségnagyságot, amelyeket együttesen alkalmazva éppen nincs eltérülés, azaz a két erő éppen kioltja egymást: ez akkor lehet így, ha E és B (amellett, hogy mindketten merőlegesek az elektronok sebességére) még egymásra is merőlegesek, továbbá az erők nagysága egyenlő, ami az $E = vB$ esetben valósul meg. Így le lehetett szűrni az elektronok sebességét: $v = E/B$. Ezután pedig mágneses tér nélkül, de ugyanakkora elektromos teret alkalmazva megmérte az y eltérülést, és ebből határozta meg a töltés/tömeg arányt:

$$\text{az elektromos eltérülés: } y = \frac{eEl^2}{2mv^2}, \quad (1.5)$$

$$\text{innen a sebesség ismeretében: } \frac{e}{m} = \frac{2yv^2}{El^2} = \frac{2Ey}{B^2l^2}. \quad (1.6)$$

Ehhez a fajta méréshez az y eltérülés mérése mellett nincs tehát szükség a (csak mágneses teret alkalmazva megvalósuló) r pályasugár mérésére, cserébe itt E és B nem függetlenek: úgy kell beállítani B -t, hogy épp kioltsa az E elektromos tér hatását. Érdekes végiggondolni, hogy ez és az előző módszer matematikailag szinte ugyanaz, ugyanakkor mérés technikailag mégis különbség van köztük.

A mérés eredménye szerint az elektron tömeg/töltés aránya három nagyságrenddel kisebb a H^+ ionénál. Miután az elektron töltésnagysága megegyezik a hidrogénionokéval (ahogy azt ma tudjuk), ez a mérés arra utalt, hogy az elektronok a hidrogénatomnál három nagyságrenddel (lényegében kb. ezerszer; pontosabban: 1846-szor) könnyebb részecskék. Az eredmények fontos pontjai közé tartozott az is, hogy a töltés/tömeg arány nem függ a kibocsátó katódtól, vagyis valóban a katódsugárban terjedő részecskére jellemző tulajdonságról van szó. Az is kiderült, hogy a β -sugárzás részecskéi (a radioaktív β -bomlásban keletkező részecskék) is ugyanilyen e/m arányúak, azaz ugyanilyen típusú részecskék (elektronok) terjednek ezen esetben is. Álljon alább egy idézet Thomsontól:

„A katódsugarak negatív elektromos töltést hordoznak: eltérülnek az elektrosztatikus erő hatására, mint ha negatív elektromosságuk lenne, hat rájuk a mágneses erő éppen úgy, mint ahogy hasonló pályán mozgó negatív töltésű testekre hatna. Nem látok tehát más lehetőséget, mint hogy arra következtessünk, hogy a katódsugarak negatív töltést hordozó anyagi részecskékből állnak.” (Cathode rays, Philosophical Magazine, **44**, 293 [1897].)

Gyakorló feladat

Egy ismeretlen részecske 50 cm hosszú pályán 100 kV/m elektromos tér hatására 0,5 fokkal térül el. Ezt az eltérést 5 mT mágneses térrel tudjuk kompenzálni (ha a mágneses tér merőleges az elektromos térre és a részecske sebességére is). Mi ezen részecske töltés/tömeg aránya, illetve milyen típusú részecske lehet?

1902-ben Kaufmann a β -sugárzást vizsgálva azt találta, hogy nagyon gyors elektronokra az előzőekben leírt módszerrel megfigyelhető e/m arány megváltozik, amit Hupka és Bucherer mérései megerősítettek – nem volt azonban egyértelmű a változás mértéke. Einstein speciális relativitáselméletének jóslata szerint a test így megfigyelhető tehetetlensége 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 einsteini formulának megfelelően változik meg, tehát a tömeg/töltés arány $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ faktorial nő.

Katódsugaras kísérleteinek értelmezése alapján Thomson 1904-ben megalkotta a „plum pudding” névvel illetett **első atommodell**t (amelyért Nobel-díjban részesült). Ebben az atom egy pozitív töltésű levesből áll, amelyben negatív töltésű elektronok „úsznak”. Ezt a Rutherford-féle szórás kísérlet cáfolta, lásd a következők alfejezetekben.

Az elektromos, illetve mágneses térben fellépő eltérések vizsgálata nem alkalmas arra, hogy külön az elektron e töltését és/vagy m tömegét megmérjük, csak e kettő e/m arányára lehet következtetést levonni. Nyitott kérdés marad(t) tehát, hogy konkrétan mennyi az elektron e töltés nagysága, ami már eddigi ismereteink alapján is (ha az ionokat – helyesen – elektronjaiktól megfosztott, eredetileg semleges atomoknak képzeljük) az elektromos töltés természetben létező egyfajta lehető legkisebb egységeként képzelhető el. Ennek konkrét értékét Robert A. Millikan vizsgálta a XX. század első éveiben, majd 1913-ban publikálta ezzel kapcsolatos mérései eredményét (miután doktórándusza, Harvey Fletcher javaslatai alapján korrigálta az elrendezést, gyorsan elpárolgó vízpára helyett olaj használatával). Következtetésként egyfajta **elemi töltés** létezését állapította meg, amelyet tehát az elektron töltés nagyságával lehetett azonosítani. Ilyen módon Millikan (az elektronokra Thomson mérései nyomán ismert e/m arányt tudva) lényegében megmérte az elektron tömegét is. (Ezért 1923-ban Nobel-díjban részesült.)

Kísérletének lényege az volt, hogy porlasztott olajcseppek levegőben való esését vizsgálta különféle függőleges elektromos terek alkalmazása esetén. Az olajcseppek egy része a porlasztás során (tulajdonképpen a dörzselektromos hatás alapján) töltésre tesz szert; a cseppek töltésének jele most legyen Q . Olyan apró cseppekről van itt szó, amelyek töl-

tése már nem tekinthető folytonos változónak, hanem feltételezhető (volt), hogy egyes cseppeknek csak néhány elektronnyi (azaz: az elemi töltés néhányszorosának megfelelő) töltése lesz. A levegőben eső (r sugarú gömbnek gondolt alakú) olajcseppekre a nehézségi erő (Mg ; itt M a csepp tömege) mellett a levegő súrlódási ereje, valamint a töltöttségük miatt a függőlegesen alkalmazott E elektromos térből származó elektromos erő hat; állandó v_0 sebesség esetén ezek kiegyenlítik egymást:

$$Mg - F_{\text{fel}} = \frac{4\pi r^3}{3}(\rho_{\text{olaj}} - \rho_{\text{lev.}})g = 6\pi\eta r v_0. \quad (1.7)$$

Figyelembe vettük a levegőben ható felhajtóerőt is; mint látjuk, ez lényegében úgy jelentkezik, hogy az olaj $\rho_{\text{olaj}} \approx 800 \text{ kg/m}^3$ körüli értékű (persze a mérés során a használt olajfajtára pontosan ismert) sűrűségéből le kell vonni a normálállapotú levegő $\rho_{\text{lev.}} \approx 1,27 \text{ kg/m}^3$ sűrűségét. A jobb oldalon pedig a kicsinek tekinthető v_0 sebességű, r sugarú gömb alakú cseppekre ható közegellenállási erő kifejezése szerepel: ez az ún. *Stokes-törvény*; ebben η a levegő dinamikai viszkozitása.

A felírt egyenlet az elektromos tér nélküli esetre vonatkozik; ebben az elrendezésben (mikroszkóppal) megfigyelve a cseppek esését (azaz a v_0 sebességet) megkaphatjuk a cseppek méretét: $r^2 = 9\eta v_0 / (2g\Delta\rho)$, ahol $\Delta\rho \equiv \rho_{\text{olaj}} - \rho_{\text{lev.}}$. Ha most még függőleges E elektromos teret kapcsolunk be, akkor az (állandó) esési sebesség más v érték lesz, hiszen ebben az esetben az erők egyenlősége így írható fel:

$$\frac{4\pi r^3}{3}(\rho_{\text{olaj}} - \rho_{\text{lev.}})g + QE = 6\pi\eta r v, \quad (1.8)$$

azaz e két mérés összehasonlításából kifejezhető a Q töltés. Azt kapjuk, hogy

$$Q = \frac{6\pi\eta r(v-v_0)}{E} = \frac{9\sqrt{2}\pi}{E} \frac{\eta^{3/2}}{\sqrt{g}} \frac{\sqrt{v_0}(v-v_0)}{\sqrt{\Delta\rho}}, \quad (1.9)$$

ahol még visszahelyettesítettük az r sugár kifejezését, amely a tér nélkül mért v_0 sebesség méréséből volt megkapható. Értelemszerűen $+E$ és $-E$ térerősséget is kipróbálhattunk: e kettő eset összehasonlításával is megkapható a töltésnagyság; a fenti formulában $v-v_0$ helyett (értelemszerű jelöléssel) $\frac{1}{2}(v_+ - v_-)$ jelenne meg – de ez nem változtat érdemben a kísérlet lényegén.

Millikan végeredményben azt találta, hogy a cseppek töltései egy $1,592(2) \cdot 10^{-19} \text{ C}$ konstans érték egész számú többszöröse lehetnek csak: ezt az értéket ő tehát az elektron töltésnagyságával azonosította. Ennek mai pontos értéke $e = 1,60217649(4) \cdot 10^{-19} \text{ C}$. Úgy tűnik tehát, hogy a természetben csak e egész számú többszöröse jelenhetnek meg töltésként: ez az e az elektronnak, illetve az atom további építőköveinek a töltése.

Millikan eredeti mérési eredményének a ma ismert pontos értéktől való eltérése abból adódott, hogy a levegő η viszkozitására nem egészen pontos értéket használt. (Ezt nem ő mérte meg, hanem ismertnek vette másfajta mérésekből; mindenesetre látjuk az iménti képletből, hogy η értékének pontatlansága konkrétan átöröklődik a mért e értékbe, hiszen a csepp töltésének, Q -nak végső kifejezésében $\eta^{3/2}$ szorzó szerepel.) Millikan mérésének (illetve a pontatlanságnak) kapcsán érdemes felidézni Feynman kommentárját (lásd „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 számnál 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.”

Később hasonló történet játszódott le – többek között – a neutron élettartamának mérésével is: minden fizikusnak kiemelten oda kell figyelnie arra, hogy a vélt előismereti ne torzítsák a megfigyeléseit és következtetéseinek alaposságát.

1.3. A hatáskeresztmetszet fogalma

Az atomi és még kisebb léptékű jelenségek megértéséhez alapvető fontosságú a szórási folyamatok vizsgálata, ez pedig a hatáskeresztmetszet fogalmát igényli. Hatáskeresztmetszetnek egy adott szórási vagy elnyelési folyamat valószínűségét meghatározó „effektív felületet” nevezünk, ahogy ezt az alábbiakban körüljárjuk.

A tipikus kísérletípusban van egy „szórócentrum”, ami egy egyelőre a térben rögzített, jól meghatározott típusú mikroszkopikus objektum: egy elektron vagy egy atom, molekula (vagy pl. valamilyen másfajta részecske vagy esetleg egy *atommag*; mint nem-sokára látjuk, az atommag felfedezése éppen egy szóráskísérlet nyomán történt). Van továbbá egy beeső nyaláb, amelyben valamilyen meghatározott fajta részecskék érkezik a szórócentrumra. Legyen adott ezek j_{be}^N bejövő áramsűrűsége (időegységre és felületegységre vetített áthaladó részecskeszáma). Ha elegendő ideig várunk, bizonyos gyakorisággal minden lehetséges folyamat végbemegy a beeső részecskék és a céltárgyrészecskék (szórócentrumok) között. Ki kell jelölni azt is, hogy milyen fajta eseményre „vadászunk”, azaz mit tekintünk a kísérletünk/megfigyelésünk szempontjából „érdekes” eseménytípusnak. Minden eseménytípushoz tartozik egy megfelelő módon elnevezett hatáskeresztmetszet. Néhány konkrét lehetőség (a jegyzetben később bevezetendő részecskékre és eseményfajtákra is gondolva):

- A későbbiekben fontos példa lesz α -részecskék aranyatommagokon való szóródása. Ebben az esetben tetszőleges olyan folyamat „érdekes”, amely megváltoztatja az α -részecske impulzusát (azaz energiáját, haladási irányát). Az erre vonatkozó hatáskeresztmetszetet nevezzük *teljes szórási hatáskeresztmetszetnek*.
- Uránatommag szórócentrum, neutronokból álló nyaláb. A neutronok elhasíthatják az uránmagot: lehet az „érdekes esemény” a neutronindukált maghasadás; beszélhetünk az uránmagnak a neutronokra vonatkozó hasadási hatáskeresztmetszetéről.
- Ugyanígy: uránmag szórócentrum, neutronnyaláb. Gondoljunk arra, hogy a neutronok (hasítás nélkül) el is nyelődhetnek az uránmagnak: beszélhetünk az uránmagnak a neutronokra vonatkozó elnyelési (abszorpciós) hatáskeresztmetszetéről.
- További lehetőség uránmag szórócentrum, neutronnyaláb esetén: a neutronok szóródhatnak az uránmagon (a kölcsönhatás után megváltozott impulzussal továbbrepülhetnek). Ha egy kiterjedt detektor egy adott térszögbe kirepülő neutronokat érzékeli, akkor vehetjük „érdekes eseménynek” azt, ha a szórt neutron eltalálja

a detektort: ehhez az eseménytípushoz is tartozik az uránmagnak egy megfelelő hatáskeresztmetszete.

- Tekintheszük „érdekes eseménynek” azt is, hogy az uránmaggal találkozáskor *egyáltalán bármi* történik a bejövő neutronnal (azaz nem halad tovább zavartalanul): az ehhez az eseményfajtaéhoz tartozó hatáskeresztmetszet neve az uránatommag neutronokra vonatkozó teljes hatáskeresztmetszete.
- Szórás folyamat sokféle más részecske, illetve céltárgy között is lejátszódhat: lehet szó pl. elektronok szórásáról atomon (tehát egy atom a céltárgy, a nyaláb pedig elektronokból áll), de a későbbi fejezetben szó lesz pl. *fotonok* (mint a nyalábban belépő részecskék) elektronokon való szórásáról, illetve ennek hatáskeresztmetszeteéről is (ilyenkor tehát egy darab elektront tekintünk céltárgynak).

Ha adott egy nyaláb, egy céltárgy és egy érdekes eseményfajta, akkor jelölje utóbbiak időegységenkénti bekövetkezési számát \dot{N}_{ki} (mint „kijövő” részecskeszám; de, mint a példákban láttuk, nemcsak a kijövő részecskék számáról, hanem valamilyen indukált folyamatról, pl. a maghasadások számáról is lehet szó). Természetesnek hat, és igaz is, hogy ez arányos a nyaláb intenzitásával: kétszer annyi beeső részecske egységnyi idő alatt kétszer annyi eseményt hoz létre. Az is természetesnek tűnik, hogy minél sűrűbb a nyaláb (azaz minél kisebb területre, minél inkább a céltárgyra „fókuszáljuk” a beeső részecskéket), annál (arányosan) több eseményt látunk: azt kapjuk így, hogy \dot{N}_{ki} arányos a bejövő nyaláb j_{be}^N áramsűrűségével. Az arányossági tényezőt σ -val jelöljük:

$$\dot{N}_{ki} = j_{be}^N \sigma, \quad \text{ahol} \quad [\dot{N}_{ki}] = \frac{db}{s}, \quad [j_{be}^N] = \frac{db}{m^2 s}. \quad (1.10)$$

Kiírtuk a szereplő mennyiségek mértékegységeit is: a bevezetett σ -nak valóban terület (m^2) dimenziójúnak kell lennie. Ezt a σ mennyiséget hívjuk tehát a vizsgált folyamat **hatáskeresztmetszetének**. Úgy is fogalmazhatunk, hogy az időegységenkénti bekövetkezések \dot{N}_{ki} száma megadható mint az időegységenként bejövő részecskék száma, \dot{N}_{be} , megszorozva a bekövetkezés („ütközés”) valószínűségével. Ha A a beeső nyaláb keresztmetszete, akkor a fluxus nyilván $j_{be}^N = \frac{1}{A} \dot{N}_{be}$, így a mondott valószínűség:

$$\begin{aligned} \langle \text{ütk. val.} \rangle &= \frac{\sigma}{A}, \quad \text{hiszen így valóban} \quad \dot{N}_{ki} = \dot{N}_{be} \cdot \langle \text{ütk. val.} \rangle = \\ &= \dot{N}_{be} \cdot \frac{\sigma}{A} = \frac{\dot{N}_{be}}{A} \sigma = j_{be}^N \sigma. \end{aligned} \quad (1.11)$$

A σ mennyiség tehát tényleg azt jelenti, hogy a vizsgált folyamat szempontjából mekkorának látszik a szórócentrum (céltárgyrészecske): úgy képzelhetjük, hogy a nyalábban bejövő részecskék közül azokkal történik meg a vizsgált folyamat, amelyek eltalálják ezt a σ nagyságú képzeletbeli céltáblát. Ha (mint általában) nem egy, hanem több ($N_{\text{céltárgy}}$ módon jelölt darabszámú) céltárgyrészecske szerepel a kísérletben (mint pl. egy kiterjedt anyagdarab minden atomja), akkor amennyiben az egyes céltárgyak által nyújtott valószínűségek összeadódnak, azt írhatjuk, hogy

$$\dot{N}_{ki} = \dot{N}_{be} \cdot \langle \text{ütk. val.} \rangle = \dot{N}_{be} \frac{N_{\text{céltárgy}} \sigma}{A} = j_{be}^N N_{\text{céltárgy}} \sigma. \quad (1.12)$$

Bizonyos (rögtön tisztázandó) értelemben „vékony” anyagdarab („minta”; amiben a szórócentrumok vannak) esetén mondhatjuk, hogy semelyik kis σ területűnek képzel

céltárgyrészecske sem „takarja ki” a másikat: ekkor igaz, hogy az egyes szórócentrumokon történő események egymástól független események, ezért a valószínűségek a felírt értelemben tényleg összeadódnak. Vizsgáljuk meg viszont, hogy hogyan csökken egy (azonos szórócentrumokból álló) „vastag” mintába belépő nyaláb intenzitása a megtett x távolság függvényében! Legyen az eredeti intenzitás az $x = 0$ helyen $I(x = 0) \equiv I_0$; az $I(x)$ függést keressük tehát. Legyen σ_t a szórócentrumoknak a nyalábrészecskékre vonatkoztatott teljes hatáskeresztmetszete – úgy képzeljük, hogy azok a részecskék, amelyek bármilyen kölcsönhatásba is léptek egy szórócentrummal, a nyaláb szempontjából elvesztek, „kiszóródtak”. Adott x helyen egy vékony dx vékony rétegre beeső \dot{N}_{be} részecskeszám éppen az ottani $I(x)$ nyalábbintenzitás; ennek megváltozása tehát

$$\begin{aligned} I(x + dx) &= I(x) - \langle \text{ütk. val.} \rangle \cdot \dot{N}_{\text{be}} \cdot N_{\text{céltárgy}} = -\frac{\sigma_t}{A} I(x) N_{\text{céltárgy}} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{I(x+dx) - I(x)}{dx} &= -I(x) \sigma_t \cdot \frac{N_{\text{céltárgy}}}{A dx} = -n \sigma_t I(x). \end{aligned} \quad (1.13)$$

ahol a mínuszjel azt fejezi ki, hogy a nyalábból a részecskék elvesznek, és bevezettük a mintára jellemző $n = N_{\text{céltárgy}}/(A dx)$ mennyiséget, mely a szórócentrumok anyagbeli sűrűsége (hiszen most $A dx$ éppen a mintánk azon térfogata, ahol a mondott $N_{\text{céltárgy}}$ darab szórócentrum található). Innen tehát (a $dx \rightarrow 0$ esetből) arra jutunk, hogy

$$\frac{dI}{dx} = -n \sigma_t I(x) \Rightarrow I(x) = I_0 e^{-x/\lambda}, \quad \text{ahol tehát} \quad \lambda \equiv \frac{1}{n \sigma_t}. \quad (1.14)$$

Az itt bevezetett (hosszúság dimenziójú) λ mennyiség neve **szabad úthossz**: a beeső nyaláb intenzitása ennyi úthossz bejárása után csökken e -edrészére az anyagban. A fentebb mondottak úgy pontosíthatók, hogy a minta „vékonynak” tekinthető, ha λ -hoz képest vékony: ekkor $x \ll \lambda$ mindenhol a mintánkban, így a „kiszóródott” intenzitás, $I_0 - I(x) = I_0(1 - e^{-x/\lambda})$ közelítőleg (mivel $e^{-x} \approx 1 - x$, ha $x \ll 1$) úgy írható, mint $I_0 - I(x) \approx I_0 x / \lambda = n \sigma_t x = n x A \cdot \frac{I_0}{A} \sigma_t = N_{\text{céltárgy}} \sigma_t j_{\text{be}}^N$, vagyis arányos a céltárgyrészecskék számával (és ez az arányosság nemcsak a teljes hatáskeresztmetszethez tartozó „valamilyen folyamat”-eseményt, hanem valamilyen specifikusabb eseményt, illetve hatáskeresztmetszetet tekintve is igaz lesz). Vastagabb minta esetén már észrevehetően csökken a nyaláb intenzitása a mintába befelé haladva – már nem közelíthetjük az exponenciális lineárisal; mondhatjuk, hogy az elől lévő szórócentrumok jelenléte már befolyásolja azt, hogy a hátrébb lévők mennyit „kapnak” a nyalábból.

Amikor a vizsgált esemény valamilyen térszögbe való szóródás, akkor minden adott detektorelrendezéshez tartozik egy (az adott detektorba való szóródáshoz tartozó) hatáskeresztmetszet. Ez nyilván függ a detektor által lefedett térszögtől: kisebb detektor esetén kisebb az abba való szóródás valószínűsége. Igen kicsi $\Delta\Omega$ térszöget lefedő detektor esetén ez arányos $\Delta\Omega$ -val: az arányossági tényező egy, a $\Delta\Omega$ térszögelem irányától függő függvény, melynek neve: **differenciális hatáskeresztmetszet**, jelölése: $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi)$, ahol a θ és ϕ változók a vizsgált kicsi térszögtartomány irányát (θ a beeső nyaláb irányához képesti szórási (polár-)szöget, ϕ pedig a beeső irány tengelye körüli azimuttszöget) jelölik ki. Egy adott (θ, ϕ) irányban elhelyezkedő $\Delta\Omega$ tartományba érkező (szóródó) részecskék száma tehát

$$\dot{N}_{\text{ki}, \Delta\Omega} = j_{\text{be}}^N N_{\text{céltárgy}} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) \cdot \Delta\Omega. \quad (1.15)$$

Gömbi koordinátákban a θ és $\theta + d\theta$, illetve ϕ és $\phi + d\phi$ értékek közötti infinitezimális térszögtartomány kifejezése $d\Omega = d\phi \sin\theta d\theta$, illetve ϕ -ben vett forgási szimmetria esetén (amely, mivel a szórócentrumok sokszor véletlenszerűen orientáltak és ráadásul gömbszimmetrikusak, sok esetben fennáll) integrálhatunk erre a változóra, és így $\Delta\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ adódik. Ekkor $d\sigma/d\Omega$ csak a θ polárszögtől függ.¹

Az eddigiekben olyan nyalábot tekintettünk, mely jól megfogható különálló berepülő részecskékből áll. A hatáskeresztmetszet fogalma akkor is használható, ha pl. valamilyen beeső sugárzásról van szó, melynek intenzitása a szállított energiával kapcsolatos: ilyen esettel találkozunk a következő fejezetben a fényszórás tárgyalásakor. Ilyenkor a bejövő fluxus, j_{be}^E a felület- és időegységenként beeső energiát jelenti, a vizsgált folyamatot pedig pl. valamilyen irányba (térszögtartományba) szóródó energiamennyiség, \dot{E}_{ki} jellemzi; ezek kapcsolatát is hatáskeresztmetszettel adhatjuk meg:

$$\dot{E}_{\text{ki}} = j_{\text{be}}^E \sigma, \quad [\dot{E}_{\text{ki}}] = \frac{\text{J}}{\text{s}}, \quad [j_{\text{be}}^E] = \frac{\text{J}}{\text{m}^2 \text{s}}.$$

Amikor pedig majd a mikrorészecskék mozgását a kvantummechanika segítségével írjuk le, akkor nem az egyes konkrét belépő részecskék számát fogjuk tekinteni, hanem csakis a nyalábrészecskék adott felületen (egységnyi idő alatt való) áthaladási valószínűségét, azaz a j_{be}^P valószínűségfluxust. A kijövő részecskék száma helyett is valamilyen folyamatnak megfelelő (időegységre eső) valószínűség, \dot{P}_{ki} lesz érdekes, mely szintén a hatáskeresztmetszettel kapható meg:

$$\dot{P}_{\text{ki}} = j_{\text{be}}^P \sigma, \quad [\dot{P}_{\text{ki}}] = \frac{\text{vsz.}}{\text{s}}, \quad [j_{\text{be}}^P] = \frac{\text{vsz.}}{\text{m}^2 \text{s}}.$$

A folytonos mezők szórásának elméleteiben (például a kvantummechanikában) a bejövő nyaláb egy \mathbf{k} hullámszámvektorral rendelkező síkhullámmal írható le, és kiderül majd, hogy ennek szórása esetén az eredményül adódó hullámot az eredeti síkhullám és a hozzá képest $f(\theta)$ szórási amplitúdójú kifutó gömbhullám összegeként írhatjuk fel:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.16)$$

(Itt forgási szimmetriát tettünk fel a ϕ azimutuszög szerint, ezért írtunk csak $f(\theta)$ polárszögfüggést.) A differenciális hatáskeresztmetszet pedig így adódik majd:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2. \quad (1.17)$$

(Szokásos helyzet, hogy a fizikailag mérhető releváns mennyiség az amplitúdó négyzete: ez a kvantummechanikában és a fényszórást leíró elektromosságban is így van.) A szórási amplitúdó viszont, mint kiderül, az úgynevezett Born-közelítésben (ahol a szórt hullám amplitúdója lényegesen kisebb a bejövő hulláménál) a szóró potenciál $\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{K} = \mathbf{k}_{\text{be}} - \mathbf{k}_{\text{ki}}$ változókkal elvégzett Fourier-transzformálásával kapható majd

¹ Megemlítjük, hogy a differenciális hatáskeresztmetszetnek még általánosabb fogalma is bevezethető. Pl. ha a szórásban változhat a szóródó részecske E energiája is, akkor a kirepülési irányt megadó θ és ϕ mellett a kijövő részecske E energiája is egy folytonos változó, melynek adott E és $E + dE$ értékek közé való esésének megfelelő (infinitezimális) hatáskeresztmetszet (a térszögfüggést is belevéve) $\frac{d\sigma}{d\Omega dE} \cdot d\Omega dE$ módon írható le. Ezen $\frac{d\sigma}{d\Omega dE}$ függvény (ami E , θ és ϕ függvénye) ebben az esetben az energia és irány szerinti differenciális hatáskeresztmetszet.

meg – szórási kísérletekben tehát tulajdonképpen a potenciál alakját mérhetjük meg (annak Fourier-transzformáltján keresztül). A teljes hatáskeresztmetszet pedig a szórási amplitúdó nullában vett értékéből (illetve ennek imaginárius részéből) adódik, ahogy ezzel későbbi tanulmányokban „optikai tétel” címszó alatt találkozhatunk:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(0). \quad (1.18)$$

Gyakorlófeladat

Egy részecskenyaláb szórását figyeljük meg. A részecskék 1%-a szóródik az 5 cm vastag, 10^{23} db/cm³ számsűrűségű céltárgyon. Mekkora volt a hatáskeresztmetszet? Hogy viszonyul ez egy tipikus atommag méretéhez (lásd alább)?

1.4. Részecskék szóródása centrális erőterben

Térjünk vissza részecskék szóródásához egy rögzített szórócentrum által keltett erőterben: legyen tehát egyetlen szórócentrumunk ($N_{\text{céltárgy}} = 1$)! A bejövő nyaláb egy részecskéjének nyalábon belüli helyzetét a b *impakt paraméter*, más néven *ütközési paraméter* jellemzi: ilyen messze haladna el az adott részecske a szórócentrum mellett, ha nem hatna rá az erőter, azaz nem változtatna irányt. Kölcsönhatás esetén egy adott b impakt paraméterű részecske egy θ szórási szögben halad tovább; ez a θ nyilván b függvénye. A bejövő nyaláb b és $b + db$ impaktparaméter-intervallumba eső része pedig a megfelelő θ és $\theta + d\theta$ szórási szöget közötti szögtartományba szóródik. Ezen részecskék (ezek számát jelöljük most \dot{N}_{be} -vel) egy $2\pi b db$ felületen eloszolva jönnek be, tehát

$$j_{\text{be}} = \frac{\dot{N}_{\text{be}}}{2\pi b db}. \quad (1.19)$$

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 az (1.15) egyenlet alapján

$$\dot{N}_{\text{ki}} = \frac{\dot{N}_{\text{be}}}{2\pi b db} \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin\theta d\theta, \quad \text{azaz} \quad (1.20)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|, \quad \text{hiszen} \quad db = \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\theta. \quad (1.21)$$

Az abszolút értékre azért van szükség, mert a legtöbb esetben a $b(\theta)$ csökkenő függvény (és így $\frac{db}{d\theta}$ negatív előjelű): nagyobb szórási szög kisebb impakt paraméterrel érkező részecskékre valósul meg. A levezetés illusztrációjaként lásd a 3. ábrát. A lényeg tehát: a szórást létrehozó erőterbeli mozgást megoldva megkaphatjuk a $\theta(b)$, illetve a $b(\theta)$ függést, amelyből a látott módon kiszámíthatjuk a szórás differenciális hatáskeresztmetszetét. Fontos látni, hogy ha a szórócentrum által keltett erőter végtelen hatótávolságú, abban az értelemben, hogy (kicsit ugyan, de) az akármilyen messze lévő (akármilyen nagy impakt paraméterű) nyalábrészecskékre is hat, akkor a látott modellben *minden* bejövő részecske *valamilyen* irányváltozást szenved: a *teljes hatáskeresztmetszet* végtelen. Ezt onnan is láthatjuk, hogy az (1.21) egyenletből kiindulva, $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$

segítségével

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_{\pi}^0 2\pi b \frac{db}{d\theta} d\theta = \pi [b^2]_{\pi}^0 = b^2(0)\pi \quad (1.22)$$

adódik (ha $b(\pi) = 0$, azaz a nulla impakt paraméterrel beérkező részecske éppen visszaverődik). Ez pedig csak akkor véges, ha $b(0)$ véges (és ekkor éppen a $b(0)$ sugarú kör területe), tehát már véges b impakt paraméter esetén is $\theta = 0$, azaz nem történik szórás.²

Vizsgáljunk centrális erőterben való szóródást, illetve az ott tapasztalt $b(\theta)$ összefüggést (azaz hogy adott b impakt paraméterrel érkező részecske milyen θ szöggel halad tovább). Írja le egy részecske pályáját az $(r(t), \theta(t))$ függvény (ahol tehát t az idő, θ a polárszög, r pedig az origóba helyezett szórócentrumtól vett távolság). Ekkor a centrális erőter miatt a gyorsulás sugárirányú, és a centrumtól vett távolság második deriváltjából továbbá a centripetális gyorsulásból áll össze:

$$a = a_r = \ddot{r} - r\dot{\theta}^2. \quad (1.23)$$

Az időfüggést kezeljük úgy, hogy definiáljuk a következő függvényt:

$$u = \frac{1}{r} \circ \theta^{-1} \text{ avagy } u \circ \theta = \frac{1}{r}, \quad (1.24)$$

ahol a $^{-1}$ a függvény inverzét jelöli, \circ pedig a kompozíciót: úgy is írhattuk volna tehát, hogy $u(\theta) = 1/r$. Centrális erőterben a mozgás síkban zajlik le: ha ismerjük az ebben vett polárszög $\theta(t)$ időfüggését, akkor az $u(\theta)$ kapcsolaton keresztül $u(\theta(t))$ végül megadja r időfüggését is. Az r időderiváltja a következő módon adódik:

$$\dot{r} = -\frac{u'}{u^2} \dot{\theta} = -u' \frac{J}{m}, \quad (1.25)$$

ahol felhasználtuk a J perdület (impulzusmomentum) definícióját is:

$$J = mr^2 \dot{\theta} = m\dot{\theta}/u^2. \quad (1.26)$$

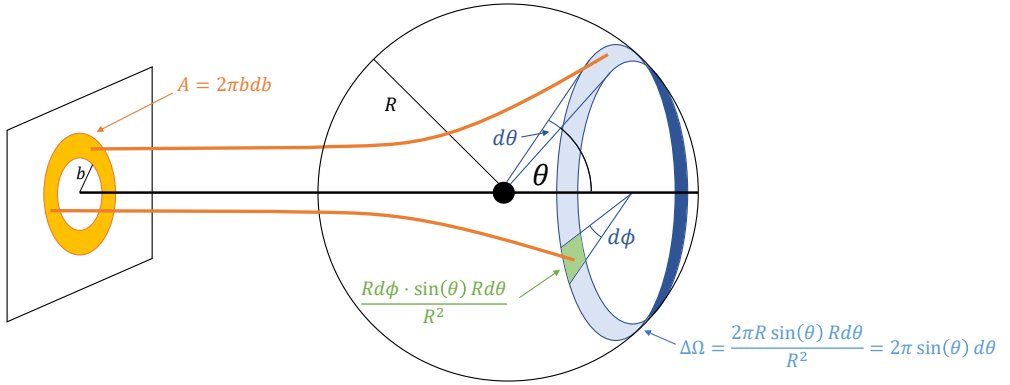
(Szokásos egyszerűsítő írásmódot használtunk; ha precízen ki akarnánk jelölni, hogy mi minek a függvénye, akkor egyes tagok vagy tényezők végére még egy $\circ \theta$ kifejezést oda kell képzelni, hogy a fenti függvényekre vonatkozó egyenletekben minden tag végső soron tisztán időtől függjön.) A második derivált ezek után a perdület megmaradása ($\dot{J} = 0$) miatt, illetve a $\dot{\theta} \leftrightarrow J$ kapcsolatot kihasználva

$$\ddot{r} = -u'' \dot{\theta} \frac{J}{m} = -u'' u^2 \frac{J^2}{m^2}. \quad (1.27)$$

A gyorsulás fenti $a = \ddot{r} - r\dot{\theta}^2$ kifejezésében a második tagban J definíciója alapján

$$r\dot{\theta}^2 = u^3 J^2 / m^2, \quad (1.28)$$

² Már most megjegyezzük, hogy ez a – végtelen hatáskeresztmetszetre vezető – következtetés nem érvényes akkor, amikor a részecskék mozgását a kvantummechanika segítségével írjuk le. A természetben sok erőter (pl. a Coulomb-erőtér, de a magerő is) olyan, hogy a fenti értelemben végtelen a hatótávolsága. Előfordul ugyanakkor (pl. a magerő esetén), hogy a fent részletezett, klasszikus részecskét használó kép végtelen hatáskeresztmetszetet ad, kvantummechanikai számolásból (és a valóságos kísérleti megfigyelésből) mégis véges teljes hatáskeresztmetszetre jutunk.



$$\left. \begin{array}{l} \dot{N}_{ki} = N_{\text{cél tárgy}} \frac{\dot{N}_{be}}{A} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega \\ N_{\text{cél tárgy}} = 1 \\ \dot{N}_{ki} = \dot{N}_{be} \end{array} \right\} \Longrightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{A}{\Delta\Omega} = \frac{2\pi bdb}{2\pi \sin(\theta) R d\theta} = \frac{b}{\sin(\theta)} \left| \frac{db}{d\theta} \right|$$

3. ábra. A rajzon a centrális erőterén való szóródást látjuk, a lényeges geometriai mennyiségekkel egyetemben. Az alatta lévő formulák a differenciális szórási hatáskeresztmetszet klasszikus értékét vezetik le, az impakt paraméter és a szórási szög összefüggésének segítségével.

így a Newton-egyenlet végső soron a következőképpen írható át:

$$F = ma = -\frac{u^2 J^2}{m} (u'' + u), \quad \text{azaz} \quad u'' + u = -\frac{Fm}{J^2 u^2}. \quad (1.29)$$

Ez utóbbit Binet-egyenletnek nevezik: a Newton-egyenlet ezen alakja különösen alkalmas olyan erők tárgyalására, amelyek az origótól vett r távolságtól $\sim 1/r^2$ módon függenek: ekkor F/u^2 állandó. Ilyen a Coulomb-erőtér is.

A Coulomb-erőtér $F = kq_1 q_2 / r^2$ alakú, ahol k a Coulomb-állandó (melynek $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ alakja is ismerős lehet), q_1 és q_2 pedig a két részecske (esetünkben a szórócentrum, illetve a nyalábrészecske) töltése. (Az irányra oda kell figyelni: a pozitív a „kifelé” mutató irány, amely tehát taszító erőnek felel meg.) Ha a beeső részecske energiája $E = mv^2/2$, ahol itt v a „kezdeti” (még végtelen távol lévő részecskére érvényes) sebesség, impakt paramétere pedig b , akkor a perdület $J = mvb$. Ezekkel a Binet-egyenlet így alakul Coulomb-kölcsönhatás esetére:

$$u'' + u = -k \frac{q_1 q_2}{2Eb^2} = -\kappa \quad (\text{konstans}). \quad (1.30)$$

Ezen egyenlet általános megoldása

$$u(\theta) = c_1 \cos \theta + c_2 \sin \theta - \kappa. \quad (1.31)$$

Ha a pálya origóhoz legközelebbi (attól R távolságra lévő) pontján kezdjük a paraméterezést (azaz innen indítjuk a θ szöveget), akkor az $u(\pi/2) = 1/R$, $u'(\pi/2) = 0$ kezdeti feltételeket kell használni. Ilyenkor a fő paraméter az ezen kezdeti pontban az erő és az energia hányadosa: ennek értékétől függően alakul ki hiperbola-, parabola-, kör- vagy ellipszispálya.

Most azonban nem így vizsgáljuk a pályát, hanem adott ($\theta = 0$ értékhez rögzített) irányból, adott b impakt paraméterrel „a végtelenből” ($r = \infty$, azaz $u = 0$ értéktől) érkező részecskét tekintünk. Ekkor $u(\theta = \pi) = 0$, ezért az általános megoldás c_1 konstansára $c_1 = -\kappa$ a megfelelő választás. Így $u(\theta) = -\kappa(\cos \theta + 1) + c_2 \sin \theta$ adódik. Figyelembe véve továbbá, hogy (ahogy fentebb is írtuk) $u' = -mv/J$, ezért erre kezdetben

$$u'(\theta = \pi) = -\frac{mv}{J} = -\frac{1}{b} \quad (1.32)$$

érvényes, ahonnan $c_2 = 1/b$. Az ennek is megfelelő megoldás most már az

$$u = -\kappa(\cos \theta + 1) + \frac{1}{b} \sin(\theta) \quad (1.33)$$

formában adódik. Figyelembe véve, hogy $\theta \neq \pi$ esetén

$$\sin \theta = \frac{2\operatorname{tg}(\theta/2)}{1 + \operatorname{tg}^2(\theta/2)} \quad \text{és} \quad \cos \theta + 1 = \frac{2}{1 + \operatorname{tg}^2(\theta/2)}, \quad (1.34)$$

u fenti kifejezését b -vel szorozva ez adódik:

$$b \cdot u(\theta) = -\frac{2\kappa b}{1 + \operatorname{tg}^2(\theta/2)} + \frac{2\operatorname{tg}(\theta/2)}{1 + \operatorname{tg}^2(\theta/2)}. \quad (1.35)$$

Ez alapján $u(\theta)$ két pontban nulla a $\theta \in [0, \pi]$ intervallumon: ezek a $\theta = \pi$ és a $\theta = 2 \arctan(b\kappa)$ értékek. A kezdeti (végtelen távoli bejövő részecskének megfelelő) helyzetben valóban $r = \infty$, azaz $u = 0$, és ennek a helyzetnek felel meg a $\theta = \pi$ érték. A másik talált megoldást pedig szintén $u = 0$ (azaz $r = \infty$) értéknek felel meg: ez tehát a végtelen messze elrepült kimenő részecske esete; a másik talált θ megoldás tehát megadja a szórás szögét. Mostantól θ tehát ezt a szórási szöget jelenti; erre

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = k \frac{q_1 q_2}{2Eb} \quad , \text{ azaz } \quad b = k \frac{q_1 q_2}{2E} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}. \quad (1.36)$$

Vegyük észre, hogy kis θ szöghöz valóban nagy impakt paraméter (b) tartozik (és fordítva is). Az (1.21) egyenletbe behelyettesítve, tudva, hogy $\operatorname{ctg}' = -\sin^{-2}$, azt kapjuk, hogy

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k \frac{q_1 q_2}{2E} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}}{\sin \theta} k \frac{q_1 q_2}{4E} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} = \left(k \frac{q_1 q_2}{2E} \right)^2 \frac{1}{4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{k q_1 q_2}{E} \right)^2 \frac{1}{16 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1.37)$$

Ez tehát a rögzített q_1 töltésű részecske elektromos terében szóródó, E energiájú, q_2 töltésű részecskék differenciális hatáskeresztmetszete. Ennek neve Rutherford- vagy Coulomb-szórás, illetve **Rutherford-hatáskeresztmetszet**.

Jelöljük ki egy adott $\theta_0 > 0$ értéket; kérdés: mekkora a *legalább* θ_0 szögű szórás hatáskeresztmetszete? Ehhez integrálnunk kell a kapott formulát a $\theta > \theta_0$ térszögre (természetesen $\theta \leq \pi$ -ig). Az eredmény (nem elfelejtve a 2π szorzót az azimuttszögre való integrálásból, illetve a $\sin \theta$ szorzót a térszögre való integrálás során):

$$\sigma_{\theta > \theta_0} = 2\pi \int_{\theta_0}^{\pi} d\theta \sin \theta \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \left(\frac{k q_1 q_2}{4E} \right)^2 \int_{\theta_0}^{\pi} d\theta \frac{\sin \theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \pi \left(\frac{k q_1 q_2}{2E} \right)^2 \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta_0}{2}.$$

Nem mellesleg – a fentebb talált $b(\theta)$ összefüggést felidézve – látható, hogy ez éppen a $b(\theta_0)$ sugarú kör területe: éppen az adott $b(\theta_0)$ -nál kisebb impakt paraméterrel érkező részecskék fognak θ_0 -nál nagyobb szögben szóródni. Látszik, hogy ha θ_0 -lal most 0-hoz közelítünk, akkor a kapott $\sigma_{\theta>\theta_0}$ érték egyre nagyobb lesz: határesetben mondhatjuk, hogy a teljes hatáskeresztmetszet végtelen, azzal összhangban, hogy bármilyen messzi impakt paraméterrel érkezik is egy részecske, *valamennyire* mindenképpen eltérül, hiszen a Coulomb-kölcsönhatás végtelen hatótávolságú.

Az eddigi számolás klasszikusan elképzelt részecskékre vonatkozott. Fentebb említettük, hogy kvantummechanikai tárgyalásban a differenciális hatáskeresztmetszet a szórási amplitúdó abszolút értékének négyzeteként adódik: $d\sigma/d\Omega = |f(\theta)|^2$. Szerepelt az is, hogy Born-közelítésben $f(\theta)$ a szórást okozó $V(\mathbf{r})$ potenciálból $\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{K}$ Fourier-transzformációval adódik, ahol $\mathbf{K} = \mathbf{k}_{\text{be}} - \mathbf{k}_{\text{ki}}$ a bejövő hullámhoz képest vett hullám-számvektor. Mármost kiderül, hogy az $1/|\mathbf{r}|$ Coulomb-potenciál Fourier-transzformáltja az $1/\mathbf{K}^2$ kifejezéssel arányos módon adódik.³ Később azt is látni fogjuk, hogy a részecske impulzusa az őt leíró kvantummechanikai hullám \mathbf{k} hullám-számvektorának nagyságával arányos, az energia pedig ennek négyzetével. Mondhatjuk tehát, hogy a kimenő vizsgált részecskét az adott θ irányban álló k nagyságú hullám-számvektor írja le, ahol $k = |\mathbf{k}_{\text{be}}|$ a bejövő hullám hullám-számával kifejezve, és kiderül némi trigonometriával, hogy $|\mathbf{K}| = 2k \sin(\theta/2)$. Ekkor a Rutherford-szórás differenciális hatáskeresztmetszetére kapott fenti eredményt visszakapjuk kvantummechanikailag is, hiszen

$$f(\theta) \propto \text{Fourier}[V(\mathbf{r})] \propto \frac{1}{\mathbf{K}^2} = \frac{1}{4k^2 \sin^2(\theta/2)}, \text{ és így} \quad (1.38)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \propto \frac{1}{16k^4 \sin^4(\theta/2)}. \quad (1.39)$$

Megemlítjük még, hogy, mint mondtuk, a kvantummechanikai levezetés ezen vázlata az ún. Born-közelítésen alapult (amikor a kölcsönhatást lényegében kis korrekcióként vesszük csak figyelembe), de kiderül, hogy Coulomb-kölcsönhatás esetén mindenfajta közelítés nélkül is el lehet végezni a kvantummechanikai hatáskeresztmetszet-számolást: ennek részletei túlmutatnak jelen jegyzet keretein, de eredményül ekkor is pontosan a látott Rutherford-formula adódik.

A következő szakaszban látjuk, hogy ezen hatáskeresztmetszet-formula nagy segítése volt Rutherfordnak és munkatársainak abban, hogy megállapítsák az atommagok létezését és hozzávetőleges méretét. Ők még a klasszikus levezetésre támaszkodtak (a kvantummechanika még nem született meg akkor); az később vált megnyugtató tudássá, hogy a kvantummechanikai számolás is a klasszikussal megegyező eredményre vezet.

Gyakorlófeladat

Egy 6 MeV mozgási energiájú, $3,73 \text{ GeV}/c^2$ tömegű és $-2e$ töltésű részecske 5 femtométeres impakt paraméterrel közelít meg egy $197 \text{ GeV}/c^2$ tömegű, $-79e$ töltésű szórócentrumot. Mekkora szöggel térül el? (A feladathoz érdemes felhasználni, hogy $ke^2 \approx 1,442 \text{ MeV}\cdot\text{fm}$.)

³ Ezt úgy lehet megindokolni, hogy kiszámítjuk a (háromdimenziós) Fourier-integrált a $\frac{kq_1q_2}{r}$ Coulomb-potenciál helyett a $\beta > 0$ paramétert véve a $\frac{kq_1q_2}{r} \frac{1}{r} e^{-\beta r}$ függvényt véve, majd az eredményben $\beta \rightarrow 0$ határátmenetet veszünk. Ennek a módszernek valódi létjogosultsága is van, ha a Fourier-transzformációt kiterjesztjük integrálható függvényekről disztribúciók közé.

1.5. Az atommag felfedezése, a Rutherford-modell

Rutherford (Geigerrel és Mardsennel) 1911-ben megmérte az alfa-bomlásból származó részecskék (α -részecskék, azaz mint nem sokkal az α -sugárzás felfedezése után kiderült: ${}^4_2\text{He}$ héliumatommagok) aranyfólián való szóródásának differenciális hatáskeresztmetszetét (lásd 4. ábra). A Thomson-féle atommodell alapján túlnyomórészt kisszögű szórást vártak, hiszen ha az atom egy egyenletes töltéeloszlású gömb, akkor a néhány MeV energiájú természetes α -részecskék alig néhány század fok eltérést szenvedhetnének az ilyen atomokon való szóródás során. Ezzel szemben a részecskék egy jelentősnek mondható része nagyszögű szórást szenvedett, sokuk konkrétan visszaszóródott (azaz $\theta \approx \pi$ irányváltoztatással szóródott). Ezt egyfajta **pontszerű maggal** lehetett magyarázni, illetve annak **centrális erőterében** való eltéréssel – az előző szakasz számolásaival jórészt ezt a gondolatot készítettük elő.

Egy E energiájú, $z = 2$ rendszámú α -részecske egy Z rendszámú, (anyagban) rögzített magot a kezdeti mozgási energia és a Coulomb-potenciál egyenlősége ($E = kzZe^2/d$) alapján a következő d távolságra tud megközelíteni:

$$d = \frac{kzZe^2}{E}. \quad (1.40)$$

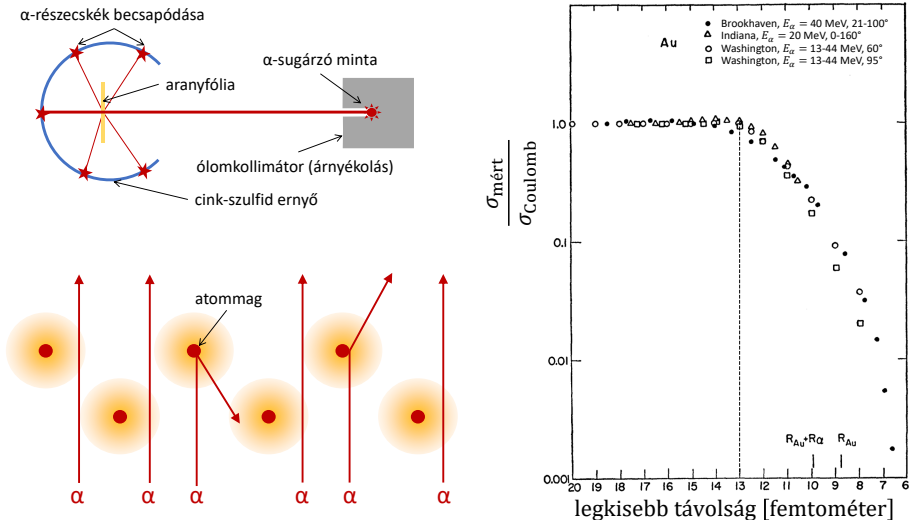
Ez pl. 6 MeV mozgási energiájú α -részecske és $Z = 79$ rendszámú aranyatommag esetén kb. 38 fm távolságot jelent. Ez a „leginkább megközelítés” a $b = 0$ impakt paraméterű mozgásnak felel meg. Az előző szakaszban kapott Rutherford-hatáskeresztmetszet egyszerűen kifejezhető ezzel a távolsággal:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = k^2 \frac{z^2 Z^2 e^4}{16E^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{d^2}{16 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1.41)$$

Rutherford részletesebb mérései azt mutatták, hogy az α -részecskék aranyfólián való szórása olyan szögeloszlással történik, ami pontosan ilyen alakú differenciális hatáskeresztmetszetből származik (az arany kémiából ismert $Z = 79$ rendszámát beírva). Emlékezve, hogy a formulát pontszerű töltés mint szórócentrum Coulomb-terét használva kaptuk, az a következtetés vonható le, hogy az aranyatomban van egy kicsi mag, amely a rendszámmal megegyező pozitív töltésű. Természetesen nem mondhatjuk, hogy ez valóban pontszerű: a kísérletben egy természetes ólomizotóp α -bomlásból származó nyalábot használtak; ennek energiája egy bizonyos (az imént példaként kiszámolthoz közel eső, kb. 30-40 fm-nyi) legkisebb távolságot tesz csak lehetővé, és mint tudjuk, egy gömbszimmetrikus kiterjedt töltéeloszlás elektrosztatikus potenciálja a gömbön kívül pont olyan, mintha a töltés a középpontba lenne koncentrálna. Végül tehát Rutherford méréseiből arra lehetett következtetni, hogy az aranyatommag mérete kisebb, mint 34 fm: mivel végig egyezést találtak a hatáskeresztmetszet-formulával, a kísérletben használt α -részecskék biztosan nem tudták annyira megközelíteni a magot, hogy a Coulomb-erőn kívül más hatás (későbbi tudással: a magerők hatása) is megjelenjen.

Mindenesetre az atommag mérete biztosan **több nagyságrenddel kisebb**, mint az aranyatom 10^{-10} méteres mérete. A mondott természetes α -sugárzás energiájánál néhányszor nagyobb energiájú α -részecskékre évtizedeket kellett várni, a részecskegyorsítók megjelenéséig: ilyeneket használva viszont nagy szögekre (azaz kis impakt paraméterre, közelebbi „legjobban megközelítésre”) eltérést találtak a Coulomb-kölcsönhatásból számolt Rutherford-formula által megadott szögfüggéstől (lásd a 4.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). A megfelelő impakt paraméter a mag méretét jelenti lényegében, illetve a két mag sugarának és a magerő hatótávolságának összegét.



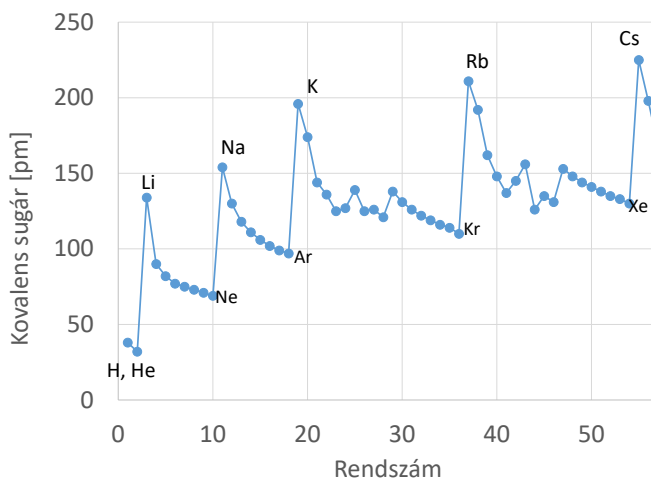
4. ábra. A Rutherford-féle kísérlet. A bal felső ábrán a kísérleti elrendezés, a bal alsó ábrán a magyarázatának illusztrációja látható. A jobb oldali ábra az, ami kvantitatíve is bizonyítja az atommag létét, és megadja annak méretét is. Ez azt mutatja, hogy kis impakt paraméterekre (melyek kis „legjobban megközelítő” távolságoknak felelnek meg) eltérést találhatunk a Coulomb-kölcsönhatásból számolt σ_{Cb} Rutherford-hatáskeresztmetszettel: az ábrán szereplő $\sigma_{\text{mért}}/\sigma_{Cb}$ értékek elkezdnek 1-től eltérni. Ennek oka az, hogy ilyenkor már érintkezik a mag és az α -részecske, és a Coulomb-kölcsönhatáson kívül másfajta kölcsönhatások is fellépnek.

Az atommag tehát az atom \AA nagyságrendű méreténél tíz- vagy százezerszer kisebb, az atom térfogatának nagy részét 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.

1.6. Az atomok mérete és tömege

Miután áttekintettük az atom és az atommag felfedezését, szenteljünk egy rövid szakaszt ezek méretének és tömegének is. Vegyük először is észre, hogy a móltömeg és az Avogadro-állandó ismeretében megkaphatjuk az **atomok tömegét**. Ezt atomi tömegegységben (más néven: daltonban) fejezhetjük ki például: az egység a ^{12}C szénizotóp atomja tömegének 1/12-ed részét jelenti. (Dalton maga a hidrogénatom tömegét javasolta egységnek, később Ostwald pedig az oxigénatom tömegének 1/16-át. Az izotópok felfedezése után kellett pontosan tisztázni a szereplő atomot; 1961-ben vezették be az új egységet, amely már a szén-12 izotópra épült.) Ma sokféle (Nier-féle, Mattauch-féle) tömegspektrográffal mérik az atomtömegeket, a mágneses térben létrejövő körpálya sugara és az impulzus között fennálló $p = qBr$ összefüggés alapján.

Az atomok tömege pedig kb. a tömegszám és az atomi tömegegység szorzatával egyezik meg, mert mint később kiderült, a tömeget lényegében a proton és a neutron adja, ezek számát jelenti a tömegszám. Később, a magfizikai tanulmányok során majd kiderül, hogy az atommag kötési energiája kicsit módosítja ezt az egyszerű összefüggést.



5. ábra. Az atomok kovalens sugara pikométerben, kisebb rendszámokra (a nagyobb rendszámú atomok méretének meghatározása során sok a bizonytalanság).

Az **atomok méretének** nagyon sok definíciója van (van der Waals, ionos, kovalens, fémes, Bohr), mindegyiket máshogy lehet mérni. Az értékek nyomásfüggetlenek, az elektronszerkezet határozza meg őket, és tipikusan 1 Å, azaz 10^{-10} m avagy 0,1 nm értékűek. Az azonos elektronszerkezetű, de különböző maggal rendelkező atomok esetén a méret csökken, ahogy a mag nő, ahogy ezt most egy ilyen ionsorra a kristályrácsokban felvett ionos sugár változásával illusztráljuk (a neon nem vesz részt kristályrácsban, ezért hiányzik a sorból):

atom	C ⁴⁻	N ³⁻	O ²⁻	F ⁻	Na ⁺	Mg ²⁺	Al ³⁺
méret (Å= 0,1 nm)	2,60	1,71	1,40	1,36	0,95	0,65	0,5

Az elektronfelhő mérete növeli az atom sugarát, és a két effektus alapján az alkálifémek mérete a legnagyobb (távoli külső elektron, kis mag), míg a nemesgázoké a legkisebb (fele-harmada az azonos főkvantumszámú alkálifémnek); lásd 5. ábra. A hidrogén és a héliumatomok a legkisebbek, méretük kb. 30 pm, míg a legnagyobbak közé tartozik a cézium (Cs, $Z = 55$), melynek kovalens sugara kb. 230-240 pm (méréstől függően). A még nagyobb rendszámú atomok mérete nehezebben mérhető, de a legtöbb méréseben a cézium- vagy a franciumatom adódik a legnagyobbnak. (A „természetes” periódusos rendszer végén szereplő uránatom vagy a legnehezebb stabil magú ólomatom kisebb még a káliumatomnál is.)

Az atomok (vagy molekulák) méretének nagyságrendjét a következő **gondolat kísérletből** becsülhetjük meg (amely Marx György „Atommagközelben” című könyvében is szerepel). Ha felforraltunk 1 m³ folyadékot, akkor a *forráshő* lényegében arra fordítódik, hogy az egymáshoz van der Waals-kölcsönhatással kapcsolódó folyadékatomokat (vagy molekulákat) elszakítsa. A forráshő jól ismert, adott folyadéokra jellemző mérhető

mennyiség. A molekulák közötti van der Waals-kölcsönhatás egy másik makroszkopikus jelenséghez is vezet: ez a *felületi feszültség* (jele most: γ), amely megmondja, hogy egységnyi szabad folyadékfelület létrehozása mennyi energiabefektetést igényel. A forralást gondolatban felfoghatjuk úgy is, hogy a folyadékot molekulányi darabokra „szeleteljük”: ha egy molekulát d méretű kockának képzelünk, az eredeti folyadékkocka oldalhossza pedig a , akkor a szeletelgetéssel összesen a^3/d^3 darab kis kockát hozunk létre, mindegyik felszíne $6d^2$, azaz összesen $6a^3/d$ felület jön létre. Ha némi szabadsággal most erre az esetre is érvényesnek gondoljuk a felületi feszültség makroszkopikus jelentését, akkor azt gondolhatjuk, hogy ehhez a szeletelgetéshez összesen $6\gamma a^3/d$ energiára van szükség. Másrészt ez egyenlő kell hogy legyen a (ρ sűrűségű, L tömegegységenkénti forráshőjű) folyadék tényleges elforralásakor befektetendő energiával, amiből tehát azt kapjuk, hogy

$$L\rho a^3 = 6\gamma \frac{a^3}{d} \quad \Rightarrow \quad d = \frac{6\gamma}{L\rho}. \quad (1.42)$$

Vízre ($L = 2250$ kJ/kg, $\rho = 1000$ kg/m³, $\gamma = 72$ mJ/m²) $d = 0,2$ nm értéket kapunk, a(z atomokból, nem molekulákból álló) folyékony héliumra jellemző értékeket ($L = 25$ kJ/kg, $\rho = 130$ kg/m³, $\gamma = 0,014$ mJ/m²) használva pedig a héliumatomra $d = 0,026$ nm-t: ez jó egyezést ad a héliumatom máshonnan ismert méretével. Hangsúlyozzuk persze, hogy a mutatott gondolatkísérlet (és számolás) csak nagyságrendi becslésre jó; az atomok pontosabb(an meghatározott előírás alapján mérhető) méretét ennél kifinomultabb módszerekkel kell számításal lekövetni.

Érdemes viszont 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 jutott, hogy a viszkozitás miatt disszipálódott energia mértéke megnő, ha szuszpendált gömbök (oldott molekulák) vannak jelen, és a viszkozitási együttható

$$\eta' = \eta \cdot (1 + \phi) \quad (1.43)$$

módon változik, ahol $\phi = \nu \cdot 4r^3\pi/3$ a molekulák térfogathányada (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

$$D = \frac{RT}{N_A 6\pi\eta r} \quad (1.44)$$

kifejezésén keresztül (lásd a Brown-mozgásról szóló 2.1 részt, ahol most az R gázállandót és az N_A Avogadro-állandót szerepeltetjük, ott pedig a $k = R/N_A$ Boltzmann-állandót) az Avogadro-állandó értéke is meghatározható – amely ekkoriban még nem volt igazán ismert (Perrin kapott érte Nobel-díjat 1926-ban).

Végezetül említsük meg, hogy az atommag mérete elég jó közelítéssel követi az $R = R_0 \cdot A^{1/3}$ összefüggést, ahol A a tömegszám, $R_0 \approx 1,2$ fm pedig egy empirikus állandó. Erre később, a magfizikai fejezetekben még visszatérünk. Addig is említsük meg, hogy ez a formula hidrogénre például nem igazán jó, hiszen a proton (töltéssel-oslás alapján meghatározott) mérete 0,84-0,87 fm körüli. Továbbá bizonyos izotópok atommagjai lényegesen nagyobbak a fenti formula által adottnál, ennek okairól is a magfizikai fejezetekben beszélünk majd.

Gyakorlófeladat

Az $R = R_0 \cdot A^{1/3}$ formula (ahol $R_0 \approx 1,2$ fm) alapján mekkora az atommagok sűrűsége?
Mekkora lenne a Föld sugara, ha ilyen sűrűsége lenne? (A Föld tömege $6 \cdot 10^{24}$ kg.)

2. Atomosság és kvantáltság makroszkópikus jelenségekben

2.1. A 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 (ő ezt mint a levegőben szálló porszemcsék fény hatására látható „táncát” írta le), illetve Ingenhousz is 1785-ben (ő koromszemcsék mozgását vizsgálta alkohol felületén). Brown volt azonban az, aki természettudományos módszerekkel fogott a jelenség vizsgálatához. 1827-ben virágpór vízben történő véletlenszerű mozgását figyelte meg: ma ehhez kötjük a jelenség felfedezését, illetve első tudományos dokumentációját. Felmerült, hogy ez a mozgás az élet egyfajta megnyilvánulása lenne, ezért Brown apró szervetlen részecskékkel is megismételte kísérletét, és hasonló eredményre jutott. A Brown-mozgás (lásd a 6. ábra) fontos tulajdonságai összefoglalva:

- független az időtől (nem csillapodik az idővel),
- független a folyadék kémiai összetételétől (kivéve annak 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 szemcséknek a kezdeti helyüktől való eltávolodásának négyzetének átlagos értéke az eltelt időtől

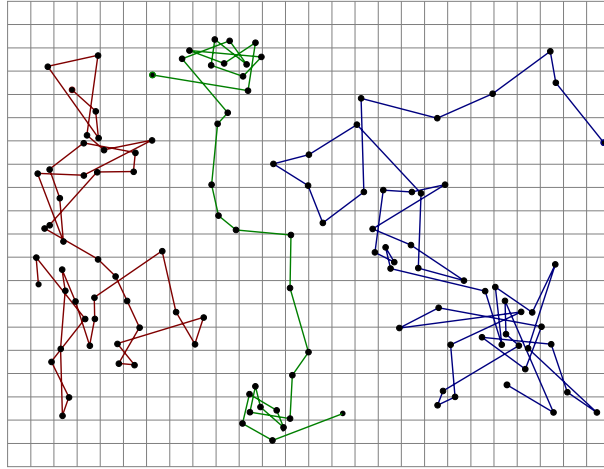
$$\langle x^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\eta r} t \quad (2.1)$$

módon függ, ahol k a Boltzmann-állandó, T az anyag hőmérséklete, η a viszkozitása és r a szemcseméret (leginkább sugár). 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 az iménti Einstein-féle képlet lényegében összes jóslatát.

Einstein levezetésének lényege az, hogy a diffúziós egyenletet és az ozmózisnyomást (és azon keresztül a kinetikus gázelméletet) összekapcsolja az alábbi módon. Vegyünk egy folytonos közeget, amelyben szuszpendált részecskék helyezkednek el, azaz ezek egyfajta híg oldatát. Ekkor az ozmózisnyomás ezek parciális nyomásából származik

$$p(x) = \nu(x)kT \quad (2.2)$$

módon, ahol $\nu(x) = N(x)/V$ a részecskék lokális számsűrűsége. Ekkor a részecskére ható ozmotikus erő úgy számolható, hogy ha valamely dx vastagságban dN molekula van,



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)

és itt dp az erőt okozó nyomáskülönbség, akkor adott A felület esetén $F_o = -Adp/dN$. Ebből (a formulát átalakítva dx -szel „bővítve”)

$$F_o = -\frac{1}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{kT}{\nu} \frac{\partial \nu}{\partial x} \quad (2.3)$$

adódik (egy dimenzióban kifejezve, az egyszerűség kedvéért). Ha a részecskék ennek hatására mozognak, akkor a Stokes-törvény szerint v sebesség esetén

$$F_k = -6\pi\eta r v \quad (2.4)$$

közegellenállási erő hat rájuk (η viszkozitású közegben). Ebből az egyensúlyi sebességük ($F_k + F_o = 0$ alapján)

$$v = -\frac{kT}{6\pi\eta r \nu} \frac{\partial \nu}{\partial x}. \quad (2.5)$$

Ez azt jelenti, hogy egy adott felületen időegységenként

$$\nu v = -\frac{kT}{6\pi\eta r} \frac{\partial \nu}{\partial x} \quad (2.6)$$

mennyiségű részecske áramlik át, azaz egy kis térfogatban a $\dot{\nu} = -(\nu v)'$ egydimenziós kontinuitási egyenletnek megfelelően a

$$\frac{\partial \nu}{\partial t} = -\frac{\partial(\nu v)}{\partial x} = \frac{kT}{6\pi\eta r} \frac{\partial^2 \nu}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

egyenlet által leírt módon 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-eloszlás alakú kezdeti feltétel esetén, N_{tot} számú részecske esetén

$$\nu(x, t) = \frac{N_{\text{tot}}}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]. \quad (2.8)$$

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

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 \nu(x, t) dx = 2Dt = \frac{kT}{3\pi\eta r} t, \quad (2.9)$$

amely összhangban van a fent összefoglalt kísérleti tényekkel.

Érdeemes megemlíteni ugyanennek a képletnek egy másik levezetését is, mely Langevin nevéhez fűződik. Ez a részecske Newton-egyenletét veszi alapul, a rá ható $F(x)$ véletlenszerű (a hőmérsékleti egyensúly esetén a környező molekulák „ide-oda lökdöséséből” származó) erőből és a közegellenállásból (Stokes-törvényből) kiindulva, majd a Newton-egyenletet $2x$ -szel szorozza és időben átlagolja:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x(t) - 6\pi\eta r \frac{dx}{dt} \Rightarrow \quad (2.10)$$

$$\Rightarrow m 2x \frac{d^2 x}{dt^2} = m \frac{d^2 x^2}{dt^2} - 2m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = 2F_x(t)x - 6\pi\eta r \frac{dx^2}{dt}. \quad (2.11)$$

Ha itt az időben vett várható értéket vesszük, és kihasználjuk, hogy a véletlen erő véletlenszerű jellege alapján feltehetjük, hogy $\langle xF_x \rangle_t = 0$ (azaz az erő és a már megtett távolság egymással korrelálatlanok; „szimmetriasértés” lenne ezen várható érték nullától való eltérése), ezen felül az átlagolást és az idő szerinti differenciálást felcseréljük, akkor ezt kapjuk:

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + \frac{6\pi\eta r}{m} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = 2 \left\langle \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 \right\rangle = \frac{2}{m} kT, \quad (2.12)$$

ahol az utolsó egyenlőség a hőmérsékleti egyensúly esetén fennálló (a kinetikus elméletből származó) ekvipartíció-tételt használja ki. 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):

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{6\pi\eta r} + c \exp\left[-\frac{6\pi\eta r}{m} t\right]. \quad (2.13)$$

Ez kellően nagy időkre (ha az exponenciálisan csökkenő tag járuléka már nem számít, azaz már nem a részecske kezdeti adott mozgása, illetve azt fenntartani igyekvő tehetetlensége, hanem tényleg a véletlenszerű erőből „származó” Brown-mozgás a döntő) az Einstein-féle formulát adja vissza:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\eta r} t. \quad (2.14)$$

A Brown-mozgás és a diffúzió kapcsán fontos megemlíteni, hogy ennek rengeteg alkalmazása van, a táplálékgyűjtő állatok mozgásától gazdasági folyamatok leírásáig. Az ilyen

folyamatokban kialakuló Gauss-eloszlások megjelenése a centrális határeloszlás-tételnek köszönhető. Ha azonban az ezt kialakító elemi lépések/folyamatok eloszlása „nehéz végű”, hatványfüggvényalakot ölt (azaz nincsenek momentumai), akkor anomális diffúzió lép fel, amelynek felépítő folyamata a Mandelbrot által definiált Lévy-repülés: ebben, szemben a hagyományos diffúziós mozgással (Rayleigh-repülés), gyakran „anomálisan nagy” ugrások fordulnak elő. Az ilyen folyamatokban Lévy-stabil eloszlások jönnek létre, amelyek a Gauss-eloszlás általánosításainak tekinthetők.

Amikor azt mondjuk, hogy a Brown-mozgás az atomelméletet támasztja alá, arra gondolhatunk, hogy egyrészt mindenképpen kihasználtuk az atomelméleten alapuló kinetikus elméletet a levezetéshez (termikus egyensúlybeli ekvipartíció-tétel, ozmózisnyomás, valamint ezeknek a fogalmaknak a szuszpendált részecskék mozgására vonatkoztathatóságát is), másrészt arra, hogy a végeredmény jellegű (2.14) képletben konkrétan az atomok méretével, létezésével kapcsolatos mikroszkopikus mennyiség is szerepel (a makroszkopikus anyagjellemzők mellett). Ez a k Boltzmann-állandó, amelynek értéke tehát meghatározható a Brown-mozgásnak (az $\langle x^2 \rangle$ elmozdulásnégyzet-átlag t -függésének) a megfigyelésével. A k Boltzmann-állandó $k = R/N_A$ módon adódik a (makroszkopikus megfigyelésekből leszűrhető) $R = 8,314 \text{ J/mol K}$ gázállandóból, illetve az N_A Avogadro-állandóból: innen nézve k véges (nem nulla) volta közvetlenül az atomok adott véges (azaz nem nulla) tömegével, vagyis az Avogadro-állandó határozott (nem végtelen) értékével van kapcsolatban. Mondhatjuk tehát, hogy abban az elképzelt világban, ahol minden makroszkopikus mennyiség (a gázokra vonatkozó R is) ugyanaz, mint amit ismerünk, de az atomok csak gondolatban léteznek („végtelenül kicsi” filozófiai alkotóelemek, idealizációk), nem létezne Brown-mozgás, mert hogy $k = 0$ lenne. Így tehát a Brown-mozgás tényleg az atomok határozott létét bizonyítja. Ez a gondolatmenet persze csak akkor érvényes, ha a Boltzmann-állandót a Brown-mozgás alapján definiáljuk, nem a joule és a kelvin mértékegységek közötti átváltás egységeként.

2.2. Sörétzaj

Schottky 1926-ban megfigyelte, hogy nagy frekvenciájú áramkörökben alacsony hőmérsékletnél egy érdekes zaj jelenhet meg. Ennek magyarázata később az lett, hogy a **töltéshordozók kvantáltak**, vagyis az áram nem folytonos változó, hanem véges számú elemi töltés mozgásából áll össze. A töltéshordozók száma fluktuál, és végső soron ez adja a zajt. Például ha egy mikrohullámú áramkört tekintünk, amely GHz nagyságrendű frekvencián működik, és az áram 16 nA , akkor (tudva, hogy 1 C töltés $6 \cdot 10^{18}$ db elemi töltésnek felel meg) 1 ns idő (a periódusidő nagyságrendje) alatt 100 db elektron halad el. A binomiális eloszlás szerint ennek fluktuációja kb. 10 , azaz a zaj a jel tizedét adja. Lássuk most mindezt részletesebben.

Az elektromos áram a töltéshordozók (elektronok) áramlásából adódik, és egy rövid t időtartam alatt a vezeték egy adott pontján „átfolyt” elektronok n számából az adott t időintervallum alatti áram $I = en/t$ módon adódik. Mivel azonban n véletlenszerűen változhat (hiszen véges számú töltéshordozóból nem pontosan ugyanannyi folyik át minden egyes t időintervallum alatt), I is véletlenszerűen változni (fluktuálni) fog. Ha n véletlen fluktuációja ismert, akkor az áram szórását (ingadozását) is megkaphatjuk:

$$(\Delta I)^2 = \langle (I(t) - \langle I \rangle)^2 \rangle = \frac{e^2}{t^2} \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \frac{e^2}{t^2} (\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2). \quad (2.15)$$

Határozzuk most meg n várható értékét és szórását. Ehhez első lépésben vegyünk egy elég hosszú T időtartamot, amely alatt a rendszert figyelemmel kísérjük. Tegyük fel, hogy tudjuk, hogy T idő alatt N darab elektron halad át a megfigyelt ponton, kérdés, hogy ez alapján mi a valószínűsége annak, hogy egy rövidebb t idő alatt éppen n darab elektron halad át. Ha az egyes elektronok áthaladását egymástól független eseményeknek tekintjük, akkor annak p valószínűsége, hogy egy kiszemelt elektron éppen (a nagy T intervallum részhalmazát jelentő) kijelölt t időintervallum alatt halad át, $p = t/T$. Ha most annak $W(n)$ valószínűségére vagyunk kíváncsiak, hogy a t időtartamunk alatt éppen n darab elektron halad át, akkor ez a **binomiális eloszlás** alapján adódik:

$$W(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}, \quad (2.16)$$

ugyanis a lehetőség, amit keresünk, az, hogy egyrészt az N elektron közül n darab pont a t alatt haladt át (innen a p^n szorzó), a maradék $N - n$ darab elektron viszont határozottan nem ekkor (innen az $(1-p)^{N-n}$ szorzó), másrészt a kiszemelt n darab elektronunkat $\binom{N}{n}$ -féleképpen választhatjuk ki az N darab közül. Az n várható értéke:⁴

$$\langle n \rangle \equiv \sum_{n=0}^N n W(n) = Np = N \frac{t}{T}, \quad (2.17)$$

ami igen természetes eredmény: várhatóan az N darab összes elektronból Np esik oda, ahova egy darab p valószínűséggel esik. Az $\langle n^2 \rangle$ várható érték pedig:⁵

$$\langle n^2 \rangle \equiv \sum_{n=0}^N n^2 W(n) = \dots = Np + N(N-1)p^2 = N \frac{t}{T} + N(N-1) \frac{t^2}{T^2}, \quad (2.18)$$

ezekből pedig a szórásnégyzetre azt kapjuk, hogy

$$(\Delta n)^2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = N \frac{t}{T} - N \frac{t^2}{T^2} = N \frac{t}{T} \left(1 - \frac{t}{T} \right). \quad (2.19)$$

Míndezen alapján az áram szórásnégyzetére, $(\Delta I)^2$ -re a következőt kapjuk, bevezetve az $\langle I \rangle \equiv eN/T$ mennyiséget, ami az áram várható értékének tekinthető:

$$(\Delta I)^2 = \frac{e^2}{t^2} (\Delta n)^2 = \frac{Ne^2}{tT} - \frac{Ne^2}{T^2} = \frac{e \langle I \rangle}{t} \left(1 - \frac{t}{T} \right), \quad (2.20)$$

⁴ Ennek kiszámításához az n szorzót az összegbe egy x valós változó bevezetésével és a szerinti deriválással lehet betenni, végül $x = 1$ -beli kiértékelést véve, így elvégezhető az összegzés:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \sum_{n=0}^N n W(n) = \sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} = \left[\sum_{n=0}^N n x^{n-1} \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} \right]_{x=1} = \\ &= \left[\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} p^n x^n (1-p)^{N-n} \right]_{x=1} = \left[\frac{d}{dx} (1-p+px)^N \right]_{x=1} = \left[Np(1-p+px)^{N-1} \right]_{x=1} = Np. \end{aligned}$$

⁵ Az előző lábjegyzetbeli módszerrel a $W(n)$ eloszlás szerinti $\langle n^2 \rangle$ átlag:

$$\begin{aligned} \langle n^2 \rangle &= \left[\sum_{n=0}^N n^2 x^{n-1} \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} \right]_{x=1} = \left[\frac{d}{dx} \left(x \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} p^n x^n (1-p)^{N-n} \right) \right]_{x=1} = \\ &= \left[\frac{d}{dx} \left(x \frac{d}{dx} (1-p+px)^N \right) \right]_{x=1} = \left[Np(1-p+Npx)(1-p+px)^{N-2} \right]_{x=1} = Np + N(N-1)p^2. \end{aligned}$$

a δI relatív szórásra pedig az adódik, hogy

$$\delta I \equiv \frac{\Delta I}{\langle I \rangle} = \sqrt{\frac{e}{\langle I \rangle t} \left(1 - \frac{t}{T}\right)}, \quad (2.21)$$

ha pedig most feltesszük, hogy $T \gg t$, akkor egyszerűen arra jutunk, hogy

$$T \gg t \text{ esetén: } \delta I \equiv \frac{\Delta I}{\langle I \rangle} \approx \sqrt{\frac{e}{\langle I \rangle t}} = \frac{1}{\sqrt{\langle n \rangle}}. \quad (2.22)$$

Ez tehát egy véletlen t időtartam során mért áramerősség átlagos eltérése a „teljes” időtartamra vonatkoztatott átlagos áramerősségtől. Figyeljük meg, hogy a kiválasztott nagy T intervallum lényegében csak egy segédmenyiség: ott jelenik meg csak a gondolatmenetben, hogy kiköthessük, hogy T idő alatt mennyi (N darab) elektron halad át, és így bevezethessük az $\langle I \rangle = eN/T$ átlagos áramerősséget (más szóval: az áram várható értékét). A valóságban inkább ez az $\langle I \rangle$ várható érték adott; egy kicsit természetesen akármilyen nagy T időtartam esetén is fluktuálni fog az azalatt átmenő elektronok száma: ugyanezzel a gondolatmenettel (egy T -nél lényegesen nagyobb időtartamból kiindulva) azt kapnánk, hogy N relatív fluktuációja $1/\sqrt{N}$ -nel arányos, annál kisebb, minél hosszabb a T . Kézenfekvő tehát a $T \rightarrow \infty$ határesetet tekinteni a szórásra kapott képletekben: ez az eredeti binomiális eloszlás szempontjából a **Poisson-eloszlást** adó határátmenet, lásd a következő szakaszban is. Mindenesetre arra jutottunk, hogy a $T \rightarrow \infty$, de fix $\langle I \rangle$ esetében (azaz amikor t fixen tartásával $p \rightarrow 0$ lesz, de $\langle I \rangle$ fix), $\langle n \rangle = (\Delta n)^2$: ez az egyenlőség egzaktul teljesül a Poisson-eloszlás esetén. (Véges nagy fix T és N esetén csak közelítőleg.) Az $\langle n \rangle \approx (\Delta n)^2$ kifejezésből az $I = en/t$ egyenlőség használatával közvetlenül is látható, hogy $e \langle I \rangle / t \approx (\Delta I)^2$, amiből a fenti (2.20) kifejezés is adódik.

A gondolatmenet fő eredménye tehát az áramnak a töltéshordozók kvantált jellege miatti relatív ingadozására vonatkozó kifejezés. Ez az ingadozás rezonancia hatására jelentősen felerősödhet. Legyen egy f rezonanciafrekvenciájú áramkörünk: ez éppen az ennek megfelelő $t = 1/2f$ időtartam alatti áramingadozást fogja érzékelni, illetve ezt felerősíteni. Ekkora időtartományt véve a relatív áramingadozás (2.22) alapján $\sqrt{2ef/I}$, ami tulajdonképpen a zaj erősségét fogja jelenteni: ezt a most tárgyalt fajta áramköri zajt hívjuk tehát sörétzajnak. Ez tehát akkor nagy, ha a frekvencia nagy, az átlagos áramerősség pedig kicsi. Ezen zaj mellett megjelenhetnek más fajta áramköri zajok is, pl. az ún. flicker (villódzási) zaj (melynek nagysága $\sim 1/f$, azaz a frekvenciával éppen hogy fordítottan arányos), illetve a hőmérséklettel arányos ún. Johnson–Nyquist-zaj is. Ezek azonban alacsony hőmérsékleten, kis áram és nagy frekvencia esetén jóval kisebbek lehetnek, mint a sörétzaj, amely tehát így domináns zajforrássá válik.

2.3. Sűrűségmozgások gázokban

A sörétzajra vonatkozó gondolatmenethez hasonló érveléssel beláthatjuk, hogy a gázok kvantáltsága (atomokra osztottsága) sűrűségmozgást hoz létre az átlagos $\nu = N_0/V_0$ számsűrűség körül (ahol egy adott V térfogatot és az abban lévő N darab gázrészecskét tekintünk). Rögzítsünk egy kisebb V_1 térfogatot, és keressük annak valószínűségét, hogy ebben éppen adott n számú részecske található. Ha feltesszük, hogy a gáz ideális, azaz tényleg semmilyen kölcsönhatás nincs a gázrészecskék (atomok vagy molekulák) között,

akkor jogos azt gondolni, hogy itt is (mint az előző szakaszban a sörétzaj tárgyalásakor) az, hogy a különböző gárzészecskék éppen hol tartózkodnak (azaz: a V_1 térfogatban tartózkodnak-e, vagy nem), egymástól teljesen függetlennek tekinthető „események”. Ekkor annak p valószínűsége, hogy egy adott gárzészecske itt tartózkodik:

$$p = \frac{V_1}{V} \quad \Leftrightarrow \quad p = \frac{\nu V_1}{\nu V} = \frac{\nu V_1}{N},$$

és annak $W(n)$ valószínűsége, hogy a V_1 térfogatban éppen n darab részecske van (azaz: az itt található részecskék n számának eloszlása), ugyanazzal az érveléssel beláthatóan, mint az előző szakaszban (annak, hogy az N közül az első n darab a kiszemelt V_1 -ben van, p^n a valószínűsége, ezt szorozni kell az azt megadó $(1-p)^{N-n}$ valószínűséggel, hogy a többi viszont nem itt van, majd figyelembe venni, hogy $\binom{N}{n}$ -féleképpen választhatjuk ki az adott n darab részecskénket) ugyanúgy binomiális eloszlást követ:

$$\text{ha } N \text{ és } V \text{ véges fix értékek:} \quad W(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}. \quad (2.23)$$

Ez az eloszlás az ún. **Poisson-eloszlásra** vezet, ha elvégezzük azt a határátmenetet, hogy N -nel és V -vel is végtelenhez tartunk, de úgy, hogy közben $\nu = N/V$ állandó marad (és persze a kiszemelt V_1 térfogat is állandó érték marad):

$$\text{ha } N, V \rightarrow \infty, \text{ de } \nu \text{ adott érték:} \quad W(n) = \frac{(\nu V_1)^n}{n!} \cdot \exp[-\nu V_1]. \quad (2.24)$$

Ebből már a V és az N értékek önmaguk kiestek, tényleg csak a fixnek tartott ν sűrűség és V_1 térfogat értékei szerepelnek, méghozzá csak a szorzatuk: $\lambda \equiv \nu V_1$. A Poisson-eloszlás ezzel a λ -val mint paraméterrel tehát a következő alakban írható:

$$\text{Poisson-eloszlás:} \quad W(n) = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda},$$

ez adódik tehát a binomiális eloszlás határeseteként, ha $p = \lambda/N$, λ fix, de $N \rightarrow \infty$.⁶ A Poisson-eloszlás várható értéke éppen a λ paraméter, és szórásnégyzete is ugyanennyi:

$$\langle n \rangle = \lambda, \quad (\Delta n)^2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \langle n^2 \rangle - (\langle n \rangle)^2 = \lambda,$$

ez adódik a binomiális eloszlásra vett képletekből (lásd az előző szakasz (2.17) és (2.18) képleteit) a látott határesetben.⁷ Sok más hasonló helyzetben is Poisson-eloszlás kerül elő; érdemes megjegyezni tehát, hogy ekkor a szórásnégyzet megegyezik a várható

⁶ A következő módon végezhetjük el ezt a határátmenetet:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N!}{(N-n)!} \frac{1}{n!} \left(\frac{\lambda}{N}\right)^n \left(1 - \frac{\lambda}{N}\right)^{N-n} \left(1 - \frac{\lambda}{N}\right)^n = \\ &= \frac{\lambda^n}{n!} \cdot \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N!}{(N-n)! N^n} \cdot \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\lambda}{N}\right)^N = \frac{\lambda^n}{n!} \cdot 1 \cdot e^{-\lambda} = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda}. \end{aligned}$$

⁷ De közvetlenül is kijön konkrétan a Poisson-eloszlás képletét használva, lényegében ugyanazzal a módszerrel (lásd az előző 4., illetve 5. lábjegyzeteket): ha $W(n) = e^{-\lambda} \lambda^n / n!$, akkor

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n W(n) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda} \lambda^n \frac{n}{n!} = e^{-\lambda} \lambda \left[\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} x^n \right]_{x=\lambda} = e^{-\lambda} \lambda \left[\frac{d}{dx} e^x \right]_{x=\lambda} = e^{-\lambda} \lambda e^{\lambda} = \lambda, \\ \langle n^2 \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n^2 e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!} = e^{-\lambda} \lambda \left[\frac{d}{dx} \left(x \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} x^n \right) \right]_{x=\lambda} = e^{-\lambda} \lambda \left[\frac{d}{dx} \left(x \frac{d}{dx} e^x \right) \right]_{x=\lambda} = \lambda^2 + \lambda. \end{aligned}$$

értékkel, vagyis a szórás a várható érték négyzetgyöke; a relatív szórás pedig így a várható érték reciproka négyzetgyöke. Konkrétan a mi esetünkben is tehát: a kijelölt fix V térfogatban lévő gázcseppcskék számának várható értéke

$$\langle n \rangle = (\Delta n)^2 = pN = \nu V, \quad (2.25)$$

abszolút szórása $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle}$, amiből tehát a relatív szórás

$$\delta n \equiv \frac{\Delta n}{\langle n \rangle} = 1/\sqrt{\langle n \rangle}. \quad (2.26)$$

Ideális gázra $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékleten, légköri (1 atmoszféra) nyomáson a számsűrűség $\nu = 2,49 \cdot 10^{25}$ molekula/m³, a zöld fény 0,5 μm -es hullámhosszának megfelelő térfogatban (ilyen élhosszúságú kockában) ez kb. $3,11 \cdot 10^6$ molekulát jelent: ennyi az $\langle n \rangle$ várható érték ebben az esetben. Leszűrhetjük tehát, hogy ennek szórásából $\delta n = 1/\sqrt{\langle n \rangle} = 0,057\%$ relatív fluktuáció adódik. Ekkora térfogatban tehát átlagosan 0,057 százalékot ingadozik a molekulák száma. A térfogat köbös méretfüggése és a relatív szórás inverz gyökös kifejezése összességében $-3/2$ -es kitevőjű méretfüggést eredményez, tehát egy negyedakkora élhosszúságú kockában nyolcszor akkora, egy századakkorában ezerszer akkora lesz a relatív szórás.

Érdeemes tudni, hogy reális gázokban módosítja a képet a molekulák közötti kölcsönhatás, illetve azok véges térfogata. (Ha a térfogatra mint kizárásra gondolunk, akkor tulajdonképpen ez is egyfajta – rövid távon nagyon erősen taszító – kölcsönhatásból származtatható.) Ezek érdekes jelenségeket okoznak, például a kritikus pont körül megnövekvő fluktuációkat; ezeket most nem tárgyaljuk.

Gyakorlófeladat

Egy köbcentiméter levegőben $2,5 \cdot 10^{19}$ molekula van. Mennyi az ilyen köbcentiméteres kockákban lévő levegő sűrűségének átlagos relatív szórása (százalékban kifejezve)? És mekkora az átlagos relatív szórás egy 100 nm élhosszúságú kockában?

2.4. Fényszóródás

Az **ég kék színe**, illetve a **lemenő Nap vörös színe** úgy magyarázható, hogy a (fehér) **napfény** a légkörön áthaladva **szóródik**, méghozzá a (rövidebb hullámhosszú) **kék fény jobban**, mint a (nagyobb hullámhosszú) vörös fény: az ég színét a szórt fény adja, a Nap vörös(esebb) színét pedig a (kék kiszóródása utáni) maradék. Ennek első mikroszkopikus tárgyalása Rayleigh nevéhez fűződik.

Tekintsük most át ezt a gondolatmenetet! Az elektrodinamikában (a Maxwell-egyenleteket megoldva) kiderül, hogy milyen \mathbf{E} elektromos, illetve \mathbf{B} mágneses teret kelt egy adott $\mathbf{r}_0(\mathbf{t})$ módon mozgó q töltés. Ennek a mostani célhoz legmegfelelőbb felírása talán az alábbi (Feynman-féle) képlet: egy adott \mathbf{r} megfigyelési pontban

$$\mathbf{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\mathbf{n}}{R^2} + \frac{R}{c} \frac{d}{dt} \frac{\mathbf{n}}{R^2} + \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{n} \right), \quad \text{és} \quad \mathbf{B} = \frac{1}{c} \mathbf{n} \times \mathbf{E},$$

ahol $\mathbf{R}(t) = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t)$, $R = |\mathbf{R}|$, $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$, és figyelembe kell venni, hogy az elektromágneses jelek c (fény)sebességgel terjednek: egy adott t időpillanatbeli \mathbf{E} -t és \mathbf{B} -t keresvén

nem az egyidejű $\mathbf{r}_0(t)$ -t, hanem azon korábbi t' időpontbelit kell venni, amikortól a jel (R távolságot befutva) c sebességgel éppen t -kor ér az \mathbf{r} pontba. Az \mathbf{E} első tagja a Coulomb-törvény, de a képlet tartalmazza a mozgó töltések tereinek részleteit; a harmadik tagon keresztül a *sugárzást* is: a gyorsuló töltés olyan teret is kelt, ami $1/R^2$ -nél lassabban, $\sim 1/R$ szerint csökken. Ez a képletből úgy látható, hogy adott töltésmozgás esetén kétszer olyan messze menve az \mathbf{n} vektor relatíve fele olyan gyorsan változik.

Tehát a töltéstől messze (azaz: csak a sugárzási teret tekintve), az ún. dipólsugárzás közelítését alkalmazva (az elnevezés magyarázatát lásd alább) azt írhatjuk, hogy

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0 q}{4\pi} \ddot{\mathbf{n}} \Big|_{t'=t-R/c}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \mathbf{n} \Big|_{t'=t-R/c} \times \mathbf{E} = \frac{\mu_0 q}{4\pi c} (\mathbf{n} \times \ddot{\mathbf{n}}) \Big|_{t'=t-R/c},$$

ahol a $\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$ vákuumpermeabilitást használtuk, és a véges c sebességű jelterjedést elég úgy figyelembe venni, hogy a töltés helyét (és így az \mathbf{n} vektort és annak időderiváltjait is) egységesen R/c idővel korábban tekintjük.⁸

Ha $|\mathbf{r}_0(t)| \ll r$ (azaz a töltés mozgása a kijelölt origó környékére korlátozódik), akkor (bevezetve a töltésünk $\mathbf{p} = q\mathbf{r}_0$ dipólmomentumát, és végül R -et r -re átjelölve)

$$\mathbf{E} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\ddot{\mathbf{p}} - (\mathbf{n}\ddot{\mathbf{p}})\mathbf{n}}{r}, \quad \mathbf{B} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{n} \times \dot{\mathbf{p}}}{r}$$

adódik (itt tehát \mathbf{n} már egyszerűen \mathbf{r}/r , ahol \mathbf{r} a helyvektor). Ez így igaz marad akkor is, ha a \mathbf{p} dipólmomentumot több különböző töltés mozgása okozza.

Még konkrétan: ha a dipólmomentum egy adott irányban (ehhez rögzítjük a z tengelyt) harmonikus rezgést végez p_0 amplitúdóval és ω (kör)frekvenciával, azaz

$$\mathbf{p}(t) = p_0 \sin(\omega t) \mathbf{e}_z,$$

akkor az elektromos és mágneses télerősségek a következő alakúak:

$$\mathbf{E} = \frac{\mu_0 p_0 \omega^2}{4\pi} \sin\left(\omega\left(t - \frac{r}{c}\right)\right) \frac{\sin\theta}{r} \mathbf{e}_\theta, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 p_0 \omega^2}{4\pi c} \sin\left(\omega\left(t - \frac{r}{c}\right)\right) \frac{\sin\theta}{r} \mathbf{e}_\phi, \quad (2.28)$$

ahol most θ a z tengelyünkhöz rögzített gömbi koordináta-rendszer polárszöge, $\mathbf{e}_{\theta,\phi}$ pedig ezen gömbi koordináta-rendszer bázisvektorai. Ami kell a továbbiakhoz, az a sugárzás által idő- és felületegységenként elvitt energia (Poynting-vektor) átlagos értéke, amely \mathbf{E} és \mathbf{B} keresztszorzatából adódik. Az időátlag miatt az időfüggő \sin^2 faktorból $1/2$ lesz, és $\mathbf{e}_\theta \times \mathbf{e}_\phi = \mathbf{e}_r$, és mivel $\mu_0/c = 1/(\epsilon_0 c^2)$, így az eredmény végül:

$$\langle \mathbf{S}_{\text{ki}} \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{\mu_0} \right\rangle = \frac{\omega^4 p_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2\theta}{r^2} \mathbf{e}_r. \quad (2.29)$$

Mivel a **kisugárzott teljesítményre** a Poynting-vektor definíciójából $dP_{\text{ki}} = |\langle \mathbf{S}_{\text{ki}} \rangle| r^2 d\Omega$, adódik, így a térszögegségre vett teljesítmény, illetve annak térszögre vett integrálja

⁸ Ezt a közelítést a dipólsugárzás-közelítés (rögtön látjuk, hogy így a töltés által keltett dipólmomentum számít). Azt hanyagoljuk el, hogy a töltés gyors mozgása esetén az út befutásához szükséges idő függ attól, hogy a töltés éppen közel vagy távol volt; az $\ddot{\mathbf{n}}$ második időderiváltba pedig ez bonyolult módon beleszólna. A közelítés akkor megengedhető tehát, ha a töltés c -hez képest lassan mozog.

(ami a teljes kisugárzott teljesítmény) a következő alakban adódik:

$$\frac{dP_{\text{ki}}}{d\Omega} = \frac{\omega^4 p_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \sin^2 \theta \quad \Rightarrow \quad P_{\text{ki}} = \int d\Omega \frac{dP_{\text{ki}}}{d\Omega} = \frac{\omega^4 p_0^2}{12\pi \epsilon_0 c^3}, \quad (2.30)$$

ahol a térszögintegrálban $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ -t kell írni, és kihasználni, hogy

$$\int_0^\pi \sin^3(\theta) d\theta = \frac{4}{3}. \quad (2.31)$$

Tekintsünk most egy atomra (vagy molekulára) beeső ω (kör)frekvenciájú fényt: ennek elektromos tere az atom helyén $E_0 \sin(\omega t)$, a mágneses tere pedig $B_0 \sin(\omega t)$ nagyságú, ahol $B_0 = E_0/c$, és a térerősségek egymásra (és a terjedési irányra) merőlegesek. Ezek miatt az atomra beeső energiaáram (a Poynting-vektor időátlagja) így írható le:

$$|\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}| = c\epsilon_0 E_0^2/2. \quad (2.32)$$

A beeső fény elektromos tere oszcillációra kényszeríti az atomi töltéseket, így az atomnak is ω frekvenciával váltakozó (és térerősség-irányú) p dipólusa lesz. (Az alábbiakban a z -tengelyt fektetjük az elektromos tér irányába.) Bevezetjük az atom polarizálhatóságát: az $\alpha(\omega)$ jelölés hangsúlyozza, hogy ez függ(het) ω -tól, de néha csak α -t írunk. Ezzel:

$$E(t) = E_0 \sin(\omega t) \quad \Rightarrow \quad p(t) = p_0 \sin(\omega t), \quad \text{ahol} \quad p_0 = \alpha(\omega)E_0.$$

Összetéve az eddigieket arra jutunk, hogy a polarizálható atom (vagy molekula) által (egy térszögelembe, illetve az összes, egész térszögbe) kisugárzott teljesítmény a bejövő energiaáram-sűrűséggel arányos (mert mindkettő E_0^2 -tel arányos):

$$\frac{dP_{\text{ki}}}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot |\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}|, \quad P_{\text{ki}} = \sigma \cdot |\langle \mathbf{S} \rangle_{\text{be}}|,$$

ahol az arányossági tényezők a (fény)szórási differenciális hatáskeresztmetszet, illetve teljes hatáskeresztmetszet, melyekre tehát a következő kifejezéseket kaptuk:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega^4 \alpha^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c^4}, \quad \sigma = \frac{\omega^4 \alpha^2}{6\pi \epsilon_0 c^4}.$$

A továbbiakhoz modelleznünk kell egy atom (vagy molekula) polarizálhatóságát. Tekintsünk egyelőre egy darab $-e$ töltésű elektront: ennek az atomban való kötöttségének legcélszerűbb modellje az, ha egy rugóval kötött, harmonikus rezgőmozgást végző testnek képzeljük. Ilyenkor a D rugóállandó és m_e elektrontömeg helyett érdemes az ω_0 sajátfrekvenciát használni: $\omega_0^2 = D/m$; a mozgásegyenlet pedig⁹

$$m_e \ddot{z}(t) = -m_e \omega_0^2 z(t) - eE_0 \sin(\omega t),$$

melynek (időben állandó rezgést leíró) megoldása

$$z = z_0 \sin(\omega t), \quad \text{ahol az amplitúdó} \quad z_0 = \frac{-e}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2)} E_0,$$

⁹ Itt a z tengely nem a beeső sugárzás iránya. A fenti képletekben szereplő θ szög sem a szórási szög volt, hanem lényegében az itteni z tengelyhez képest vett polárszög.

vagyis a keltett időfüggő dipólus $p(t) = -e \cdot z(t) = p_0 \sin(\omega t)$, a p_0 dipólusnagyság pedig tényleg E_0 -lal arányos, így a polarizálhatóságra azt kapjuk, hogy

$$p_0 = \alpha E_0, \quad \text{ahol} \quad \alpha = \frac{e^2}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (2.33)$$

Ebből (egy új jelölést bevezetve) a következő eredmény adódik a hatáskeresztmetszetre:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \left(\frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \right)^2 \sin^2 \theta, \quad \sigma = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \left(\frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \right)^2,$$

ahol r_e az elektron jellemzőinek egy kombinációja (tehát maga is egy természeti állandó):

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \approx 2,818 \text{ fm},$$

neve: klasszikus elektronsugár.¹⁰ Két szélső esetet érdemes megvizsgálni az iménti képletben: az egyikben $\omega_0 = 0$; ez az ún. **Thomson-féle szórás hatáskeresztmetszet**:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \sin^2 \theta, \quad \Rightarrow \quad \sigma_{\text{Thomson}} = \frac{8\pi}{3} r_e^2, \quad (2.34)$$

ez tehát a frekvenciától független; σ_{Thomson} egy konstans érték. (Visszaemlékezhetünk, hogy ezzel szemben a töltött részecskék egymáson szóródásának teljes hatáskeresztmetszete [a teljes Rutherford-hatáskeresztmetszet] végtelen!) Az $\omega_0=0$ feltétel azt jelenti, hogy nem kötött (hanem: szabad) elektronról van szó, így ennek a légköri fényszórást tekintve, ahol nem igazán vannak szabad elektronok, kicsi a fizikai relevanciája (de nagy jelentősége lesz a 4.4. szakaszban vizsgált Compton-jelenség megértésében).

Másik szélső eset, amikor $\omega_0 \gg \omega$: ekkor kapjuk az ún. **Rayleigh-szórás** képletét:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4 r_e^2 \sin^2 \theta, \quad (2.35)$$

illetve a teljes hatáskeresztmetszet is ennek megfelelően

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} = \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4 \cdot \sigma_{\text{Thomson}} = \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4 \frac{8\pi r_e^2}{3}. \quad (2.36)$$

A Rayleigh-szórás sokkal gyengébb a Thomson-szórásnál, viszont erős, **negyedik hatványos** a frekvenciafüggése: emiatt van, hogy az ég kék, a Nap nappal sárga, naplemen-tekor pedig piros (hiszen a nagyfrekvenciás kék fény sokkal erősebben szóródik, mint a piros fény – amely ködben is messzire látszódik). Mint láttuk, ennek oka az volt, hogy a modellünkben a polarizálhatóság nem függött a frekvenciától (a fény frekvenciatarományában, ha, mint feltettük, $\omega_0 \gg \omega$).¹¹

¹⁰ Két pontszerű, e töltésű objektumot ilyen közel kellene tolni egymáshoz, hogy a befektetett elektrosztatikus energia már az elektron $m_e c^2$ nyugalmi energiája legyen. Olyan modellekben, ahol az elektron teljes tömegét azzal akarták magyarázni, hogy ez az elektrosztatikus terének energiájából származik, az elektronra ilyen r_e (vagy ennek néhányszorosának megfelelő) méretet kell(ett) feltenni.

¹¹ Ami az irányfüggést illeti, ne feledjük, hogy itt θ nem a szórás szög! Továbbá ahhoz, hogy megkapjuk a szórt sugárzásnak (a nappali égbolt fényességének) az irányfüggését, figyelembe kell venni, hogy eddig csakis lineárisan polarizált fénnel foglalkoztunk; ide a 4.4. szakaszban visszatérünk.

A tárgyalt fényszórási folyamatot a kvantummechanika írja majd le teljesen. Mégis végignéztük a klasszikus számolást: egyrészt Rayleigh eredeti magyarázata ténylegesen ezen nyugodott, másrészt pontosan ugyanez a (2.36) képlet adódik kvantummechanikailag is. Ott egyúttal az is kiderül, hogy mi az ω_0 jelentése: nem valamilyen „rugóra kötött elektron” sajátfrekvenciája, hanem az atom (vagy molekula) energiaszintjei közötti átmeneti energiáknak megfelelő frekvencia; sőt, ahogy gondolhatjuk, jellemzően több ilyen is lesz, különféle (a gerjeszthetőséget megadó) súlyokkal, amikkel szorozva az egyes ω_i -knek megfelelő, (2.33) egyenlet szerint adódó járulékokat hozzá kell adni az α polarizálhatósághoz. A lényeg, hogy az atom (vagy molekula) diszkrét energiaszintekkel bír, és ahogy még majd sokszor látjuk, az E_1 és E_2 energiaszintjei közötti átmenetnek megfelelő ω_0 frekvencia az, amire $\hbar\omega = \Delta E = E_2 - E_1$, ahol $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ az ún. redukált Planck-állandó, h pedig a Planck-állandó:

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}.$$

Kiderül majd (de talán ismert is már), hogy a fény fotonjainak energiája is hasonló módon függ össze az f frekvenciával: $E = hf = \hbar\omega$, továbbá $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$. Ebből kigondolható, hogy a látható fény hullámhossztartománya (vörös: $\simeq 700$ nm, ibolya: $\simeq 400$ nm) kb. 1,9, illetve 3,1 eV közötti fotonenergiáknak felel meg. A légkört alkotó molekulák jellemző energiaszint-átmenetei pedig $\simeq 100$ eV nagyságrendű energiát jelentenek: jogos tehát az $\omega_0 \gg \omega$ feltevés, amivel a tapasztalattal egyezően leírtuk a kék fény erősebb szóródását.

Kiderül azonban, hogy ez a leírás nem teljesen megnyugtató: figyelembe kell venni a légkör atomokból/molekulákból álló voltát, és a fényszórás magyarázata közben elengedhetetlenül megjelenik a molekulák nemnulla mérete, azon keresztül, hogy a véges számú atom jelenléte, mint az előző szakaszban láttuk, **sűrűségfluktuációkat** okoz. Egy olyan világban tehát, ahol az atomok/molekulák végtelen kis méretűek és töltésűek, és végtelen sokan vannak, nincs légkörbeli fényszórás: ez ugyanis az atomok határozott számsűrűségével kapcsolatos. Szépen megfogalmazva: „az égbolt kék színe az atomok létének legszembetűnőbb bizonyítéka”. Alább mindezek alapján röviden bemutatjuk a fényszórás mértékének egy lehetséges levezetését.

Ha a légkör molekuláinak ν a sűrűsége, akkor az adott fény szabad úthosszát (amiből végül kijön konkrétan a szórt fény mennyisége) $1/\nu\sigma_{\text{Rayleigh}}$ módon adhatjuk meg. Fontos, hogy az α mikroszkopikus polarizálhatóságra egy egyszerű modellt néztünk, de ez kapcsolatban van egy másik, makroszkopikusan is megfigyelhető mennyiséggel: ez az n törésmutató (figyelem, a korábbi két alfejezetben ez a részecskeszám volt, de itt megváltoztattuk a jelölést!), az összefüggés neve pedig Clausius–Mossotti-reláció:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0}.$$

σ_{Rayleigh} -ről pedig láttuk, hogy α^2 -tel arányos, így tehát a fény szabad úthossza $1/(\alpha^2\nu)$ -vel lesz arányos, a légkör n törésmutatójának kifejezése pedig a $\nu\alpha$ szorzatot tartalmazza. Ismerve tehát n -et és a Rayleigh-szórás erősségét (azaz: szabad úthosszát) meghatározhatjuk a ν számsűrűséget. Így nézve tényleg igaz, hogy az ég kék színe a levegő atomosságából következik! (Ha például az atomok kétszer ilyen kicsik volnának, akkor ahhoz, hogy a megfigyelt törésmutató annyi lehessen, amennyi, feleakkora α tartozna a levegőmolekulákhoz, de így összességében $\nu\alpha^2$ miatt feleakkora lenne a Rayleigh-szórás intenzitása, „feleannyira lenne kék az ég”.)

Érdeemes látni azt is, hogy a szabad úthosszas következtetésben úgy gondolkodtunk, hogy minden levegőmolekula önálló független szórócentrum, és szórt fények intenzitásai összeadódnak. Ez így csak akkor helytálló, ha a molekulák egymástól függetlenül, véletlenszerűen mozognak: ritka ideális gázban ez igaz, sűrűbb közegekben (és pl. szilárd anyagban vagy folyadékban) már nem: ilyenkor számít az, hogy a különböző molekulák által keltett (sugárzási) elektromos terek fázishelyesen adódnak össze (a fáziskülönbségeket nem „mossa el” a véletlenszerű mozgás): ez interferenciához vezethet, és nem biztos, hogy megengedett a különböző molekulák által szórt intenzitásokat összeadni.

Ezért egy másik megközelítést is érdemes alkalmazni a fényszórásra: ha a légkör mikroszkopikusan is *teljesen* időben állandó lenne, nem lenne fényszórás, csak egy 1-től különböző (esetleg helyről helyre változó) törésmutató. Azonban láttuk az előző szakaszban, hogy a gázokban **sűrűségfluktuációk** jelennek meg (a molekulák véges mérete miatt), és ilyen sűrűségfluktuációkon már szóródik a fény (merthogy más lett a törésmutató egy ilyen gázcélában). Az iménti Clausius–Mossotti-reláció szerint $\Delta\nu$ sűrűségváltozás Δn törésmutató-változáshoz vezet:

$$n = \sqrt{\frac{3\epsilon_0^2 + 2\alpha\nu}{3\epsilon_0^2 - \alpha\nu}} \quad \Rightarrow \quad \Delta n = \frac{9\alpha\epsilon_0}{2n(\alpha\nu - 3\epsilon_0)^2} \Delta\nu, \quad (2.37)$$

amit így is írhatunk:

$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{(n^2 + 2)(n^2 - 1)}{6n^2} \frac{\Delta\nu}{\nu} = \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} + \frac{1}{2}\right)^{-1} \left(\frac{\nu\alpha}{3\epsilon_0} - 1\right)^{-1} \frac{\alpha\Delta\nu}{\epsilon_0}. \quad (2.38)$$

Ahhoz hasonlóan, ahogy egy darab dipólus sugárzását tárgyaltuk, kiderül (de itt nem részletezzük), hogy ha a fény a hullámhosszánál lényegesen kisebb, d átmérőjű gömb alakú levegőcellán szóródik, amelynek sűrűsége $\Delta\nu$ -vel eltér a környezetének sűrűségétől, akkor a szóródás hatáskeresztmetszete

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} = \frac{2\pi^5}{3} \frac{d^6}{\lambda^4} \left(\frac{\Delta\nu\alpha}{3\epsilon_0}\right)^2. \quad (2.39)$$

Ismét látjuk, hogy (frekvenciafüggetlen α esetén) kis λ értékekre nagy szórást kapunk: a kék fény erősen szóródik, a vörös pedig lényegesen kevésbé. (Érdeemes megemlíteni, hogy a Rayleigh-szórás általánosságban az elektromágneses sugárzás aktuális hullámhosszánál lényegesen kisebb részecskéken való szórását jelenti. A polarizálható [avagy törésmutatóval rendelkező] gömbön és dipólusokon történő szórás eseteiben is az a lényeg, hogy a teljes hatáskeresztmetszet a hullámhossz negyedik hatványával fordítottan arányos.) Megvizsgálva az iménti képletet, figyelembe véve, hogy az előző szakaszban a fluktuációkra azt találtuk, hogy $\Delta\nu = \sqrt{\nu/V}$, ahol a V (gömb)térfogat most $d^3\pi/6$, ebből a képletből is ugyanarra jutunk a Rayleigh-szórás szabad úthosszára, mint az előző fajta tárgyalásból (amikor függetlenül véletlenszerűen mozgó molekulákat tekintettünk). Ez alapján azt is mondhatjuk, hogy a számsűrűség ingadozása hozza létre a fényszórást: így nézve is a légkör atomosságából következik az ég kék színe.

Gyakorlófeladat

A Napból jövő fény szóródjon 50 eV kötési energiájú (azaz ennek megfelelő sajátfrekvenciájú) molekulákon. Ha $3 \cdot 10^{25}$ db/m³ a számsűrűség, és 10 km-es a levegőréteg, akkor a 300 nm-es, illetve a 600 nm-es fény hányadrésze szóródik ki? Ehhez érdemes figyelembe venni, hogy $hc \approx 1240$ eV·nm (azaz 1240-et a hullámhossz nanométerben vett értékével osztva az energiát kapjuk elektronvoltban), illetve hogy ω/ω_0 aránya az energiáknak felel meg.

2.5. Energiaeloszlások gázokban

Ahogy korábban említettük, a hőtán atomi elveken való magyarázata igen fontos bizonyítéka volt az atomelméletnek. Tulajdonképpen a Maxwell–Boltzmann-eloszlás ezen gondolatmenet „csúcsa”, úgyhogy vizsgáljuk meg ezt, legelőször is induljunk ki a makro- és mikroállapotok fogalmából. Egy makroszkopikus anyag makroállapotának a megfigyelhető tulajdonságait nevezzük, míg mikroállapotait a benne lévő részecskék konkrét elhelyezkedése adja meg. Egyszerű példát szolgáltat erre a pénzfeldobás: négy érmét feldobunk, 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

$$W_k(N_1, N_2, \dots, N_k) = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_k!}. \quad (2.40)$$

hiszen az $N!$ -féle sorrenden belül az i . állapotban lévő N_i számú részecske sorrendje érdektelen, így $N_i!$ -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 inntől 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-szor 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 melletti maximumát keressük tehát. Induljunk ki az

$$N! \approx N^N e^{-N} \sqrt{2\pi N} \quad (2.41)$$

Stirling-formulából. Ha N igen nagy, akkor ebből

$$\ln N! \approx N \ln N - N \quad (2.42)$$

adódik – itt már azt is figyelembe vettük, hogy az utolsó, $\ln N$ nagyságrendű tag elhanyagolható korrekciót okoz a legalább N nagyságrendű további tagokhoz képest. Ezzel átalakíthatjuk W -t:

$$\ln W = \ln N! + \ln \left[\prod_i \frac{1}{N_i!} \right] \approx N \ln N - N + \sum_i (N_i - N_i \ln N_i) \quad (2.43)$$

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, amelynek lényege az, hogy egy adott $f(x, y)$ extrémumát keressük $g(x, y) = 0$ feltétel mellett. Ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy egy $f(x, y)$ szintfelület extrémumát keressük, adott $g(x, y) = 0$ görbe mentén mozogva. Az extrémumban a felületre vetített görbe merőleges $f(x, y)$ gradiensére, másképpen mondva párhuzamos az $f(x, y)$ adott pontban húzott szintvonalával. Ebből $\nabla f = \lambda \nabla g$ adódik, tehát $\nabla(f - \lambda g) = 0$. Ezzel a módszerrel esetünkben $\ln W$ helyett a Lagrange-tényezőkkel csökkentett kifejezés gradiensét kell majd vizsgálnunk. Így tehát az

$$\mathcal{L}(N_1, N_2, \dots, N_n) = \ln(W) + \alpha(N - \sum N_i) + \beta(E - \sum N_i E_i), \text{ azaz} \quad (2.44)$$

$$\mathcal{L}(N_1, N_2, \dots, N_n) = \text{const}(N, E) + \sum_i (-N_i \ln N_i + (1 - \alpha)N_i - \beta N_i E_i) \quad (2.45)$$

függvény összes parciális deriváltját tesszük egyenlővé nullával, ahol E_i az adott állapothoz tartozó energia. Ezt az egyes N_i -k szerint deriválva a

$$-\ln N_i - \alpha - E_i \beta = 0 \quad (2.46)$$

egyenletre jutunk, ahonnan

$$N_i = e^{-\alpha - \beta E_i}. \quad (2.47)$$

Ez azt jelenti, hogy a legvalószínűbb eloszlás esetén a fenti kifejezésben felírt N_i lesz az i . állapot (azaz az E_i energiaszint) multiplicitása. Az α értéke egyfajta normálást ad, és megkapható a $\sum_i N_i = N$ egyenletből:

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \quad (2.48)$$

azaz

$$N_i = N \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}. \quad (2.49)$$

A termodinamika alapjainak ismeretében ugyanakkor közvetlenül meghatározhatjuk β értékét is, ugyanis a fentiekből levezethető, hogy ehhez az átlagos energiát kell tudnunk, amihez pedig az E_i energiaszintek ismeretére van szükség. Vegyük figyelembe, hogy az m tömegű részecskék mozgási energiája adja az E_i értékeket, és így valójában

$$E_i = \frac{1}{2} m v_i^2. \quad (2.50)$$

Ugyanakkor a sebesség bármilyen értéke lehetséges, ezért át kell térnünk megszámlálhatatlanul sok állapotra, azaz az i . mikroállapot helyett az adott \vec{v} sebességhez tartozó állapotról beszélünk, amely körül egy infinitesimalis $d^3 \vec{v}$ állapottérbeli térfogatban $N(\vec{v}) d^3 \vec{v}$ részecske van. Ez azt is jelenti, hogy $N(\vec{v})$ egyfajta állapotsűrűséget jelöl az N_i betöltöttségi szám helyett, amely $d^3 n / d^3 \vec{v} \equiv N(\vec{v})$ módon is írható, ahol $d^3 \vec{v} \equiv dv_x dv_y dv_z$. Ezzel

$$\sum_i N_i = N \text{ helyett } \int N(\vec{v}) d^3 \vec{v} = \int e^{-\alpha - \beta m v^2 / 2} 4\pi v^2 dv = N \quad (2.51)$$

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

$$\frac{d^3n}{d^3v} \equiv N(\vec{v}) = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-\beta\frac{mv^2}{2}\right). \quad (2.52)$$

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

$$\left\langle\frac{mv^2}{2}\right\rangle = \int \frac{mv^2}{2} N(v) 4\pi v^2 dv = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \int \frac{mv^2}{2} \exp\left(-\beta\frac{mv^2}{2}\right) v^2 dv = \frac{3}{2\beta}. \quad (2.53)$$

Az egy részecskére jutó mozgási energia az ekvipartíció tétele miatt éppen $3kT/2$ (három dimenzióban), innen pedig meghatározható, hogy

$$\beta = \frac{1}{kT}. \quad (2.54)$$

A T hőmérsékletű gázban megvalósuló **Maxwell–Boltzmann-féle sebességeloszlás** tehát

$$\frac{d^3n}{d^3v} = N\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right). \quad (2.55)$$

A sebesség nagyságának eloszlása pedig (a térszögre vett integrálás után)

$$\frac{dn}{dv} = N\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4\pi v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right). \quad (2.56)$$

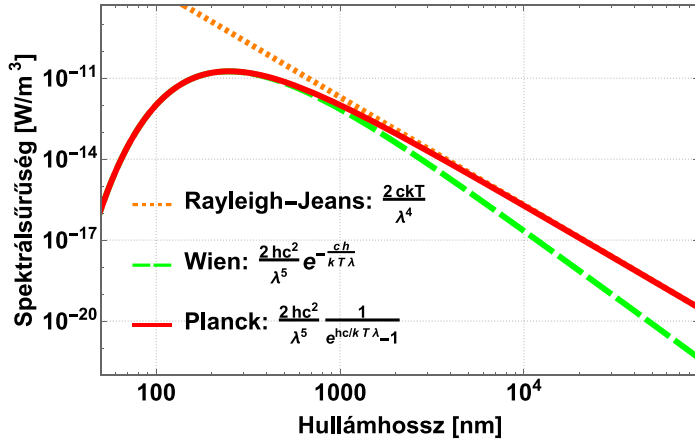
Ezzel az átlagos sebesség értéke $\sqrt{8kT/(m\pi)}$, és ahogy vártuk, a négyzetes sebesség-átlag pedig $\sqrt{3kT/m}$. Tipikus várható sebességek 0°C hőmérsékletű gázra: 1693 m/s (hidrogén), 567 m/s (víz), 536 m/s (neon), 454 m/s (nitrogéngáz), 425 m/s (oxigén), 362 m/s (szén-dioxid), 170 m/s (higany).

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/s (hidrogén), 0,0454 mm és 21,2 millió/s (levegő), 0,0395 mm és 26,6 millió/s (szén-dioxid). Nagy vákuumban (mikrobár értékek mellett) ez néhány méteresre is nőhet.

Fontos megemlíteni, hogy a fenti levezetés megkülönböztethető, egyesével beazonosítható részecskékre vonatkozott. Később kiderül, a kvantumvilágban ez nem érvényes, ugyanis a kvantumfizikai részecskék felcserélhetőek, megkülönböztethetetlenek. Ekkor az energiaeloszlás szempontjából bizonyos mikroállapotok azonosak lesznek, ezért kicsit máshogy kell számolni, ahogy arra később visszatérünk.

2.6. Feketetest-sugárzás

A feketetest-sugárzást (az anyag hőmozgásával termikus egyensúlyba került elektromágneses sugárzás kibocsátását, mely tulajdonképpen a hősugárzást kibocsátó testekből



7. ábra. A Rayleigh–Jeans-formula, a Wien-közelítés és a Planck-törvény összehasonlítása, $kT = 1$ eV hőmérséklet esetén

kilép) megfelelően leíró elmélet lényeges adalék volt a kvantummechanika születéséhez. Ezt részletesen tárgyaljuk a későbbi 4.6. szakaszban.

Addig is érdemes összefoglalni a megfigyeléseket. A 7. ábrán látható a feketetest-sugárzás (hőmérsékleti sugárzás) hullámhossz szerinti spektruma és az ennek leírására tett próbálkozások. Wien 1896-ban a kis hullámhosszak esetén vett spektrális sűrűségére (a felületre és térszögére jutó merőleges sugárzási teljesítmény hullámhossz- vagy frekvenciaegységenként) a λ hullámhossz függvényében a

$$\frac{2hc^2}{\lambda^5} e^{-\frac{hc}{\lambda kT}} \quad (2.57)$$

összefüggést vezetett le. Rayleigh 1900-ban nagy hullámhosszú spektrális sűrűségére a

$$\frac{2ckT}{\lambda^4} \quad (2.58)$$

értéket vezetett le, a levezetést 1905-ben Jeansszel együtt pontosították. Wien eredménye a mérések szerint nagy frekvencián téves, a Rayleigh–Jeans-törvény pedig a teljes spektrumra (a hullámhosszra) integrálva végtelent ad (ez az ún. „ultraibolya katasztrófa”: minél több nagyfrekvenciájú szabadsági fokot veszünk figyelembe, annál nagyobb a teljes kisugárzott teljesítmény, és végül végtelenhez tart). Hogy újabb, helyesebb eredményt kapjon, Planck ezekből empirikusan a

$$\frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \quad (2.59)$$

összefüggést adta meg. Magyarozatként a Boltzmann-eloszláshoz hasonló módszert választva feltette, hogy az összes energia

$$\frac{hc}{\lambda} = hf \quad (2.60)$$

egységekben helyezhető el egy rezonátor módusain, ahol f az adott módushoz tartozó frekvencia, h pedig a Planck által e célra bevezetett (és később a kvantummechanikában minduntalan előkerülő) kvantumállandó (vagy Planck-állandó): $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Js.

Ezen energiaadagokat később (1905-ben) Einstein fotonokként azonosította be. A részletes magyarázatokat néhány fejezettel később tárgyaljuk, itt is megemlítendő 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 és az első kvantált atommodellek

3.1. Gázok abszorpciós és emissziós vonalai

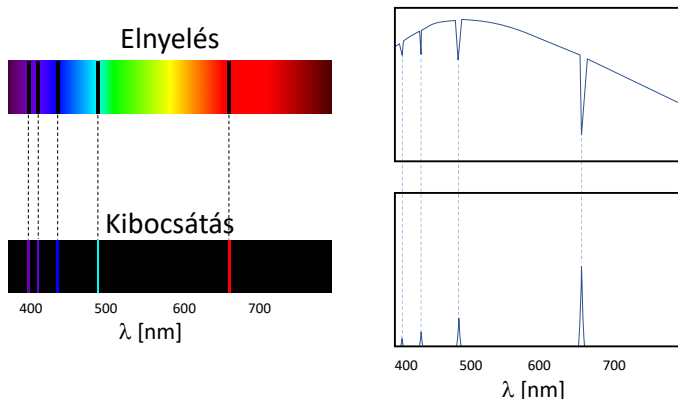
Gázok és gőzök elektromágneses válaszra készítését vizsgálták az **elnyelési spektrum** (amelyet úgy kapunk meg, hogy a bejövő E-M sugárzásból „eltűnt” komponenseket vesszük) és a **kibocsátási spektrum** (amelyet a gerjesztett anyag, például forró gáz bocsát ki) mérésével. Ezek tanulmányozása alapján kiderült, hogy a spektrumok szerkezete fix, az atomokra jellemző. Elsőként Fraunhofer vizsgálta 1814-ben a Nap sugárzásában megjelenő „vonalakat”: 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 abszorpciós vonalak** ugyanott jelennek meg (lásd 8. ábra).

Ma óriási adatbázisok állnak rendelkezésre, például a NIST (National Institute and Technology) oldalán is szabadon elérhetően. Ezek rengeteg információt tartalmaznak, például a 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. A szilárd testek gerjesztései még bonyolultabbak. Az egyatomos gázokra összességében tehát a következő megfigyeléseket tehetjük:

- A vonalak helye az abszorpciós és az emissziós színekben is **ugyanott van, az atomra jellemző**. Ez erős támasza annak, hogy az abszorpciós spektrumokat saját frekvenciával rendelkező csillapított dipólusok kényszerrezgéseként, az emissziós spektrumokat pedig elektromos dipólusok szabad rezgéseként írjuk le. (A vonalak helyét a Doppler-hatás azért módosíthatja.)
- Nagyon sok vonal található bennük, melyek intervalluma növekvő frekvenciával csökken, illetve **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, **folytonos spektrumot** látunk. Ezen energiaszint felett bármekkora energiát felvehetnek az elektronok, hiszen az atom ionizálódik.

A vonalak felfedezésekor az úgynevezett **spektrumtermeket** 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 $\tau, \bar{\tau}$ értékek szokásos egysége a kayser, avagy cm^{-1} , és ez tulajdonképpen a hullámhossz inverze. Például a La^{++} ion emissziós spektrumának vonalai (cm^{-1} egységben) felírhatóak 4+4 term segítségével (a term magyarul tag, de itt az eredeti „term” szakkifejezést használta a szaknyelv):

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



8. ábra. A hidrogénatom adszorpciós és emissziós spektruma

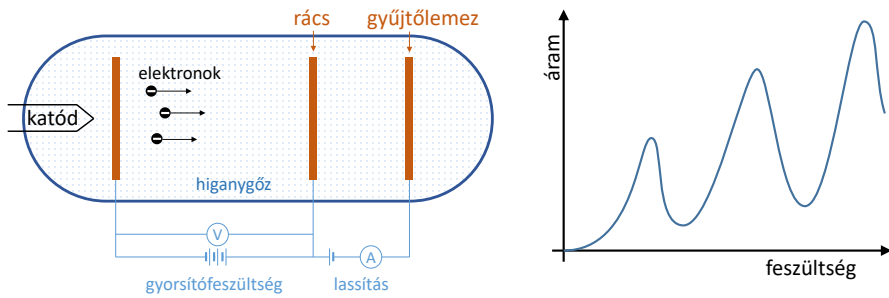
A tapasztalatokat számos ehhez hasonló mátrixszal összegezték. A gyakorlatban azonban nem minden termkülönbséget lehetett megfigyelni – ezt ma azzal magyarázzuk, hogy az elektromos dipólátmenet valószínűsége lényegesen nagyobb, mint a kvadrupólé vagy akár a mágneses átmeneteké (amelyeket az átmenet részletes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

A **hidrogén spektrumának** elemzése során sokféle vonalsorozatra derült fény: 1884-ben Balmer átható tartománybeli vonalakat talált, 1904-ben Lyman UV-vonalakat, később Paschen és Bach, illetve Brackett és Pfund is továbbiakat. Ezek vizsgálatában fontos lépés volt a Rydberg–Ritz-féle kombinációs szabály (1908), amely kimondta, hogy bármely vonal frekvenciája más vonalak összege vagy különbsége alapján adódik. Többek között ennek segítségével kiderült, hogy a τ és $\bar{\tau}$ termek ugyanazok, továbbá sorozatba rendeződnek: $\tau_n = 110\,000 \text{ cm}^{-1} \frac{1}{n^2}$, és ezekből össze lehet rakni az összes vonalat. A Balmer-sorozat $f_{n,2} = \tau_n - \tau_2$ módon adódik, a Lyman-sorozat $f_{n,1} = \tau_n - \tau_1$ módon, illetve a Paschen–Bach- ($n, 3$), Brackett- ($n, 4$) és Pfund- ($n, 5$) sorozatok is összerakhatóak. Ezeket tehát $\frac{1}{n^2}$ és $\frac{1}{m^2}$ erősségű termek különbségeiként adhatóak meg (a Rydberg–Ritz-féle szabály értelmében), hiszen $(\tau_n - \tau_m) = (\tau_n - \tau_k) - (\tau_m - \tau_k)$. A $110\,000 \text{ cm}^{-1}$ konstans c -vel szorozva $3,3 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$, ezt a $h = 1240 \text{ eV} \cdot \mu\text{m}/c = 1 \text{ eV}/241,8 \text{ THz}$ Planck-állandóval szorozva $13,6 \text{ eV}$ energia adódik.

3.2. Az atomok energiaszintjei

Az atomok energiaszintjeit (amelyet a fix kilépési munkák is indikálnak) elektronok és atomok ütköztetésével vizsgálhatjuk. Erre szolgál a **Franck–Hertz-kísérlet**, amelyet James Franck és Gustav Hertz (a „hertz” egységről is ismert Heinrich Hertz nagybátyja) végeztek el, és 1925-ben Nobel-díjat kaptak érte. Ebben vákuumcsőben három elektródát helyeztek el: egy elektronkibocsátó katódot, egy gyorsítófeszültséget létrehozó hálót és egy előbbihez képest enyhén pozitív anódot, lásd 9. ábra. A létrejött tér tehát a rácson enyhe minimummal rendelkezik, ezután megint nő. Így a rácsot elhagyó elektronok számára egy minimális elérendő energiagát jön létre.

A kísérletben az anódáramot mérték a gyorsítófeszültség függvényében. Azt találták, hogy kis feszültségek esetén az áram erősen nő a feszültséggel, majd egy bizonyos



9. ábra. A Frank–Hertz-kísérlet. Balra a kísérleti elrendezés, jobbra pedig a mért áram a gyorsítófeszültség függvényében

értéknél (4,9 V higanygőznél, 19 V neonnál, 3,8 V Cs esetén) az áram erősen visszaesik. Ezután megint növekedés látható, de az eredeti érték többszöröseinél mindig visszaesés tapasztalható, lásd 9. 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 megmarad). A feszültség növelésével nő az anódot elérni képes elektronok száma. Az adott U feszültségen áthaladás 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 enyhén negatív teret. Ahogy megint növeljük a feszültséget, az elektronok már *két* rugalmatlan ütközést is szenvedhetnek, és így tovább. A gerjesztési energiák az atomokra jellemzőek, és hogy melyik konkrét energiaszint jelenik meg, abban a hatáskeresztmetszeteknek van fontos szerepük.

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 egy kisebb energiájú állapotba (az eredeti, 18,7 eV körüli gerjesztési energiájából 16,6 eV körüli energiára, amely tehát 2 eV energiakülönbségnek és így körülbelül 600 nm-nek felel meg). A Hg energiájának 254 nm hullámhosszú fény felel meg, így az nem látható.

A kísérlet bonyolult, mert jól definiált energiájú, intenzív, kollimált nyalábra, azaz egyfajta elektronágyúra van hozzá szükség. Emellett igen alacsony nyomású gázra van szükség, 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. Az **alapállapot** felett **gerjesztett állapotok** vannak, amelyek egyre sűrűbben helyezkednek el. Az atomokat adott energia felett **ionizálni** lehet, ekkor a spektrum folytonossá válik.

Fotoeffektussal (ennek leírását lásd a 4.2. 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 és 25 eV között van (lásd 10. 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 külső elektronok sokkal kevésbé kötöttek. Ennek kiszámítása a kvantummechanika nyelvén lehetséges, de ott is csak numerikusan és/vagy különféle közelítéseket (például perturbációszámítást) alkalmazva.

A Rutherford-modellen tehát túl kell lépni, hiszen abban tetszőleges energiájú pályák megengedettek; illetve abban egy másik megoldatlan probléma is felmerül: a körpályán mozgó és ezért gyorsuló töltések miért nem sugároznak? Ezekre a problémákra kísérlet meg választ adni a Bohr-modell.

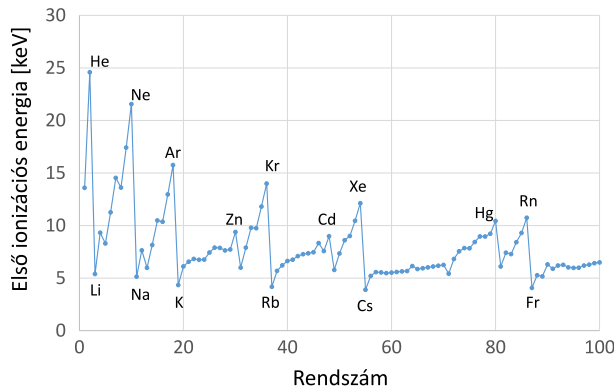
3.3. A Bohr-modell

Bohr az előző szakasz végén olvasható kérdésekre konzisztens választ adó modellt épített fel. A modell két feltevése („posztulátuma”):

- az elektronok perdülete csak $L = nh/2\pi = n\hbar$ lehet,
- az ilyen pályákon nincsen gyorsulásból fakadó sugárzás.

Minden pálya adott energiaszintnek felel meg, és a fény elnyelése és kibocsátása ezen pályák közötti átmenetnek felel meg. Mindjárt látni fogjuk, hogy ez az egyszerű feltevés jó eredményre vezet. Megemlítjük még, hogy az első posztulátumot a de Broglie-féle $\lambda = h/p$ feltevéssel és a perdület $L = mvr = pr$ kifejezésével úgy is meg lehet fogalmazni, hogy a $2r\pi$ kerületű pályákra éppen egész számú hullám fér rá, azaz $n\lambda = 2r\pi$, hiszen ekkor az $L = n\hbar$ egyenletet kapjuk vissza. Ez a megfogalmazás úgy is értelmezhető, hogy a pályákon kvázi **állóhullámok** jelennek meg, és kizárólag ezen pályák nem sugároznak.

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 egyenlő-



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

ségéből:

$$k \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} = \frac{p^2}{mr} \quad \Rightarrow \quad L^2 = p^2 r^2 = kZe^2 mr. \quad (3.1)$$

Mivel a Bohr-modell feltevése alapján $L^2 = n^2 \hbar^2$, ezért innen kiszámítható az adott n -hez tartozó pálya sugara:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{kZe^2 m} = \frac{n^2}{Z} r_{\text{Bohr}}, \quad (3.2)$$

ahol bevezettük az

$$r_{\text{Bohr}} = \frac{\hbar^2}{ke^2 m} = \frac{\hbar}{\alpha mc} \approx 52918 \text{ fm} \approx 52,92 \text{ pm} \approx 0,53 \text{ \AA} \quad (3.3)$$

Bohr-sugarat és az

$$\alpha \equiv \frac{ke^2}{\hbar c} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137,036} \quad (3.4)$$

ún. a finomszerkezeti állandót. Az ezen pályákhoz tartozó impulzus és sebesség is felírható (előbbi az $L = pr$ összefüggésből, utóbbi pedig $p = mv$ alapján):

$$p_n = \frac{n\hbar}{r_n} = \frac{\hbar Z}{nr_{\text{Bohr}}} = \frac{kZe^2 m}{n\hbar} = \frac{\alpha mc Z}{n}, \quad (3.5)$$

$$v_n = \frac{p_n}{n} = \frac{\hbar Z}{nr_{\text{Bohr}} m} = \frac{kZe^2}{n\hbar} = \frac{\alpha c Z}{n}, \quad (3.6)$$

ahonnan az is látszik, hogy a „Bohr-impulzus” (azaz az alapállapotú hidrogénatom elektronjának impulzusa) αmc , az ehhez tartozó „Bohr-sebesség” pedig αc . Mivel az adott elektron pályájához tartozó potenciális energia $-kZe^2/r$, a mozgási energia pedig $mv^2/2$, ezért az energiaszintek a kettő összegéből

$$E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{kZe^2}{r} = \frac{mk^2 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} - \frac{mk^2 Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} \quad (3.7)$$

$$= -\frac{Z^2}{n^2} \frac{\hbar^2}{2mr_{\text{Bohr}}^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{\alpha^2 mc^2}{2} = -\frac{Z^2}{n^2} E_0, \quad (3.8)$$

ahol

$$E_0 = \frac{\alpha^2 mc^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2mr_{\text{Bohr}}^2} \approx 13,6 \text{ eV} \quad (3.9)$$

a Bohr-modellben a hidrogénatomhoz ($Z = 1$) tartozó alapállapotú energia. Az **átmeneti energiaszintek** $n^{-2} - m^{-2}$ rendszere ezzel kiválóan magyarázható, és a konkrét értékek is stimmelnek, ha az elektron tömege helyett a $\mu_e = (m_e m_p)/(m_e + m_p)$ redukált tömeget írjuk be (ez persze csak ezrelékes korrekció). Az első ionizációs energia így hidrogén esetén E_0 , míg $Z > 1$ rendszámú, egyetlen elektront tartalmazó atom (ion) esetén pedig $E_0 Z^2$.

Probléma ugyanakkor, hogy **többelektronos rendszerekben**, ahol $Z \neq 1$, a modell nem igazán működik. Erre léteznek bizonyos javítások, pl. **Moseley** felfedezte, hogy

az atomok elektronokkal való bombázása esetén észlelt legerősebb röntgenvonal (a K- α 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.

További probléma, hogy a Bohr-modell **ellipszispályákat** nem enged meg, pedig elvileg ezek is megfelelőek lehetnének. A kinematikai probléma megoldásai a Binet-egyenletből könnyen adódnak, amely az $u(\theta) = 1/r(\theta)$ függvényre vonatkozik. Idézzük fel ezt az egyenletet az 1.4. szakasz és az (1.29) egyenlet alapján:

$$u'' + u = -\kappa, \text{ ahol } \kappa = -\frac{am}{L^2} = -\frac{\alpha\hbar c Z m}{L^2}, \quad (3.10)$$

itt $a = \alpha\hbar c Z = ke^2 Z$, k a Coulomb-állandó, e az elemi töltés, α a finomszerkezeti állandó, és ezúttal L -lrel jelöltük a perdületet. Vegyük észre továbbá, hogy itt κ ellentétes előjelű a Rutherford-szórásos esethez képest, ugyanis itt a két töltés ellentétes, tehát az erő vonzó. A felírt differenciálegyenletnek az általános megoldása pedig:

$$u = c_1 \cos \varphi + c_2 \sin \varphi - \kappa, \quad (3.11)$$

ahol c_1 és c_2 a kezdeti feltételekből meghatározandó állandók. Legyen egy kezdetben a vonzócentrumtól R távolságban lévő, erre merőlegesen mozgó, a centrális erőter miatt állandó L perdületű tömegpontunk. Ekkor $u(0) = 1/R$ és $u'(0) = 0$ (mivel a pálya ezen pontján $v \perp r$, azaz $\dot{r} = 0$), így az ezt kielégítő megoldás alakja

$$u = \left(\frac{1}{R} + \kappa \right) \cos \varphi - \kappa, \text{ azaz} \quad (3.12)$$

$$r = \frac{-1/\kappa}{1 - (1 + 1/R\kappa) \cos \varphi} = \frac{R(1 - \epsilon)}{1 - \epsilon \cos \varphi} = \frac{A(1 - \epsilon^2)}{1 - \epsilon \cos \varphi}, \quad (3.13)$$

ahol bevezettük az $\epsilon = 1 + 1/R\kappa$ excentricitást, illetve az $A = R/(1 + \epsilon)$ nagytengelyt. Ez a polárkoordinátákban vett egyenlet $\epsilon < 1$ esetén ellipszist ír le ($\epsilon = 1$ esetén parabolát, $\epsilon > 1$ esetén hiperbolát, $\epsilon = 0$ esetén kört). A perdület közvetlenül az így definiált excentricitással függ össze:

$$\epsilon = 1 + \frac{1}{R\kappa} = 1 + \frac{L^2}{amR}, \text{ azaz} \quad (3.14)$$

$$L^2 = amR(1 - \epsilon) = amA(1 - \epsilon^2) = \frac{amB^2}{A}, \quad (3.15)$$

ahol bevezettük a $B = A\sqrt{1 - \epsilon^2}$ kistengelyt is. Tulajdonképpen ez az excentricitás definíciója:

$$\epsilon = \frac{\sqrt{A^2 - B^2}}{A}. \quad (3.16)$$

Ezek után az energia is kifejezhető a $p^2/2m$ mozgási energia és a $-a/R$ helyzeti energia összegeként:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{a}{R} = \frac{L^2}{2mR^2} - \frac{a}{R} = \frac{a(1 - \epsilon)}{2R} - \frac{a}{R} = -\frac{a(1 + \epsilon)}{2R} = -\frac{a}{2A} \quad (3.17)$$

A rendszer teljes energiája negatív, azaz kötött: az energia megmaradása mellett nem kerülhet olyan állapotba, ahol nulla a helyzeti energiája (azaz nem kerülhet végtelen messze egymástól a két töltés). Érdekes megfigyelni, hogy az energia $1/A$ módon függ a pálya geometriájától, míg a perdület $A(1 - \epsilon^2)$ módon. Jelentős különbség a Bohr-modellhez képest tehát, hogy itt egyetlen energiához sokféle különböző perdület tartozhat, az ϵ excentricitástól függően. Az ilyen pályákat is leíró modellre Sommerfeld tett javaslatot, ezt a következő szakaszokban tárgyaljuk. Előbb azonban lássuk, mit tudunk egyáltalán az atomok perdületéről, és ezek mit támasztanak alá: a Bohr-modell $L = n\hbar$ jóslatát vagy az adott energiaszinthez különféle perdületeket rendelő elliptikus pályák lehetőségét? Ennél is közvetlenebbül megjelenő kérdés, hogy a Bohr-modellben a körpályákon keringő elektronok síkja vajon milyen irányban állhat.

Gyakorlófeladat

A hidrogénatom első ionizációs energiája 13,6 eV. Milyen frekvenciák felelnek meg ez alapján az egy energiaszintet történő ugrásoknak ($n = 1 \rightarrow 2, n = 2 \rightarrow 3, n = 3 \rightarrow 4$)? Használjuk fel itt az $E = h\nu$ összefüggést, illetve azt, hogy a Planck-állandó felírható $h = 1 \text{ eV} / 241,8 \text{ THz}$ módon is, azaz 1 eV kb 242 THz frekvenciának felel meg.

3.4. Az atomok mágneses momentuma és perdülete

A fentiekben láttuk, hogy „mechanikailag” milyen ellipszispályákhoz milyen perdület tartozik, de továbbra is kérdés, hogy ezek létrejöhetnek-e. Hogyan tudnánk ezt kísérleteileg meghatározni? Az impulzuszórához klasszikusan **mágneses momentum** tartozik, ez viszont a perdületnél könnyebben mérhető. A $\vec{\mu}$ mágneses momentum definíciója alapján kör alakú, \vec{A} felületi merőlegessel jellemezhető, I áramot hordozó áramhurokra

$$\vec{\mu} = I\vec{A}, \quad (3.18)$$

ahol az e töltés és a $T = 2r\pi/v$ periódusidő miatt $I = e/T = ev/(2r\pi)$, és $A = r^2\pi$ alapján általánosítva (a perdület keringő részecskére vonatkozó $L = mrv$ definíciójával), és figyelembe véve, hogy \vec{A} iránya megegyezik \vec{L} irányával, a helyes

$$\vec{\mu} = \frac{e\vec{L}}{2m} \quad (3.19)$$

formulához jutunk. Eszerint tehát ha adott energiaszintű atom esetén a perdület iránya vagy nagysága más és más értékeket vesz fel, akkor a mágneses momentum is megfelelő értékű lesz – ez viszont mérhető. 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 $\vec{F} = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$, ami adott z irányú $(0, 0, B_z)$ mágneses tér esetén $\vec{F} = \mu_z \vec{\nabla} B_z$. Ha tehát a perdület nagysága vagy iránya kvantált, akkor egy atomnáláb egyes atomjaira diszkrét, különböző mértékű erő hat, így a nyaláb diszkrét komponensekre eshet szét. Mivel az atomnyalámban alapértelmezés szerint alapállapotú atomok vannak, így atomról atomra várhatóan a perdület iránya az, ami változhat.

Ez alapján végezte el **Stern és Gerlach** 1922-ben a híres kísérletét (lásd a 11. ábrát, illetve az eredeti Zeitschrift für Physik **8** [1922] 110, **9** [1922] 349 és **9** [1922]

353 cikkekét). A kísérletben inhomogén nagyságú, de mindenhol z irányú B mágneses térbe vezettek monoenergiás atomnyalábot, amelynek mágneses 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):

$$F = ma_{\perp} = \mu_z \nabla B, \quad (3.20)$$

$$v_{\perp} = a_{\perp} t = \frac{\mu_z \nabla B l}{m v}, \quad (3.21)$$

$$\theta = \frac{v_{\perp}}{v} = \frac{\mu_z \nabla B l}{m v^2}. \quad (3.22)$$

Mindez azt jelenti, hogy adott μ_z -hez (azaz adott irányú perdülethez) adott eltérülés tartozik.

A kérdés az volt, hogy az abszolút értékben 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 tapasztalat, a komponensek távolsága ilyenkor is állandó, elrendezésük szimmetrikus a középvonalra, a csoportok intenzitása egyenlő. A perdület – vagy legalábbis a mágneses momentum – kvantáltsága tehát bizonyított volt! A kísérletet más atomokra is elvégezve változatos kimeneteleket tapasztalhatunk, pl. a héliumnyaláb egyben marad, a hidrogén- és az ezüstnyaláb két komponensre bomlik, a nitrogénnyaláb négy komponensre, míg az oxigénnyaláb ötre.

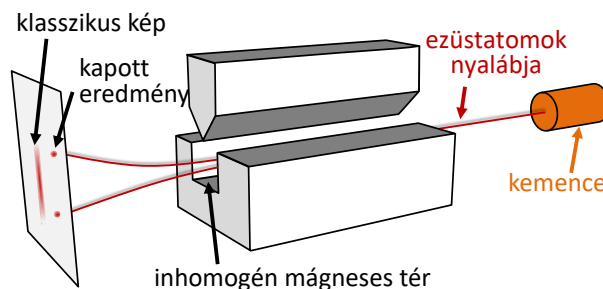
Otto Stern bevezetője a kísérlethez 1921-ben így hangzott:

„ha sikerül végrehajtani, a kísérlet eredményeként egyértelműen dönthetünk a klasszikus és a kvantumelméleti kép között”.

Pauli pedig így írt 1922-ben Gerlachnak a kísérlet eredményét látva:

„Most már talán a hitetlen Stern is meggyőződhet az iránykvantálásról”.

Kérdés ugyanakkor, hogy a fentiekben mért mágneses momentumok valóban az atomok perdületével vannak-e kapcsolatban. Az **Einstein–de Haas-kísérlet** (lásd a 12.



11. ábra. A Stern–Gerlach-kísérlet

ábrát és az eredeti DPG Verhandlungen **17** [1915] 152) ezt a relációt próbálta ellenőrizni, és mindez később a fentiekben részletezett felhasadásból adódó következtetés független vizsgálataként is értelmezhetővé vált. 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 Wander Johannes 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, amit viszont megfigyelhetünk.

Ferromágneset függesztett fel vékony torziós szálra, amelyre tükröt erősítettek, hogy a forgását egy fénysugár 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

$$\frac{\Delta\mu_{\text{teljes}}}{\Delta L_{\text{teljes}}} = \frac{2N\mu}{2NL} = \frac{\mu}{L}, \quad (3.23)$$

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. A fenti naiv modell eredményeként $\mu/L = e/2m$ adódik. Ugyanakkor nem pontosan ezt tapasztaljuk, hanem valójában

$$\frac{\mu}{L} = g \frac{e}{2m} \quad (3.24)$$

adódik a kísérletekben, ahol $g \neq 1$ a giromágneses faktor, a μ/L hányados eltérése a jószolt $e/2m$ értéktől. Az Einstein–de Haas-kísérletben tehát tulajdonképpen ezt a giromágneses faktort mérhetjük, és ennek értéke a tapasztalat szerint eltér egytől!

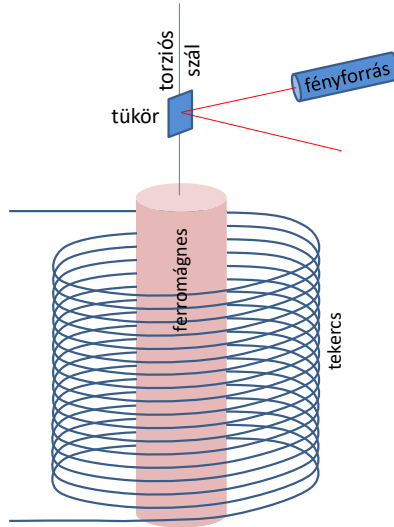
Végül érdemes megemlíteni az 1915-ben felfedezett Barnett-hatást is, melynek során egy test forgás hatására felmágneseződik – ez tulajdonképpen az Einstein–de Haas-hatás „fordítottja”. Barnett az Einstein–de Haas-effektus felfedezése nyomán kezdett saját kísérletekbe, eredményeit pedig a Physical Review 6 (1915) 239 cikkében foglalta össze. Ezeket az eredményeket ma úgy interpretálhatjuk, hogy ilyen esetben a mágnesezettség (M) arányos az anyag szuszceptibilitásának és a forgás szögsebességének $\chi\omega$ szorzatával, az arányossági tényező pedig a fent bevezetett g faktor inverze, tehát

$$M = \frac{1}{g}\chi\omega. \quad (3.25)$$

3.5. A Sommerfeld–Wilson-kvantálás, a „régí kvantumelmélet”

Bár a Bohr-modell igen sikeres a hidrogén spektrumának leírásában, van néhány pontja, ahol hiányosságokat fedezhetünk fel:

- A perdület ad hoc kvantálása túlságosan specifikus elvnek tűnik.
- Egy adott energiájú elektron csak adott nagyságú perdülettel rendelkezhet.



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

- A modellben a perdületvektor térbeli iránya tetszőleges lehet.
- Nem magyarázza meg a spektrum $o(10^{-4})$ relatív finomságú szerkezetét.

Sommerfeld elliptikus pályákról szóló javaslata (pontosabban az emögött rejlő kvantálási elv) ezen problémák leküzdése céljából született. Noha ez a magyarázat ma már meghaladott, de történeti fontossága és matematikai érdekessége miatt jelen jegyzetben is tárgyaljuk. Sommerfeldet az motiválta, hogy a h Planck-állandó éppen a mechanikából is ismert hatásnak megfelelő dimenzióval rendelkezik, ezért legyen az integrált hatás az, ami kvantált. Az elmélet tehát abból indul ki, hogy a rendszer **Hamilton-féle leírásában** az x_i koordinátához $p_i = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{x}_i$ kanonikus impulzus tartozik, ahol \mathcal{L} a rendszer Lagrange-függvénye, a Hamilton-függvény pedig ekkor

$$\mathcal{H} = \sum_i \dot{x}_i p_i - \mathcal{L} \quad (3.26)$$

módon írható fel, azaz a Lagrange-függvény Legendre-transzformáltjaként adódik. A mozgásegyenletek ebben a formalizmusban:

$$\dot{x}_i = \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_i} \quad (3.27)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial x_i}. \quad (3.28)$$

A Sommerfeld–Wilson-quantálás pedig azt mondja ki, hogy ebben a hamiltoni keretrendszerben dolgozva az egyes impulzuskomponensekre az

$$\int_{\mathcal{H}=E} p_i dx_i = n_i h \quad (3.29)$$

egyenlet teendő fel (ahol az integrál egy periódusra írandó fel, állandó energia mellett). Ennek illusztrálásaként vegyünk egy egydimenziós oszcillátort. Erre

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} D x^2, \quad (3.30)$$

ahonnan $\dot{x} = p/m$ és $\dot{p} = -Dx$, a mozgásegyenlet pedig $\ddot{x} + \omega x = 0$ (bevezetve az $\omega^2 = D/m$ mennyiséget), azaz $x = x_0 \sin(\omega t)$. A kvantumfeltétel innen

$$\int p dx = \int m \dot{x} dx, \quad (3.31)$$

$$\text{ami az } x = x_0 \sin(\alpha) \text{ helyettesítéssel} \quad (3.32)$$

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

$$x_0^2 = \frac{nh}{\omega m \pi}, \text{ ahonnan} \quad (3.33)$$

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} D x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 = n\omega\hbar. \quad (3.34)$$

Két dimenzióban $D_x = D_y$ esetén $\omega_x = \omega_y = \omega$, és ekkor itt

$$E_{n_x, n_y} = (n_x + n_y)\hbar\omega, \quad (3.35)$$

és $n = n_x + n_y$ határozza meg az energiát, azaz pl. az $n = 1$ energiaszint kétszeresen degenerált ($n_x = 0, n_y = 1$ vagy fordítva).

Következőként vegyünk egy kétdimenziós, (r, φ) polárkoordinátákkal felírt hidrogénatomot (illetve annak elektronját). Erre a

$$\mathcal{H} = \frac{mv^2}{2} - \frac{a}{r} = \frac{m}{2} [\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi})^2] - \frac{\alpha\hbar c}{r} \quad (3.36)$$

Hamilton-függvény adódik (ahol továbbra is $a = \alpha\hbar c$). A kanonikus impulzusok $p_r = m\dot{r}$, $p_\varphi = m r^2 \dot{\varphi}$ módon adódnak (ahol p_φ éppen a perdület). Az előző szakaszban leírt ellipszispályákra kell venni az integrált, és így a

$$\int p_r dr = n_r h, \quad (3.37)$$

$$\int p_\varphi d\varphi = n_\varphi h \quad (3.38)$$

kvantumfeltételek írhatóak fel. A második egyenlet egyszerűen megoldható: mivel a perdület állandó, csak a φ polárszögre kell integrálnunk, így egyszerűen a p_φ perdület 2π -szeresét kapjuk, amely $n_\varphi h$ -val egyezik meg:

$$p_\varphi = n_\varphi \hbar \quad (3.39)$$

Az első egyenlet integrálja is elvégezhető (r -et és p_r -et is φ -vel kifejezve), és

$$\int p_r dr = 2\pi\sqrt{aAm}(1 - \sqrt{1 - \epsilon^2}) = n_r h, \text{ azaz mivel} \quad (3.40)$$

$$\sqrt{aAm(1 - \epsilon^2)} = L = p_\varphi = n_\varphi \hbar, \text{ így} \quad (3.41)$$

$$\sqrt{aAm} = (n_r + n_\varphi)\hbar, \text{ és} \quad (3.42)$$

$$\sqrt{A} = (n_r + n_\varphi) \frac{\hbar}{\sqrt{am}} \quad (3.43)$$

adódik. Ebből $A = (n_r + n_\varphi)^2 r_{\text{Bohr}}$ adódik, az energiára pedig a korábbiakkal megegyezően $E = -E_0/n^2$, ahol $n = n_r + n_\varphi$, Sommerfeld elnevezése szerint a „kvantumösszeg”. Ahogy fentebb szerepelt, $L^2 A = amB^2$, ahonnan a B kistengely nagysága is megkapható, illetve innen az ϵ excentricitás is. Ha (a későbbi összehasonlítást megkönnyítendő) bevezetjük az $l = n_\varphi$ jelölést, akkor az $n = n_r + n_\varphi$ és $l = n_\varphi$ kvantumszámokkal jellemzett pályák energiájára (E_{nl}), tengelyeire (A_{nl} és B_{nl}), perdületére (L_{nl}) és excentricitására (ϵ_{nl}) végül az

$$E_{nl} = -\frac{E_0}{n^2} \quad (3.44)$$

$$A_{nl} = n^2 r_{\text{Bohr}} \quad (3.45)$$

$$B_{nl} = nl r_{\text{Bohr}} \quad (3.46)$$

$$L_{nl} = l\hbar \quad (3.47)$$

$$\epsilon_{nl} = \sqrt{1 - \frac{l^2}{n^2}} \quad (3.48)$$

feltételek teljesülnek. Ez azt jelenti, hogy a nagytengely a Bohr-modellbeli sugárnak megfelelő méretű lesz, míg a kisebbik tengely ennek l -szerese, az excentricitás pedig szintén l -től függ majd. Az energia továbbra is az eredeti E_0/n^2 összefüggésnek megfelelően adódik, a perdület is a \hbar egész számú többszöröse, ugyanakkor itt nem n -től, hanem l -től függ. Sommerfeld eredeti felírása szerint $l = 1, \dots, n$ értékeket vehet fel, ugyanakkor a rendszer matematikailag megengedi az $l = 0$ állapotokat is, ez az úgynevezett Coulomb-oszcillátor, amikor a pálya excentricitása 1, magyarul ellipszis helyett egy szakasról beszélünk. Fizikailag már persze kevésbé világos a dolog: az elektron pályájának egyik szélső pontja az atommagban van.

Gyakorlófeladat

Láttuk, hogy az egydimenziós harmonikus oszcillátorra vonatkozó kvantumfeltételből az $E = n\hbar\omega$ energiaszintek adódnak. Egy $D = 100$ N/m rugóállandójú rugóra kötött, 1 kg tömegű test esetén mennyi lesz az energiakvantum, azaz milyen energiacsomagokat vehet fel a rendszer?

3.6. A hidrogénatom Sommerfeld-modellje

Térjünk most át a háromdimenziós hidrogénatom esetére. Gömbi koordináta-rendszerben (r, θ, ϕ) koordinátákkal) a Hamilton-függvény a kétdimenziós problémához hasonló,

$$\mathcal{H} = \frac{m}{2} \left[\dot{r}^2 + (r\dot{\phi})^2 + (r\dot{\theta} \sin \phi)^2 \right] - \frac{\alpha \hbar c}{r}. \quad (3.49)$$

A kanonikus impulzusok és a kvantálási feltételek az alábbiaknak megfelelően adódnak:

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad \int p_r dr = n_r h, \quad (3.50)$$

$$p_\phi = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \dot{\phi}} = mr^2 \dot{\phi}, \quad \int p_\phi d\phi = n_\phi h, \quad (3.51)$$

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta} \sin^2 \phi, \quad \int p_\theta d\theta = n_\theta h. \quad (3.52)$$

Ezzel a hamiltoni így is felírható:

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} + \frac{p_\theta^2}{r^2 \sin^2 \phi} \right) - \frac{\alpha \hbar c}{r} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\alpha \hbar c}{r}. \quad (3.53)$$

Innen ismét az $E = \mathcal{H}$ feltételből ki lehet fejezni az egyes koordinátákat, majd a kvantálási feltételek egyenleteit kell alkalmazni, az integrálást az adott ellipszispályára elvégezve. Eszerint az energia továbbra is E_0/n^2 módon adódik, ahol n egyfajta teljes kvantumösszeg: $n = n_r + n_\theta + n_\phi$. Ugyanígy bevezethető az $l = n_\phi + n_\theta$ kvantumösszeg, amely a perdületet adja meg $L = \hbar l$ módon. Mivel $l = n - n_r$, így ennek maximális értéke $n_r = 0$ mellett van, ez körpályát jelent. Valóján a $n_r > 0$ feltevés lesz helyes, és így l maximális értéke $l = n - 1$ mellett valósul meg, azaz l 0 és $n - 1$ között változik. A p_ϕ kanonikus impulzus éppen a perdület z -vetülete, amely így állandó, és az integrálfeltételből $p_\phi = n_\phi \hbar$ adódik. Ezért a perdület z -irányú vetületére bevezetjük az $m = n_\phi$ kvantumszámot (itt m nem a tömeg, hanem a perdület irányára vonatkozó kvantumszám, a betű a „mágneses momentum” kifejezés kezdőbetűiből adódik). Tekinthetjük úgy, hogy ez a pályák „dőlésszögét” határozza meg, persze figyelembe véve, hogy itt valójában a perdület adott irányú vetületéről van szó. Összefoglalva mindezeket, az n, l, m kvantumszámokkal jellemezhető pályák energiája (E_{nlm}), tengelyei (A_{nlm} és B_{nlm}), excentricitása (ϵ_{nlm}), perdülete (L_{nlm}) és z -irányú perdületvetülete (L_{nlm}^z) a következőképpen írható fel:

$$E_{nlm} = -\frac{E_0}{n^2} \quad (3.54)$$

$$A_{nlm} = n^2 r_{\text{Bohr}} \quad (3.55)$$

$$B_{nlm} = n l r_{\text{Bohr}} \quad (3.56)$$

$$\epsilon_{nlm} = \sqrt{1 - \frac{l^2}{n^2}} \quad (3.57)$$

$$L_{nlm} = \hbar l \quad (3.58)$$

$$L_{nlm}^z = \hbar m. \quad (3.59)$$

Az így adódó lehetséges pályákat (kizárólag az $m = 0$ mellett felrajzoltakat; az m változtatása a pályák dőlésszögét befolyásolja) lásd a 13. ábrán. Fontos különbség a Bohr-modellhez képest, hogy itt létezhetnek nulla perdületű pályák is, például a hidrogénatom alapállapotú elektronjának nulla a pályaperdülete. Ez egydimenziós Coulomb-oscillátornak tekinthető ebben a modellben. A modell másik fontos gondolata az impulzusmomentum iránykvantáltsága, amely szerint tehát a perdületvektor pályára merőleges vetülete csak $m\hbar$ értékeket vehet föl.

A Sommerfeld-féle modellben tehát az n, l, m kvantumszámok jellemzik az elektronokat, és egy adott l perdületkvantumszám esetén $m = -l \dots l$ iránykvantumszámok (mágneses kvantumszámok) képzelhetőek el. Érdeemes észrevenni, hogy ez viszont elmentmondásban áll a Stern–Gerlach-kísérlet két részre felhasadó nyalábjaiával: a fentiek szerint ugyanis $2l + 1$ lehetőség van a z irányú vetületére, $l\hbar$ és $-l\hbar$ között, és μ_z is ennek megfelelő értékeket vesz fel. Ez viszont mindig páratlan számú lehetőséget eredményez, viszont egyes atomok nyalábjai páros számú foltra oszlanak, azaz kétféle perdületvetület valósul meg. Kérdés továbbá, hogy az $l = 0$ állapotban lévő hidrogén hogyan hasadhat fel. Az elektron pályájából adódó perdülete itt nulla, de mégis van mágneses momentuma. Olyan, mintha az elektronnak lenne egy saját perdülete, a pályától függetlenül. Erre később, a 7. fejezetben térünk vissza. Bevezetve a

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (3.60)$$

Bohr-magnetont, a

$$\mu = \frac{\mu_B L}{\hbar} \quad (3.61)$$

összefüggés lesz érvényes, azaz ha $L = l\hbar$, akkor $\mu = l\mu_B$, és $L_z = m\hbar$ esetén a mágnesesmomentum-vetület $\mu_z = m\mu_B$ értékei lesznek lehetségesek. A giromágneses faktor az ettől való eltérést vizsgálja, ezzel

$$\mu = g\mu_B l \quad \text{és} \quad (3.62)$$

$$\mu_z = g\mu_B m. \quad (3.63)$$

Az elektron keringéséből fakadó momentumára valóban $g = 1$. Később kiderül, hogy az elektron sajátperdülete is mágneses momentumot eredményez, amelyre azonban $g_s \approx 2$, erre is később, a 7. fejezetben térünk vissza.

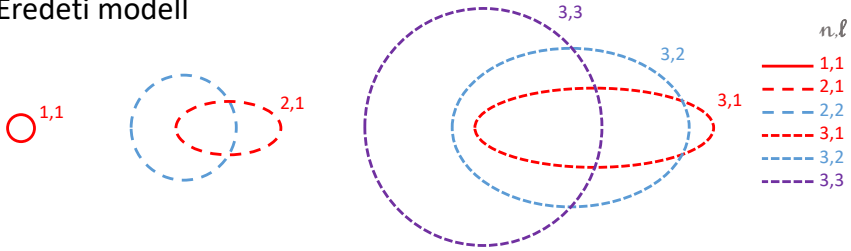
Fontos továbbá, hogy a hidrogénatom energiaszintjeinek finomszerkezetét is megadja a Sommerfeld-modell relativisztikus általánosítása, amelyben az

$$\frac{1}{2}mv^2 \rightarrow mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) \quad (3.64)$$

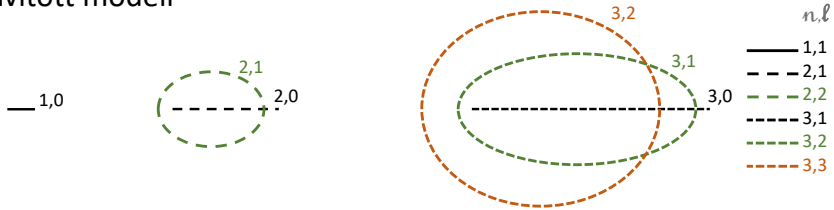
módosítással élünk a Hamilton-függvényben. Ebben az esetben a különböző $l = 1, \dots, n$ kvantumszámokra kapott energiamódosulás (azaz a spektrum „finomszerkezete”) az $\alpha = ke^2/\hbar c$ finomszerkezeti állandó négyzetével lesz arányos:

$$E_{nl} = -E_0 \frac{Z}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (3.65)$$

Eredeti modell



Javított modell



13. ábra. A hidrogénatom méretarányos elektronpályái a Bohr–Sommerfeld-modellben, n, l címkékkel. A felső sorban a történelmi tárgyalás során leírt pályák szerepelnek (ezek esetében $l = n$ is lehetséges, $l = 0$ viszont nem), míg alul a ($l < n$ és $\sqrt{l(l+1)}$ szempontjából is) javított Sommerfeld-pályák. Az átláthatóság kedvéért az egyes n értékekhez tartozó pályák külön szerepelnek. A különböző színek különböző l értékeket jelölnek.

Ezt a jóslatot megerősítették a mérések is (H, He^+ , Li^{2+} és más egyelektronos ionok eseteire is), ami a Sommerfeld–Wilson-kvantálás, avagy a régi kvantumelmélet legnagyobb diadala volt. Később kiderült, hogy egyrészt az $l = 0$ esetet is meg kell engedni, illetve az elektronnak sajátperdületje is van. A mindezt figyelembe vevő Dirac-egyenlet azonban közel azonos formulát adott, egyedül azzal az eltéréssel, hogy a fenti formulában az l helyére a sajátperdületet is tartalmazó $j + 1/2$ kvantumszám került – minderről bővebben beszélünk majd a későbbiekben.

Érdeemes ugyanakkor megemlíteni, hogy mint később kiderül, a perdületre az $L = l\hbar, l = 1 \dots n$ és az $L = l\hbar, l = 0 \dots n - 1$ verzió sem ad helyes eredményt, valójában $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}, l = 0 \dots n - 1$ az, amit a kísérletek megfigyelnek, és ehhez hasonlóan az ellipszispálya kistengelye is módosul,

$$B_{nl} = n\sqrt{l(l+1)}r_{\text{Bohr}}. \quad (3.66)$$

A 13. ábra az így korrigált pályákat is mutatja. Valójában ez a hiba részben abból is adódik, hogy a fenti számolásban egy elméleti pontatlanság lapul: ilyen pályaintegrálok számításakor (amikor többszörös degeneráció is fellép) az itt használt gömbi koordináták helyett pl. az úgynevezett Delaunay-pályaelemeket kellene figyelembe venni (ezek az égi mechanikában kerülnek elő; az égi mechanikában „pályaelemeknek” egyszerűen a pályákat és rajtuk a test helyzetét megadó bármilyen fajta koordinátákat neveznek). Ezekre azonban nem ismert a kvantumfeltételekből adódó eredmény levezetése (lásd Manfred Bucher arXiv:0802.1366 cikkét a témában).

Gyakorlófeladat

A hidrogénatom pályáinak excentricitása a Sommerfeld-modellben $\sqrt{1 - l^2/n^2}$ módon adódik, illetve a relativisztikus módosítással $\sqrt{1 - l(l+1)/n^2}$. Mekkora az egyes l értékekhez tartozó pályák excentricitása $n = 4$ esetén?

4. Az elektromágneses sugárzás részecsketermészete

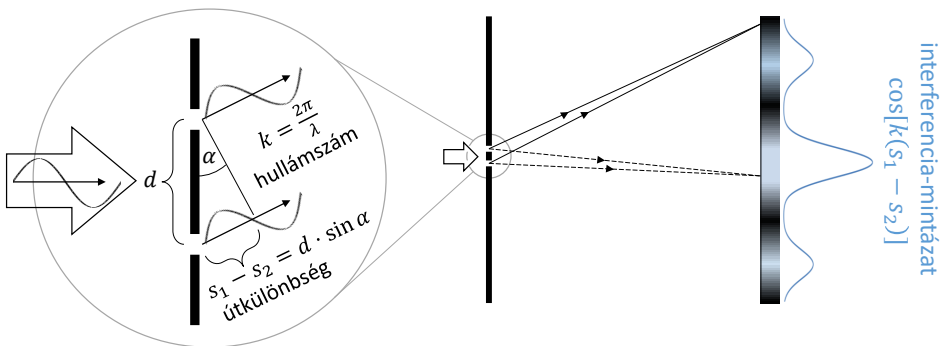
4.1. A fény hullámtermészete

Hosszú időn keresztül kérdés volt, hogy a fény valójában miből áll és hogyan működik. Descartes és Newton például egyfajta „korpuzkuláris” (részecskéket tartalmazó) elméletet szorgalmaztak, míg Hooke és Huygens a hullámelmélet alapjait rakták le. **Fresnel és Young interferenciakísérletei** óta azt is tudjuk, hogy bizonyos jelenségekben a fény határozottan hullámként viselkedik. Young 1801-ben (természetes, a Naptól származó, távcsővel fókuszált) fénysugarat osztott ketté papírlappal, Fresnel pedig 1815 és 18 között végzett hasonló méréseket. A XX. században aztán reneszánszát élte ez a technika: Laue 1912-es munkája nyomán (CuSO_4 kristályra bocsátott röntgensugarakat) ismertté vált a röntgendiffrakció módszere, amelyben a kristálysíkokon visszaverődött sugárnyalábok interferenciáját lehet megfigyelni, és ezáltal kristályok szerkezetét feltárni. Mindezen jelenségeket a következőképpen érthetjük meg. Egy fényhullám két részre osztása során keletkező fénysugarak a megfigyelésükre használt ernyőig eltérő utat tesznek meg, így eltérő fázisban érkeznek meg. A fáziskülönbségtől függően pedig erősítik vagy gyengítik egymást, így a hullámhossztól függő mintázat jön létre (lásd a 14. ábrát). A jelenség hátterében az áll, hogy az ernyő egy adott pontjába két úton keresztül juthat a fény, és így az ott megjelenő elektromos tér az alábbi két komponensből áll össze:

$$E_1(t) = E_0 e^{i(k s_1 - \omega t + \phi_1)} \text{ és} \quad (4.1)$$

$$E_2(t) = E_0 e^{i(k s_2 - \omega t + \phi_2)}, \quad (4.2)$$

ahol k a hullámszám, ω a körfrekvencia, $s_{1,2}$ az adott út hossza, és $\phi_{1,2}$ az adott forrás esetlegesen megjelenő fázisa. Így adott pontban a $T = 2\pi/\omega$ periódusidőnél lényegesen nagyobb $[t_1, t_2]$ intervallumra átlagolt intenzitásnak megfelelő „fényességet” észlelünk (vagy észlel az oda helyezett detektor: fényérzékeny lemez, CCD, fotoelektron-



14. ábra. A fényvel elvégzett kétréskísérlet és az ott tapasztalt interferenciamintázat

sokszorozó, antenna stb.). Ez az amplitúdó négyzetéből így adódik:

$$I \propto \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} |E_1(t) + E_2(t)|^2 dt = \frac{E_0^2}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \left| e^{i(k s_1 - \omega t + \phi_1)} + e^{i(k s_2 - \omega t + \phi_2)} \right|^2 dt \quad (4.3)$$

$$= 2E_0^2 \{1 + \cos [k(s_1 - s_2) + (\phi_1 - \phi_2)]\}.$$

Ebből azonnal látszik, hogy a megjelenő intenzitás az $s_1 - s_2$ útkülönbségtől koszinuszosan függ, és ez az ernyőn megjelenő mintázat forrása. Ha az ernyő és a réseket tartalmazó akadály távolsága L , a rések távolsága d , akkor az ernyőn függőlegesen vett y pozíció függvényében $L \gg d$ és $y \gg d$ esetében

$$s_1 - s_2 = d \frac{L}{\sqrt{L^2 + y^2}} \quad (4.4)$$

összefüggés adódik (az útkülönbséget és a teljes utat tartalmazó háromszögek hasonlóságából). Az így adódó interferenciaképet megerősítik a kísérletek, a fény tehát ilyenkor hullámként viselkedik, amelyet a Maxwell-egyenletekből adódó elektromágneses hullámegyenletek is megerősítenek. Érdeemes kiegészítésként megemlíteni, hogy általánosságban az ilyen diffrakciós képek esetében mindig a „forrás” Fourier-transzformáltja jelenik meg (ahogy az a differenciális hatáskeresztmetszetenél is szóba került), és itt is a végeredmény két Dirac-delta összegének Fourier-transzformáltja lett. Ilyen diffrakciós képet természetes fényvel nehéz létrehozni, ugyanis ennek esetében sok különböző hullámhossz van jelen egyszerre, ami módosítja a fenti egyszerű képet.

4.2. A fotoelektromos jelenség

A fentiekben tehát láttuk, hogy a fény bizonyos esetekben hullámtulajdonságokat mutat, és ennek elméleti háttere is kialakult a XIX. századra. Ugyanakkor érdekes módon olyan jelenségek is felmerültek, amelyekben a részecskekép szolgáltat kézenfekvő magyarázatot. Becquerel és a **fotovoltaikus hatás** 1839-es felfedezése irányította a figyelmet a fény és az elektromosság kapcsolatára. Azt figyelte meg, hogy fény hatására a vezetési sávba mozognak az elektronok a kötött sávból, és így feszültség és áram jön létre. A **fotoelektromos jelenséget** pedig Heinrich Hertz fedezte fel 1887-ben (róla nevezték el a frekvencia „hertz” egységét, és ő volt a Franck–Hertz-kísérletről ismert, Nobel-díjas Gustav Hertz nagybátyja). Ezen jelenség során fény hatására fémből elektronok lépnek ki. Hertz elektromágneses hullámok nyomán keletkező szikrákat vizsgált. Észrevette, hogy a hullámok és a szikrakeletkezés közé helyezett üveglap lecsökkenti a szikrakeletkezést, míg egy kvarcból készült ablak nem: előbbi ugyanis elnyeli az UV-fényt, amely a szikrakeletkezésért felel. Ezt a jelenséget tovább sikerült finomítani, amikor 1902-ben Lénárd Fülöp megfigyelte gázok ionizációját UV-fény hatására, és frekvenciától való függetlenséget állapított meg. Mindezt végül Einstein magyarázta meg 1906-ban – mindenekelőtt lássuk azonban a jelenséget!

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** a hullám amplitúdójával, azaz

intenzitással arányos, a frekvenciától viszont nem függ. Van ugyanakkor egy **minimális frekvencia**, amely alatt intenzitásfüggetlenül nem lépnek ki elektronok, ahogy a 15. ábra mutatja. Ezen legkisebb frekvencia értéke az adott anyagtól függ: káliumra $5,5 \cdot 10^{14}$ Hz, nátriumra $6 \cdot 10^{14}$ Hz, nikkelre $12,1 \cdot 10^{14}$ Hz, aranyra $11,7 \cdot 10^{14}$ Hz. A nátrium frekvenciájának megfelelő fény hullámhossza 500 nm, míg ugyanez nikkelle esetében 250 nm, ez utóbbi már az UV-tartományban van. Mint alább látni fogjuk, ez a legkisebb f_0 frekvencia (vagy legnagyobb $\lambda_0 = c/f_0$ hullámhossz) egy

$$W = hf_0 = \frac{hc}{\lambda_0} \quad (4.5)$$

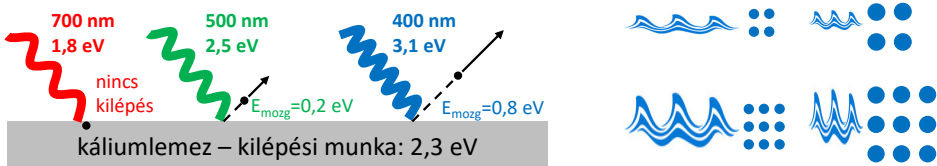
módon számítható „kilépési munkaként” értelmezhető, ahogy az a 15. ábrán is szerepel.

A kísérlet konkrét megvalósítását és eredményét lásd a 16. ábrán (illetve az eredeti Annalen der Physik **267** [1887] 983 publikációban). Egy vákuumkamrában lévő katódra fényt bocsátunk, és az ebből **kilépő elektronok áramát** mérhetjük az anód és katód közötti feszültség függvényében, különféle intenzitású és frekvenciájú fény alkalmazása esetén. Ha a feszültséget növeljük (állandó intenzitás és frekvencia mellett), egyre több kilépő elektront észlelünk anóráram formájában. Ha valamely feszültségnél már az összes kilépő elektron eljut az anódra, akkor hiába növeljük tovább a feszültséget, az áram nem növekszik tovább: ez a **szaturációs áram**, amelynek értéke (bizonyos küszöbfrekvencia felett) a fény intenzitásával arányos. Ha a feszültséget negatív irányban csökkentjük, egyre kisebb áramot mérünk. A negatív irányban vett legnagyobb olyan feszültség (a 16. ábrán V_0), amelynél még nem nulla a fotoáram, annak felel meg, amelyet a kilépő elektronok még éppen le tudnak győzni. Ez az elektronok lehetséges legnagyobb mozgási energiájának felel meg, hiszen az ekkora ellenfeszültséget már éppen nem tudják legyőzni. A mérések során kiderült, hogy ez a lehetséges legnagyobb ellenfeszültség a frekvenciától függ, még hozzá lineárisan:

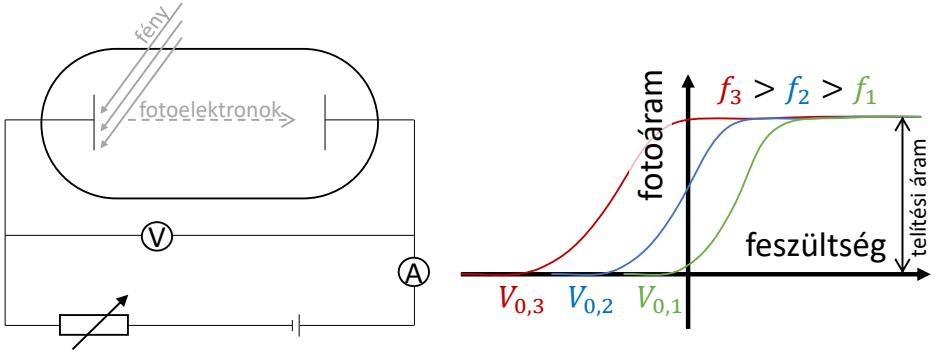
$$eV_0 = a \cdot f + b. \quad (4.6)$$

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 katódnak is adhat valamekkora energiát, azaz

$$E_f = W + E_e + \Delta k, \quad (4.7)$$



15. ábra. Balra a fotoelektromos jelenség látható: fény hatására fémlemezből elektronok lépnek ki, amennyiben a fény frekvenciája (azaz a kvantumainak energiája) elég nagy, a kilépő elektronok energiája pedig a fény hullámhosszától, avagy mint később kiderül, a fénykvantumok energiájától függ. Jobbra az látható, hogy ennek magyarázat az, hogy hullámok „kvantumokra osztása” során a frekvencia a kvantumok energiáját szabályozza, míg az amplitúdó a kvantumok számát: nagy amplitúdójú hullám sok kvantumot jelent, nagy frekvenciájú hullám pedig nagy energiájú kvantumokat.



16. ábra. Balra a fotoelektromos kísérlet elrendezése látható. A vákuumkamrában lévő katódra fényt bocsátunk, ennek hatására fotoelektronok lépnek ki belőle, amelyeket az adott feszültségre kapcsolt anódon észlelünk, és az anódáramot mérjük. A jobb oldali ábra az anódáramot mutatja a „gyorsítófeszültség” függvényében: nagyobb frekvencia esetén nagyobb V_0 ellenfeszültséggel lehet megállítani a kilépő elektronokat; azonban egy adott küszöbfrekvencia alatt egyáltalán nem lépnek ki elektronok. Az ábrán nem szerepel, de megemlítjük, hogy a telítési áram a bejövő fény intenzitásától függ.

azaz

$$E_e \leq E_f - W. \quad (4.8)$$

Itt a W kilépési munka tulajdonképpen az atom ionizációs energiája. Ha ezeket az elektronokat V_0 feszültséggel éppen meg tudjuk állítani, akkor $eV_0 = E_e$ miatt

$$eV_0 = E_f - W. \quad (4.9)$$

Ez éppen a kísérletekben is adódó, fent említett $eV_0 = af + b$ lineáris összefüggésnek felel meg, ahol $a = E_f/f$ és $b = -W$. Az együtthatók mérése alapján $E_f = hf$, ahol h a Planck-állandó, értéke – amint az már korábban is többször előkerült – körülbelül $6,626 \cdot 10^{-34}$ Js. A küszöbfrekvenciára pedig (ahogy a (4.5) egyenletben is láttuk) a $W = hf_0$ összefüggés lesz igaz: $f = f_0$ esetén még éppen kiszabadulnak az elektronok, de mozgási energiájuk közel nulla, így a legkisebb feszültségátat sem tudják már legyőzni. Az intenzitástól mindegyik érték független, holott klasszikusan azt várnánk, hogy egy intenzív (összességében 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 kölcsönhatásba lép, 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 az akkumulálódott

energia megfelelné a kilépési munkának, amiből a

$$W = \frac{j\tau}{nd} \quad (4.10)$$

összefüggés adódik, ahol j az áramsűrűség (amely teljesítmény/felület mértékegységű), n az elektronok sűrűsége és d a behatolási mélység. Ha n nagyságrendje 10^{28} elektron köbméterenként, a behatolási mélység a hullámhossz, azaz $d \approx 10^{-7}$ m, míg a szükséges energia néhány eV, azaz $W \approx 10^{-19}$ J, akkor $j \approx 10^{-3}$ W/m² esetén $\tau \approx 2000$ óra adódik. Ezzel szemben a kísérletekben látszik, hogy sokkal kisebb energiaáram esetén is 10^{-10} másodpercnél kisebb az elektron kilépési ideje. Ez azt jelenti, hogy az átlagos energia nem elég az elektronok kiléptetéséhez – de egy-egy hullámkvantum ennek ellenére kilökhethet egy-egy elektront.

Összességében azt látjuk, hogy az elektronok azonos energiával lépnek ki monokromatikus fény esetén, és ezt a hf energiájú fénykvantumok (fotonok) elnyelése okozza. A fotoelektronok száma (amely a szaturációs áramnak felel meg) arányos az intenzitással és az atomok számával is, tehát elemi eseményekről van szó, amelyek közvetlenül a fotonok és az atomok között zajlanak. Ebből a sugárzási tér kvantáltsága következik, és a kvantáltság az atomokkal való kölcsönhatás során figyelhető meg. A sugárzási tér tehát az anyag atomos jellegéhez hasonló (részecske-) és eltérő (hullám)tulajdonságokkal is rendelkezik. Végül a fotonok számát illetően példaként megemlíthetjük, hogy az $E = hf$ összefüggés egy $P = 40$ W-os fehér lámpa nagyjából 10^{20} db fotont bocsát ki másodpercenként.

Gyakorlófeladat

Adott $j = 10^{-3}$ W/m² intenzitású elektromágneses sugárzás d mélységben hatol be egy fémlapba. Az elektronok számsűrűsége 10^{28} db/m³, ekkor mekkora τ ideig kell várni, hogy a „felgyülemlett” energia egy elektronnra jutó átlagos értéke elérje a $W = 1$ eV kilépési munkát?

4.3. Az elektromágneses sugárzások kettős természete

Ahogy fent írtuk, 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 jósolt meg 1871-ben, illetve 1876-ban, és Lebedev figyelt meg 1900-ban, majd Nichols és Hull 1901-ben. A jelenség asztrofizikai szempontból is nagy jelentőségű (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, méghozzá azonos eredménnyel. A hullámképben az S Poynting-vektorú fény $p_{s.ny.}$ sugárzási nyomása

$$p_{s.ny.} = \frac{\langle |S| \rangle}{c} \quad (4.11)$$

módon adódik. Mivel $P = \dot{E}$ teljesítmény esetén $\langle |S| \rangle = \dot{E}/A$, ezért a fény által kifejtett erő (elnyelés esetén) $F = \dot{E}/Ac$, hiszen $\langle |S| \rangle$ a sugárzásra merőleges felületen időegységenként áthaladó energiát adja meg. A részecskégekben a fotonok $p_{\text{imp.}}$ impulzusát kell vennünk, amely (ahogy a következő fejezetben részletesen is tárgyaljuk)

$$p_{\text{imp.}} = \frac{E}{c} \quad (4.12)$$

módon adódik. (Ezekben a formulákban a nyomás és az impulzus egyszerre szerepel, de mindkettőt p -vel jelöljük, ezért az indexben szerepel a konkrét mennyiség nevének rövidítése). 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 idődilataciót) az f' észlelt frekvenciára f eredeti frekvencia és $\beta = v/c$ relatív sebesség esetén

$$f' = f \sqrt{\frac{1 - \beta}{1 + \beta}} \quad (4.13)$$

adódik. Ugyanakkor a foton energiáját Lorentz-boostolva

$$E' = \gamma E - \beta \gamma p = \gamma(1 - \beta)E \quad (4.14)$$

eredményt kapunk, ahol $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$, azaz itt is éppen a frekvenciára vonatkozó egyenletben szereplő faktor jön ki.

A fény polarizációja érdekes módon szintén megérthető hullámképen túl a részecskégekben is, ugyanis a foton spinjével függ össze, ahogy azt később részletesebben is tárgyaljuk majd. Fontos azonban már itt is felhívni rá a figyelmet, hogy a fotonnak is van spinje, értéke \hbar , az adott irányú vetülete pedig $\pm \hbar$ (nulla értéket viszont nem vehet fel).

4.4. A Compton-jelenség

Compton 1922-ben vizsgálta meg röntgensugarak szóródását paraffinon. Azt látta, hogy a szórt sugárzásban nagyobb hullámhosszú komponensek jelennek meg, és a szögeloszlás is eltér a várakozástól. A klasszikus elektrodinamika szerint a hullám hatására az atom (elektron) **dipólusugárzást** bocsát ki, melynek intenzitása $\sin^2 \phi$ szerint változik, ahol ϕ a gyorsulás és a sugárzás vizsgált iránya által bezárt szög. A szórás hatáskeresztmetszete a (2.34) egyenletből¹²

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \sin^2 \phi, \text{ ahol } r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} = \frac{ke^2}{m_e c^2} = \frac{\alpha \hbar c}{m_e c^2} = \frac{\alpha \hbar}{m_e c}, \quad (4.15)$$

továbbá a térszögre integrálva

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_e^2. \quad (4.16)$$

¹² A (2.34) egyenletnél θ jelent meg, amely ott a gyorsulás irányával bezárt szöget jelentette – éppen ezt jelöljük ebben a szakaszban ϕ -vel, erre fontos figyelniük.

Vizsgáljuk meg, mi adódik ebből akkor, ha a bejövő és a továbbhaladó hullám iránya közötti θ szögének függvényében vizsgáljuk meg a szórást. Ehhez ki kell fejeznünk a θ szöget ϕ segítségével.

4.4.1. Elektromágneses hullámok klasszikus szórása

Legyen a bejövő hullám iránya \mathbf{k} , az elektromos tér (azaz a polarizáció) erre merőleges iránya \mathbf{e} (lásd a 17. ábrát). Az ezek és $\mathbf{k} \times \mathbf{e}$ által kifeszített koordináta-rendszerben kifejezve a kimenő sugárzás iránya

$$\mathbf{n} = \mathbf{k} \cos \theta + \mathbf{e} \sin \theta \cos \psi + \mathbf{e} \times \mathbf{k} \sin \theta \sin \psi, \quad (4.17)$$

ahol θ a bejövő (\mathbf{k}) és a kimenő (\mathbf{n}) sugárzás közötti szög, ψ pedig a kimenő sugárzás bejövő sugárzásra merőleges síkban vett vetületének szöge a polarizációs vektorhoz képest (azaz \mathbf{n} szöge az \mathbf{e} és $\mathbf{e} \times \mathbf{k}$ vektorok által kifeszített síkban). A hatáskeresztmetszet (4.15) kifejezésében ϕ az elektromos tér (\mathbf{e}) és a kimenő sugárzás (\mathbf{n}) közötti szög: ez az $\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}$ skalárszorzatából kapható meg, azaz

$$\cos \phi = \cos \psi \sin \theta, \quad \text{és így} \quad \sin^2 \phi = 1 - \cos^2 \psi \sin^2 \theta. \quad (4.18)$$

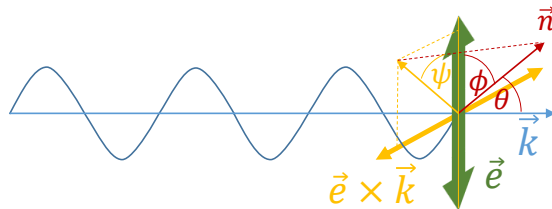
Mivel számunkra a ψ polarizációs szög indifferens, ezért az összes ψ szögre átlagolnunk kell (azaz tetszőlegesen polarizált elektromágneses hullám átlagos szórására vagyunk kíváncsiak). Így a végeredményben

$$\begin{aligned} \langle \sin^2 \phi \rangle &= \langle 1 - \cos^2 \psi \sin^2 \theta \rangle = 1 - \langle \cos^2 \psi \rangle \sin^2 \theta \\ &= 1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta) \end{aligned} \quad (4.19)$$

jelenik majd meg, mivel értelemszerűen $\langle \cos^2 \psi \rangle = 1/2$. Végül a Thomson-szórás polarizációkra átlagolt differenciális hatáskeresztmetszete (az eltérülés szöge szerint):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \theta). \quad (4.20)$$

Az eredmény tehát 90 fokra **szimmetrikus**, de a kísérletekben azonban nem ezt a eloszlást mérték (lásd a 18. ábrát és az eredeti Physical Review **21** [1923] 483 publikációt).



$$\begin{aligned} \vec{n} &= \vec{k} \cos \theta + \vec{e} \sin \theta \cos \psi + \vec{e} \times \vec{k} \sin \theta \sin \psi \\ \vec{e} \cdot \vec{n} &= \cos \phi = \sin \theta \cos \psi \end{aligned}$$

17. ábra. A Compton-szórás irányviszonyai, a polarizációt és a kimenő irányt összekötő ϕ szög és a kimenő és bejövő irányt összekötő θ szög kapcsolatát bemutató

Nagyfrekvenciás sugárzás esetén a nagyszögű visszaszórás jelentősen elnyomott, míg kis frekvencia esetén a Thomson-formulát megközelítő eredményt kapunk. Mindez önmagában erős utalás arra, hogy a Compton-szórásban (azaz nagyfrekvenciás fény szabad elektronokkal való kölcsönhatásában) nem működik a klasszikus kép.

4.4.2. Compton-szórás a részecskeképben

Mi történik azonban a szórt fény frekvenciájával? Klasszikusan a bejövő és a kimenő hullám **frekvenciája azonos**. Ha elég nagy az intenzitás, a töltés visszalökődhet; ekkor 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**, amit a klasszikus kép (a hatáskeresztmetszethez hasonlóan) nem tud megmagyarázni. A hullámhossz-módosulás magyarázata a 19. ábrán látható módon elképzelhető részecskeképben egyszerűen adódik.

A részecskeképben a Compton-szórást úgy értelmezhetjük, hogy beérkezik egy

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hf}{c} \quad (4.21)$$

impulzusú foton, és kimegy

$$p' = \frac{h}{\lambda'} = \frac{hf'}{c} \quad (4.22)$$

impulzussal, miközben átadott a kettő különbségének megfelelő **impulzust** az elektronnak, és az energiájával is ugyanez történt. Az elektron teljes energiája az ütközés előtt a relativitáselmélet értelmében $m_e c^2$, míg utána az általános $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$ formulának megfelelően

$$E_e = \sqrt{m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2}, \quad (4.23)$$

a fotonra pedig a $E = hf$ és $E' = hf'$ feltételt alkalmazzuk. Innen az energiamegmaradás a következőképpen írható fel:

$$E - E' = E_e^2 - m_e c^2, \text{ azaz} \quad (4.24)$$

$$hf - hf' = \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2, \quad (4.25)$$

innen pedig kifejezhető az elektron ütközés utáni impulzusa:

$$p_e^2 c^2 = (hf + m_e c^2 - hf')^2 - m_e^2 c^4. \quad (4.26)$$

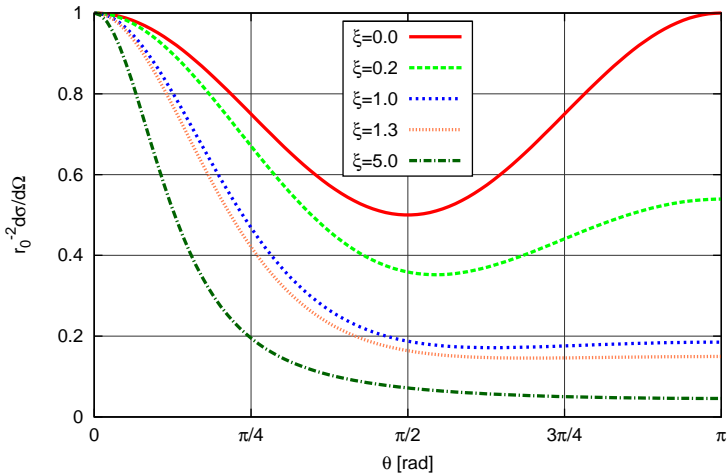
Ezek után írjuk fel impulzusmegmaradást vektoros formában. Eszerint

$$\mathbf{p}_e = \mathbf{p} - \mathbf{p}', \text{ tehát} \quad (4.27)$$

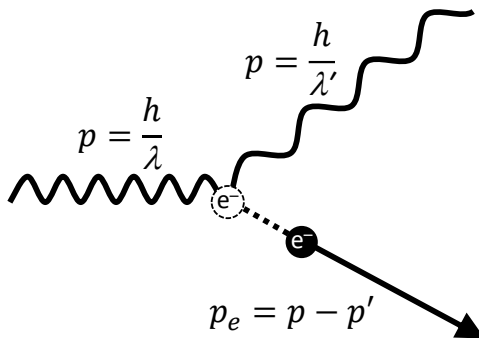
$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta. \quad (4.28)$$

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

$$h^2 f^2 + h^2 f'^2 - 2h^2 f f' \cos \theta = (hf + m_e c^2 - hf')^2 - m_e^2 c^4. \quad (4.29)$$



18. ábra. A Compton-szórás differenciális hatáskeresztmetszete ($1/r_0^2$ faktorialal normálva, itt r_0 a klasszikus elektronsugár) a bejövő foton energiájának függvényében. Az energia az elektron nyugalmi energiájával normálva szerepel itt, különféle $\xi = hf/m_e c^2$ értékek esetére, ahol f a bejövő hullám frekvenciája. Ha $\xi \rightarrow 0$, visszakapjuk a Thomson-szórás formulájának megfelelő alakot (ezt mutatja a piros, folytonos görbe).



19. ábra. A Compton-szórás kinematikája

Innen pedig már megadható a módosult frekvencia, hullámhossz vagy energia:

$$hf' = \frac{hf}{1 + \frac{hf}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} = \frac{hf}{1 + \xi (1 - \cos \theta)}, \quad (4.30)$$

$$\frac{E'}{E} = \frac{f'}{f} = \frac{1}{1 + \xi (1 - \cos \theta)}, \quad (4.31)$$

$$\lambda' = \lambda + \lambda \cdot (1 - \cos \theta), \quad (4.32)$$

ahol bevezettük a $\xi = hf/m_e c^2$ hányadost. Ezt a szögfüggést mutatja a 20. ábra is. A fentieket másképp is kifejezhetjük:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) = 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (4.33)$$

ahol bevezettük a $\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,4$ pm a Compton-hullámhosszat, amellyel $r_e = \alpha\lambda_C/2\pi$ a klasszikus elektronsugár.

Vegyük észre, hogy a levezetés során kihasználtuk, hogy a foton energiája és impulzusa $E = pc$ módon függ össze, amely nulla tömegű, fénysebességű részecskét jelent. Említsük még meg, hogy az elektron pont részecske abban az értelemben, hogy nagyenergiás szórás kísérletekben nulla méretűnek tekinthető. Ennek ellenére a Compton-hullámhossz az elektron egyfajta méretskálája: ha ennél kisebb tartományra próbálunk egy elektront kényszeríteni, akkor ez (a későbbi fejezetekben tárgyalt okokból) olyan nagy energiát igényel, hogy elektron-positron párok jelennek meg – ezért sem gondolhatunk az elektronra fekete lyukként.¹³

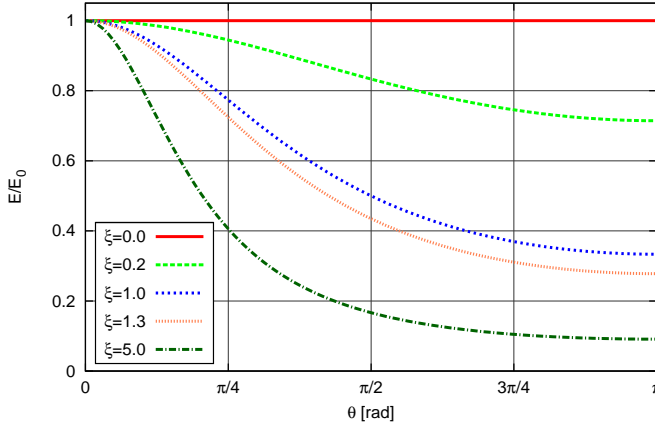
Érdeemes észrevenni, hogy $\theta = 0$ esetén a hullámhossz és a frekvencia is változatlan, az így továbbhaladó foton nem adott át energiát vagy impulzust az elektronnak. Ha $hf \ll m_e c^2$ akkor $\lambda' \approx \lambda$, tehát alacsony energiájú fotonok esetén nincs hullámhossz-változás (persze az egész gondolat csak szabad elektronokra érvényes, tehát olyan energiákra, ahol az elektron már szabadnak tekinthető). Nagy energiás fotonra (azaz a $hf \gg m_e c^2$ feltétel mellett) $hf' \approx m_e c^2 / (1 - \cos \theta)$ adódik, azaz 90 fokos szórás esetén kb. 511 keV, míg visszaszórás (180 fok) esetén 255,5 keV a szórt energia.

Kis kiegészítésként érdemes megjegyezni, hogy numerikusan milyen kapcsolatban áll egymással a fotonok energiája és hullámhossza. Mivel $E = hf = \hbar\omega$ és $\lambda = 2\pi c/\omega = 2\pi\hbar c/E$, így 1 eV energia az $\hbar c = 197$ MeV·fm = 197 eV·nm, illetve $hc = 1240$ eV·nm összefüggés miatt $\lambda = 1240$ nm hullámhosszat jelent.

4.4.3. A Klein–Nishina-formula

Vizsgáljuk meg ezután a hatáskeresztmetszetet! 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-**

¹³ Az elektron Schwarzschild-sugara 10^{-57} m nagyságrendű, ennél még a Planck-skála is 20 nagyságrenddel nagyobb; de érdekes kiszámítani a forgó és/vagy töltött fekete lyukakra vonatkozó Reissner–Nordström-, illetve Kerr–Newman-metrikákban is ugyanezt, az itt adódó sugarak lényegesen nagyobbak, de még mindig kisebbek a Compton-hullámhossznál, bár utóbbi már csak egy nagyságrenddel. A részletek tekintetében lásd az Grav. Cosmol. 14 (2008) 109 [arXiv:hep-th/0507109] publikációt.



20. ábra. A Compton-szórt foton energiamódosulása (E/E_0) a szórási szög (θ) függvényében, különféle $\xi = E/m_e c^2$ energiahányadosok esetére

formula adja meg. Ez így írható fel:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (P + P^3 - P^2 \sin^2 \theta), \text{ ahol } P = \frac{hf'}{hf} = \frac{1}{1 + \xi(1 - \cos \theta)}, \quad (4.34)$$

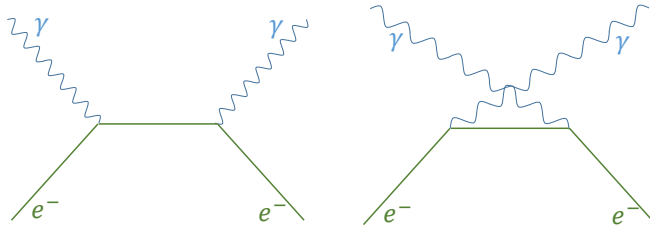
ahol továbbra is $\xi = hf/m_e c^2$. Látható, hogy $\theta = 0$ esetén (mivel ekkor $P = 1$) a hatáskeresztmetszet r_e^2 értéket vesz fel, míg $\theta = \pi$ esetén ennél kisebbet, ami a $\pi/2$ körül aszimmetriát mutatja. Egyedül $\xi = 0$ esetén kapunk szimmetriát, ekkor a Thomson-alakot kapjuk vissza. Ezen formula szögfüggését illusztrálja a 18. ábra. A teljes hatáskeresztmetszetre igen bonyolult kifejezés adódik, amelynek két határesetét tudjuk egyszerűen megadni:

$$\sigma_{\text{Compton}} = \begin{cases} \sigma_{\text{Thomson}} (1 - 2\xi + \frac{26}{5}\xi^2), & \text{ha } \xi \ll 1, \\ \frac{3}{8}\sigma_{\text{Thomson}} \frac{1}{\xi} (\ln 2x + \frac{1}{2}), & \text{ha } \xi \gg 1, \end{cases} \quad (4.35)$$

ahol $\sigma_{\text{Thomson}} = 8\pi r_e^2/3$, ahogy fentebb részleteztük. Ezt a hatáskeresztmetszetet majd a kvantum-elektrodinamikai Feynman-gráfok módszerének segítségével lehet egyszerűen kiszámítani. A 21. ábrán a kvantumtérelméleti számításokban használatos úgynevezett Feynman-diagramokat is megadjuk illusztrációként. A 21. ábrán nem szerepel, de sokkal bonyolultabb folyamatok is vezethetnek Compton-szóráshoz: az elektron például kibocsáthat egy fotont, amely párkeltéssel elektron-positron-párt hozhat létre, és így tovább – minden ilyen folyamat járulékát össze kell adni a hatáskeresztmetszet kiszámolásához.

Gyakorlófeladat

Adott egy 1 mm-es céltárgyunk, melyben az elektronok számsűrűsége 10^{28} db/m³. Ezen 1 keV-es fotonok szóródnak Compton-effektussal (többek között). Mekkora a 90 fokban szórt fotonok hullámhossza? És az eredeti nyaláb hányadrésze megy 90 fok körül egy 0,1 sr térszögű detektorba?



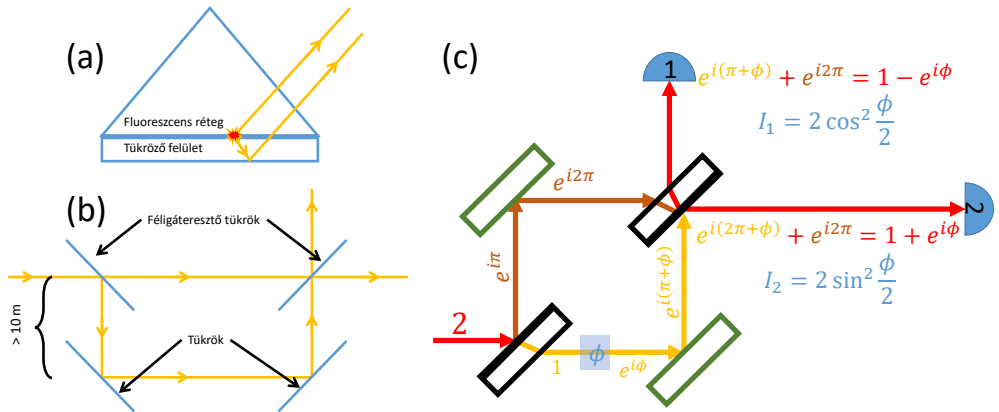
21. ábra. A Compton-hatás keresztmetszetre vonatkozó kvantumtérelméleti számoláshoz szükséges Feynman-diagrammok közül kettő. Az ábrákon balról jobbra az idő előrehaladása szerepel, így tehát azt adják meg, hogy melyik részecske mivel került kölcsönhatásba, és milyen sorrendben, azaz mi a kölcsönhatások „topológiája”.

4.5. Kísérletek a fény természetének megállapítására

A fentiek után még mindig fennáll a kérdés, hogy hogyan fér össze a fény részecske- és hullámképe. Érdekes próbálkozás volt a kettő összehangolására Einstein túsugárzás-elmélete, amelyben a foton kis térszögű hullámvonulat, és így a részecske- és a hullámkép összekapcsolható. Ezt cáfolta **Selényi Pál kísérlete** (22.a ábra, illetve Ann. d. Phys. 35 [1911] 444), amely megmutatta, hogy nagy szögek esetén is van interferencia (90 foknál nagyobb nyílásszög esetén is). Azt bizonyította, hogy a fény elemi sugárzása ugyanolyan gömbhullám, mint amely 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.

A kérdés további vizsgálata céljából **Jánossy Lajos** (az ELTE Atomfizikai Tanszékének első vezetője) Náray Zsolttal együtt tükrökísérletet végzett 1957-ben (22.b ábra, illetve Acta Phys. Hung. 7 [1957] 403 és Nuovo Cimento Suppl. 9 [1958] 588), amelyben félig áteresztő tükrökkel egy fénysugarat önmagával interferáltatjuk. A kísérletben akkor is interferenciát találtak, ha a rendszerben átlagosan csak egy foton van, úgy, hogy a detektor két része között több méter távolság is lehet. Tehát noha a fény legkisebb kvantumja a foton (ahogy azt az előző szakaszokban írtak bizonyítják), mégis egyetlen foton is interferálhat „önmagával”, ha két lehetőség áll előtte. Emiatt szerencsésebb azt mondanunk, hogy valójában a lehetőségek interferálnak, nem a részecskék. Fontos ugyanakkor, hogy ha az ilyen elrendezésben megfigyeljük (valamilyen módon mérjük), hogy az interferométer melyik ágán halad a foton, akkor eltűnik az interferencia: a foton tisztán részecskeként viselkedik.

Az előzőekhez hasonló, „egyfotonos” kísérletet végzett el Aspect egy **Mach–Zehnder-interferométerrel** (lásd a 22.c ábrán), de sokkal nagyobb precizitással; a következtetés hasonló volt – a részleteket lásd az Europhys. Lett. 1, 173 (1986) publikációban. Érdekes felvetni a kérdést, hogy ha a foton két útja kioltja egymást, akkor hova tűnik a foton eredeti energiája: 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 (azaz rácsfelzínről tükrözős) interferencia esetén pedig valamelyik másik irányt. Érdekes végiggondolni, hogy egy interferenciakísérletben az egyes nyalábok fázisa hogyan változik (az útkülönbségtől eltekintve): optikailag sűrűbb közegről visszaverődve 180 fokos fázistolás jelenik meg. Így a féligáteresztő tükrök



22. ábra. A Selényi-kísérlet (a), Jánossy tükrök-kísérlete (b) és egy Mach-Zehnder-interferométer (c). Utóbbi esetében fontos figyelembe venni, hogy tükrök esetén visszaverődésnél 180° fok fázistolás következik be, és ezzel világosan látható a kioltások és erősítések rendszere. A Mach-Zehnder-interferométer egyik útjába valamilyen további ϕ fázistolást létrehozó objektumot vagy hatást elhelyezve a két ágon észlelt intenzitás $2 \sin^2 \phi/2$ és $2 \cos^2 \phi/2$ lesz. Ugyanez az ábra mutatja a Wheeler-féle (és Jaques és munkatársai által végrehajtott) késleltetett választásos kísérletet – itt a jobb fent lévő féligáteresztő tükrő előtt egy döntéstől függően megmérjük azt, hogy a foton melyik ágon ment.

„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 az egyesülő nyalábok az egyik irányban erősítik, a másik irányban gyengítik egymást. Konkrétabban is végigkövethetjük az egyes nyalábokat. Legyen egy (valamilyen egységekben) $A = 2$ amplitúdójú bejövő hullámunk, amelynek intenzitása $I = |A|^2 = 4$. Történjen az „alsó” ágon ϕ fázistolás (például valamilyen anyagon való áthaladás következtében). Ekkor első osztás után a amplitúdók

$$A_1 = e^{i\pi}, \quad (4.36)$$

$$A_2 = 1 \quad (4.37)$$

lesznek. A visszaverődések (és az alsó ágon a fázistolás) után ezek

$$A_1 = e^{i2\pi}, \quad (4.38)$$

$$A_2 = e^{i(\pi+\phi)} \quad (4.39)$$

módon alakulnak, majd az újabb féligáteresztő tükrő után az egyesített nyaláboknál

$$A_1 = e^{i(\pi+\phi)} + e^{i2\pi} = 1 - e^{i\phi}, \quad (4.40)$$

$$A_2 = e^{i(2\pi+\phi)} + e^{i2\pi} = 1 + e^{i\phi} \quad (4.41)$$

amplitúdók alakulnak ki, azaz $A_1 + A_2 = 2$ tetszőleges ϕ esetén, tehát az „amplitúdó-

megmaradás” teljesül. Végül az intenzitások:

$$I_1 = |A_1|^2 = 4 \sin^2 \frac{\phi}{2}, \quad (4.42)$$

$$I_2 = |A_2|^2 = 4 \cos^2 \frac{\phi}{2}, \quad (4.43)$$

azaz $I = I_1 + I_2$ is teljesül. Mindezt a 22.c ábra illusztrálja.

Erre a fázistolásos kísérletre épül a Found. Phys. 23, 987 (1993) publikációban leírt **Elitzur–Vaidman-féle** gondolatkísérlet, amelyben egy tárgy jelenlétét azzal való interakció nélkül határozhatjuk meg (ezt a szerzők bombák tesztelésének példájával teszik frappánsná: úgy kell egy bombáról csakis külső vizsgálattal eldönteni, hogy működik-e, azaz felrobbanna-e, ha akarnánk, hogy közben ne robbanjon fel; klasszikusan ez lehetetlen feladat). Menjen át a rendszeren egyetlen foton, ennek 50-50% eséllyel bármelyik ág lehet a tényleges útja. A ϕ fázistolás helyén legyen vagy bomba (ami olyan érzékeny, hogy egyetlen foton is működésbe hozza), vagy „vaktöltény” (ami úgy néz ki, mint egy bomba, de csak tükör). A bomba fotonnal való kölcsönhatás esetén robban, és így lokalizálja a foton, így az interferencia lehetősége megszűnik. Ha viszont „vaktöltényünk” van, akkor fennmarad az interferencia: ráadásul $\phi = 0$, és így $I_1 = 0$. Emiatt ilyen esetben mindenképpen a 22.c ábra 1. számú detektora jelez. Ha bomba volt a ϕ helyen, akkor 50% eséllyel felrobban – ha a foton az alsó ágon ment. De ekkor is lehet, hogy a foton a felső ágon megy: ekkor viszont 25%-25% eséllyel az 1. vagy a 2. detektor szólal meg – a bomba útjának választása már nem interferál a másik út választásának lehetőségével. Ha tehát a 2. detektor jelez, ez csak úgy történhetett, ha volt bomba, ami felrobbanhatott volna, de nem tette. Ha az 1. detektor jelzett, akkor megismételhetjük a kísérletet, amíg vagy bombarobbanás nem történik, vagy a 2. detektor nem jelez. Így határesetben 50% eséllyel robbantás nélkül is meg tudjuk állapítani, hogy bomba volt-e a rendszerben, vagy csak vaktöltény. Ehhez a gondolatkísérletre hajazó valódi kísérlet Zeilinger és csoportja jóvoltából a gyakorlatban is végrehajtottak, és még hatékonyabb észlelési lehetőségre is javaslatot tettek (az egyes ágakon sok kört megtevő fotonokkal); a részleteket lásd a Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 4725 publikációban.

Fontos továbbá a **Wheeler-féle késleltetett választásos kísérlet** is. Ehhez egy igen nagy karhosszúságú interferométerre van szükség, illetve egy kapcsolóra, amely kiveszi vagy beteszi a második nyálábosztót („nyalábegyesítőt”, amely a 22.c ábra interferométerének jobb felső sarkában látható). Azonban hogy bent van-e ez a második féligáteresztő tükör, azt csak azután döntjük el (véletlenszerűen), hogy a foton áthaladt az első féligáteresztő tükrön. Ehhez természetesen még nagy karhosszúság mellett is igen gyors véletlenszám-generátorra van szükség. Wheeler eredeti gondolatmenete a „*Quantum Theory and Measurement*” (Princeton University Press, 1983) című kötet 182–213. oldalain jelent meg, és ebben kvazárok gravitációsan lencsézett képeről ír, amelynél a gravitációs lencse hozza létre a nyálábosztót. A kísérletet Vincent Jaques és munkatársai 2007-ben elvégezték (ld a Science **315** [2007] 966 [arXiv:quant-ph/0610241] cikket), itt hagyományos Mach–Zehnder-interferométert használtak. Az eredmény az volt, hogy akármilyen későn döntünk is a második féligáteresztő tükrőről, az interferencia eltűnik. Ez egyúttal azt is jelenti, hogy a foton (a fénysebességet, az interferométer karhosszúságát és a döntési időt figyelembe véve) már elhagyta az első nyálábosztó tükröt, mikor a döntés megszületett. Ez azt jelenti, hogy a második nyálábosztó bekerülését jelentő döntés esetén a foton valójában „visszamenőleg” kerül az egyik ágra, vagy éppen „visszamenőleg” halad mindkét ágon, interferenciát létrehozandó. Jaques és munkatársai a 22.c

ábrán látható ϕ fázistolást is beiktatták, és azt látták, hogy késleltetett döntés esetén is az a helyzet, hogy csak a két nyalábosztós eseteket alapul véve a ϕ értékétől függő interferencia alakul ki, azaz a fenti ágon a fotonok $\cos^2(\phi/2)$ hányada, az alsó ágon $\sin^2(\phi/2)$ hányada jelenik meg, míg csak a második nyalábosztó nélkül beérkező fotonokat véve az interferencia eltűnik (azaz az interferométer két ágán a fotonok azonos hányada jelenik meg, függetlenül ϕ értékétől). Igaz ez annak ellenére, hogy a foton az első nyalábosztó elhagyásakor még nem tudta, hogy lesz-e második, azaz csak az egyik karon kell-e haladnia, vagy interferálni kell-e a két ágon haladás lehetőségeinek. Mindez klasszikusan értelmezhetetlen, azaz radikálisan új felfogásra és gyökeresen más fizikai elméletre van szükség.

Végezetül érdemes megemlíteni azt is, hogy noha a fenti kísérletekben mindig egyetlen foton interferált önmagával (vagyis inkább a lehetőségek interferáltak), két vagy több foton interferenciája is bekövetkezhet, Bose–Einstein-korrelációk esetében. Ez azonban túlmutat jelen kurzus anyagán.

4.6. Az elektromágneses tér spektruma

A XIX. század közepére világos volt, hogy egy, a környezeténél melegebb test több hő-sugárzást bocsát ki, mint amennyit elnyel, míg a környezeténél hidegebb test többet nyel el, mint amennyit kisugároz. Ez azt jelentette tehát, hogy a hőszugárzás az a mechanizmus, amellyel a testek vákuumban is a környezetükkel hőmérsékleti egyensúlyba kerülhetnek. A hőmérsékleti sugárzásra az első fontos törvényt 1859-ben Kirchhoff írta le. Eszerint E_λ , a környezetével egyensúlyban lévő test hullámhosszegységre vetített energiasűrűsége λ hullámhosszon:

$$E_\lambda = A_\lambda K_\lambda(T), \quad (4.44)$$

ahol A_λ a testre jellemző állandó, míg $K_\lambda(T)$ csak a hőmérséklettől függő állandó, amely független a test alakjától vagy hőmérsékletétől. Bevezette a teljesen elnyelő „feketetest” fogalmát, amelyre $A_\lambda = 1$. Eszerint tehát $K_\lambda(T)$ a feketetest által kisugárzott energiasűrűség. Általában ehelyett a spektrális sűrűséget vesszük, amely az időegységre, felületegységre, térszögegységre és hullámhosszegységre (vagy frekvenciaegységre) vetített energia, I_λ vagy I_ν . Stefan 1879-ben és diákja, Boltzmann 1884-ben (Tyndall mérései alapján) azt állította, hogy a teljes kisugárzott energia a hőmérséklet negyedik hatványával arányos, azaz

$$\int K_\lambda(T) d\lambda \propto T^4. \quad (4.45)$$

(Ezt az eredményre ezen szakasz végén még visszatérünk.) Wien és Paschen 1885-ben ebből és kísérleti adatokból levezették, hogy a sugárzás spektruma $\lambda^{-5} \exp(-a/\lambda T)$ alakot kell hogy öltösson – ez azonban kis hullámhosszakra téves (a mérésekkel nem egyező) eredményt adott.

Noha ekkor még nem volt világos, hogy miből áll a hőmérsékleti sugárzás, a spektrumára (spektrális sűrűségére) ugyanakkor többféle jóslat is született. Ezeket (némielg

anakronisztikusan) a h Planck-állandóval így írhatjuk fel:

$$I_\lambda(\lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} e^{-\frac{hc}{\lambda kT}} \quad (\text{Wien, 1896}), \quad (4.46)$$

$$I_\lambda(\lambda) = \frac{2ckT}{\lambda^4} \quad (\text{Rayleigh-Jeans, 1900}), \quad (4.47)$$

$$I_\lambda(\lambda) = \frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \quad (\text{Planck, 1900}). \quad (4.48)$$

Ezeket az eloszlásokat mutatja a 2. fejezet 7. ábrája is.

4.6.1. A sugárzási tér termodinamikája

Termodinamikai megfontolások alapján könnyen láthatjuk, hogyan adódik az első két jóslat. Mint az ismert, a hőmérséklet az energia entrópia szerinti deriváltja, ennek inverzét véve

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}, \text{ azaz } \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = \frac{\partial}{\partial E} \frac{1}{T}. \quad (4.49)$$

Mivel a XIX. század végére üregrezonátor sugárzásából a

$$\partial_E^2 S = -\frac{C_1}{E} \quad (4.50)$$

mérési eredmény volt ismert (ahol C_1 a mérésekből adódó paraméter), ebből

$$\partial_E \frac{1}{T} = -\frac{C_1}{E}, \text{ azaz} \quad (4.51)$$

$$E = E_0 \exp\left(-\frac{1}{C_1 T}\right) \quad (4.52)$$

eredeztethető, a Wien-törvénynek megfelelően. Ugyanakkor újabb mérési eredmények (Lummer és Pringsheim, 1900)

$$\partial_E^2 S = -\frac{C_2}{E^2} \quad (4.53)$$

összefüggést javasoltak, amelyből viszont $\partial_E S = 1/T$ behelyettesítésével

$$E = C_2 T \quad (4.54)$$

következik, a Rayleigh–Jeans-törvénynek megfelelően. Planck ezt a két összefüggést házasította, feltéve, hogy

$$\partial_E^2 S = -\frac{C_3}{E(\beta + E)} \quad (4.55)$$

a helyes összefüggés (amely interpolál a két fenti eredmény között). Ebből pedig

$$E = \frac{\beta}{\exp\left(\frac{\beta}{C_3 T}\right) - 1} \quad (4.56)$$

adódik. A XIX. század végén, amikor ezeket a törvényeket levezették, alapvetően termodinamikai összefüggésekre építettek, többek között a „frissen bevezetett” entrópiára vonatkozó összefüggésekkel operálva. Ehelyett a következőkben egyszerűbb formában is vizsgáljuk meg, hogyan vezethetőek le a fentiek.

4.6.2. A Rayleigh–Jeans-törvény

Induljunk ki a Kirchhoff által bevezetett feketetest fogalmából. Legyen ez a feketetest egy konstans T hőmérsékletű üreg nyílása, és legyen az üreg fala egyensúlyban az üre-
gen belül lévő sugárzással. Tegyük fel, hogy a T hőmérsékletű fallal egyensúlyban lévő
sugárzási tér állóhullámok szuperpozíciójaként írható le. Van ekkor tehát egy L oldal-
hosszúságú, $V = L^3$ térfogatú üregünk. Ebben a $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ hullámszámvektort
bevezetve az állóhullámok

$$A(t) \sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z \quad (4.57)$$

alakúak, ahol

$$k_i L = n_i \pi, \quad (4.58)$$

azaz L hosszúságon éppen félegész hullámok jönnek létre. A hullámegyenlet elárulja
ezen hullámok (kör)frekvenciáját is: ha $A(t) = A_0 \sin \omega t$, akkor $\omega = c|\mathbf{k}|$, azaz

$$\omega^2 = c^2 \mathbf{k}^2 = \frac{c^2 \pi^2}{L^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (4.59)$$

Legyen a $[0, \omega]$ tartományban lévő módusok száma $N(\omega)$, és $g(\omega)$ a módusok sűrűsége.
Ezeket az

$$N = \int g, \quad \text{másként írva az } N(\omega) = \int_0^\omega g(\omega') d\omega' \quad (4.60)$$

összefüggés köti össze. Adott ω körfrekvencia alatt azon módusok „férnek el”, amelyekre

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \leq \frac{\omega^2 L^2}{c^2 \pi^2}. \quad (4.61)$$

Ez tehát a módusok terében egy $R = \omega L / c\pi$ sugarú gömb, amelynek (az $n_1 > 0$
pozitív nyolcadgömbben) térfogata egyúttal a benne lévő egész számhármassok számát
is megadja:

$$N(\omega) = \frac{1}{8} \frac{4R^3 \pi}{3} = \frac{\omega^3 V}{6c^3 \pi^2} = \frac{4\pi \nu^3 V}{3c^3} = \frac{4\pi V}{3\lambda^3}, \quad (4.62)$$

ahol az eredményt a ν frekvenciával és a λ hullámhosszal is kifejeztük. Ebből deriválással
a g sűrűség is megkapható:

$$g(\omega) = \frac{\omega^2 V}{2c^3 \pi^2}. \quad (4.63)$$

Ezután vegyük figyelembe azt a korrekciót is, hogy az elektromágneses sugárzás két
különböző polaritással is rendelkezhet – azaz szorozzuk meg g -t kettővel, majd váltsuk
át ν - vagy λ -függő eloszlásra:

$$g(\omega) d\omega = \frac{\omega^2}{c^3 \pi^2} V d\omega, \quad (4.64)$$

$$g(\nu) d\nu = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} V d\nu, \quad (4.65)$$

$$g(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^4} V d\lambda. \quad (4.66)$$

Vegyük észre itt, hogy differenciális eloszlás esetén például a $\omega \rightarrow \nu$ áttéréshez az $\omega = 2\pi\nu$ átváltáson kívül a $d\omega/d\nu = 2\pi$ faktorial („Jacobi-determinánssal”) való szorzásra is szükség van; ehhez hasonlóan a $\nu \rightarrow \lambda$ áttéréshez a $d\nu/d\lambda = c/\lambda^2$ faktort kell alkalmazunk. Tegyük fel most az ekvipartíció tételét kiterjesztve, hogy minden oszcillátormódusra kT jut (tehát a szokásos $kT/2$ kétszerese). Ennek az a magyarázata, hogy egy oszcillátornak két „szabadsági foka” van (a hely és a sebesség), ahogy az már a XIX. század végén közismert volt – de gondolhatunk itt az elektromos és a mágneses térre, mint két módusra is (ugyanis ilyenkor a Lagrange-függvényben, avagy az energia kifejezésében szereplő négyzetes tagok számítanak). Ekkor tehát $\langle E \rangle = \varepsilon = kT$ és $E = \varepsilon g$ miatt a frekvenciára vetített energiasűrűség

$$E(\nu) = g(\nu)kT = (8\pi/c^3)\nu^2kTV. \quad (4.67)$$

A térfogat- és frekvenciaegységre vetített energiasűrűség pedig:

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kTd\nu, \text{ avagy } \rho(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}d\lambda. \quad (4.68)$$

Ez a Rayleigh–Jeans-törvény tulajdonképpen, ha 4π térszögegységre vetítjük, és a sugárzás c sebességével szorzunk, hogy térfogategységre eső energiasűrűségből idő- és felületegységre eső teljesítménysűrűséget (spektrálsűrűséget) kapjunk:

$$I(\nu) = \frac{c}{4\pi}\rho(\nu) = \frac{2\nu^2kT}{c^2}, \text{ avagy } I(\lambda) = \frac{2ckT}{\lambda^4}, \quad (4.69)$$

ahol ismét a $d\nu/d\lambda = c/\lambda^2$ faktorial szoroztunk a λ -ra való áttéréskor.

Ebből a spektrálsűrűségből azonban $\int \nu^{-4}d\nu = \infty$ miatt, ahogy korábban is említettük, végtelen mennyiségű összes energia adódik. Ezt egyébként az $\lim_{\nu \rightarrow \infty} N(\nu) = \infty$ összefüggés is mutatja (amelyből ρ -t is kiszámoltuk). Ez azt jelenti, hogy noha a levezetés logikusnak tűnik, és nagy hullámhosszakra helyes eredményt is ad, kis hullámhosszokra nem lehet helyes.

4.6.3. A Planck-törvény

Nézzük meg, hogy az előzőeket hogyan kell módosítani, hogy a helyes Planck-törvényre jussunk. A hagyományos Lorentznek tulajdonított levezetés nyomán vizsgáljuk meg, hogy mi adódik a kvantumelméletből az egyes módusok energiájára: az $\langle E \rangle = \varepsilon = kT$ feltevésből ugyanis helytelen eredményre jutottunk. Az oszcillátorokra (a „rég kvantumelméletben”) korábban is levezetett kvantumfeltételből induljunk ki, eszerint adott frekvenciájú módusban $E_n = n\hbar\omega = nh\nu$ energiájú állapotok lehetnek. A Boltzmann-féle statisztikát itt is alkalmazva arra jutunk, hogy egy energiaszint betöltöttsége

$$N_n = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_n), \quad (4.70)$$

ahol

$$Z = \sum_n \exp(-\beta E_n) \quad (4.71)$$

az állapotösszeg. A Maxwell–Boltzmann-eloszlás levezetéséhez hasonlóan itt is levezethetjük, hogy $\beta = 1/kT$. Szemben a 2.5. szakaszban mondottakkal, vegyük itt most

észre, hogy ha W az adott makroállapotot (betöltöttségeket) megvalósító mikroállapotok száma, akkor a fentiekből

$$d \ln W = \beta dE + (\text{további tagok}) \quad (4.72)$$

következik, ahonnan $S = k \ln W$ és $\partial_S E = T$ miatt $\beta = 1/kT$ közvetlenül „leolvasható”. Ezek után $E_n = nh\nu$ felhasználásával az előző egyenletből

$$Z = \frac{1}{1 - e^{-h\nu/kT}} \quad (4.73)$$

adódik, és innen

$$N_n = e^{-nh\nu/kT} \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right), \text{ azaz} \quad (4.74)$$

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n N_n = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{hc/\lambda}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (4.75)$$

az átlagos energia. Ha most a Rayleigh–Jeans-törvény levezetésénél használt $E(\nu) = g(\nu)\langle E \rangle$ kifejezést alkalmazunk, akkor a $\rho = E/V$ energiasűrűsége

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu, \text{ avagy} \quad (4.76)$$

$$\rho(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} d\lambda \quad (4.77)$$

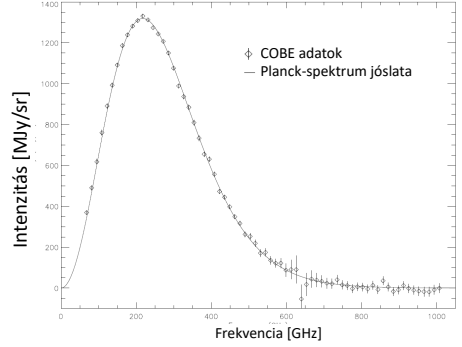
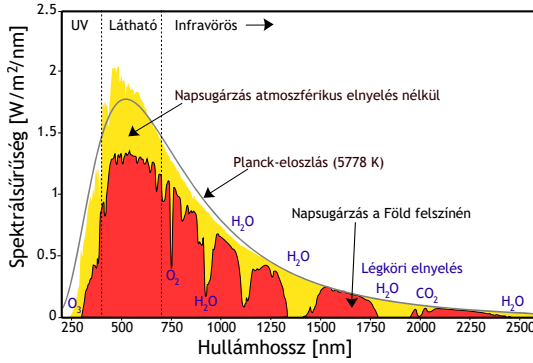
amelyből c -vel és 4π térszöggel szorzással adódik a spektrális sűrűség

$$I_\nu(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu, \text{ avagy} \quad (4.78)$$

$$I_\lambda(\lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} d\lambda. \quad (4.79)$$

Ez a Planck-törvény, amelyhez fel kellett tennünk, hogy az oszcillátorok energiája csak diszkrét értékeket vehet fel. A levezetés során ezenkívül azt használtuk ki, hogy az oszcillátorok frekvenciája $\nu = c^2\pi/2L^2(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$ lehetséges értékeket vesz fel, később pedig azt, hogy egy ilyen frekvenciájú állapot $nh\nu$ energiaadagokat vehet fel, és a legvalószínűbb eloszlás mellett az átlagos energiája $h\nu/(\exp(h\nu/kT) - 1)$.

Fontos megemlíteni, hogy ilyen spektrumú sugárzást nagyon nehéz előállítani, ugyanis a sugárzás tartalmazni fogja az „üreg” falának atomjainak spektrumát is. A Nap elektromágneses sugárzásának spektruma nagyon különbözik ettől, míg a kozmikus mikrohullámú háttérsugárzás elég pontosan egy 2,726 K hőmérsékletű Planck-görbét követ, ahogy az a 23. ábrán is látható. Ennek magyarázata az, hogy az ősrobbanás után kb. 230 ezer évvel az Univerzum kb. 3000 K hőmérsékletűre hűlt, és ekkor megszűnt a termikus egyensúly a sugárzás és az anyag között, a protonok és az elektronok rekombináltak, hidrogénatomokat létrehozva. A 3000 K hőmérsékletű sugárzás így háborítatlanul tölthette ki a teret, és terjedhetett minden irányban. A tér tágulása miatt ma ezt jelentős vöröseltolódással észleljük, 2,726 K hőmérsékletű Planck-görbének megfelelően. A kozmikus mikrohullámú háttérsugárzás Planck-jóslattól való eltérését is részletesen vizsgálják, kozmológiai modellek jóslatait lehet ezzel tesztelni.



23. ábra. A Nap spektruma az atmoszféra hatása előtt és után, egy Planck-spektrummal összehasonlítva (balra; az ábra forrása a Wikimedia Commons), illetve a kozmikus mikrohullámú sugárzás COBE által mért spektruma, a WMAP és a COBE/FIRAS sebesség- és kalibrációs adatok segítségével kiszámolt Planck-spektrummal (jobbra; az ábra forrása: ApJ.707:916,2009). Míg előbbi csak nagy vonalakban követi a kb. 5800 K hőmérsékletnek megfelelő eloszlást, utóbbi igen pontosan 2,726 K hőmérsékletnek felel meg.

A sugárzás felület-, idő- és térszögegységre vetített intenzitását a frekvenciákra való integrálással kaphatjuk meg, $y = h\nu/kT$ (azaz $d\nu = kTdy/h$) helyettesítéssel:

$$\int I_\nu(\nu)d\nu = \int \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu = \frac{2k^4T^4}{h^3c^2} \int y^3 \frac{1}{e^y - 1} dy = \frac{2k^4\pi^4T^4}{15c^2h^3}, \quad (4.80)$$

ahol kihasználtuk, hogy az y -ra vett integrál értéke $\pi^4/15$. Ha a térszögére is integrálunk, akkor kiderül, hogy még egy π faktor is adódik, a térszögegység negyede (ugyanis egy feles faktor adódik abból, hogy a sugárzás csak az egyik térfélbe megy, illetve egy másik feles faktor abból, hogy a beeső sugárzás merőleges értékét kell vennünk). Ezt úgy is megérthetjük, ha észrevesszük, hogy egy adott felületről az adott irányba érkező sugárzás a kettő szögének koszinuszának arányában csökken (a Lambert-féle kibocsátási törvénynek megfelelően). Ekkor a $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ térszögelem egy további $\cos\theta$ faktorial szorozódik, és így az integrálási mérték a következő lesz:

$$\cos\theta \sin\theta d\theta d\phi = \sin 2\theta d\theta d\phi = \frac{1}{4} \sin\vartheta d\vartheta d\phi, \quad (4.81)$$

ahol bevezettük a $\vartheta = 2\theta$ változót. Mivel az integrálás a $\theta = 0 \dots \pi/2$ tartományon volt (a féltér miatt), ez most $\vartheta = 0 \dots \pi$ lesz, és így formálisan a hagyományos térszögintegrált kaptuk vissza, egy egynegyed faktorial szorozva. Így megkapjuk a Stefan–Boltzmann-törvényt:

$$j = \sigma T^4, \quad \text{ahol } \sigma = \frac{2k^4\pi^5}{15c^2h^3}. \quad (4.82)$$

Gyakorlófeladat

Adott a Nap 1,5 millió kilométeres átmérője, illetve 5800 K felszíni hőmérséklete. Ha feketetest-sugárzással bocsát ki energiát, akkor ez alapján ez hány joule másodpercenként? És ebből mennyi érkezik a Naptól 150 millió kilométerre lévő, 6400 km sugarú Földre? Hogy viszonyul ez az emberiség 18 TW energiaigényéhez? A feladathoz felhasználhatjuk, hogy $k_B \approx 1/11600$ eV/K, azaz 5800 K 0,5 eV-nak felel meg; vagy közvetlenül a Stefan–Boltzmann-állandó értékét: $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ J/(m²sK⁴).

4.7. A foton impulzusa, Doppler-hűtés és Mössbauer-jelenség

Érdeemes megemlíteni, hogy a foton impulzusa, ahogy a fény nyomásán keresztül látható, közvetlenül a Maxwell-egyenletekből is levezethető. Jól ismert, és fentebb is többször felhasználtuk, hogy adott elektromos (\mathbf{E}) és mágneses (\mathbf{B}) tér esetén a Poynting-vektor $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{B}/\mu_0$ lesz, ahol μ_0 a vákuum mágneses permeabilitásának állandója, amely atom- és kvantumfizikai egységekben $\mu_0 = 1/(c^2\epsilon_0) = 2\alpha h/(e^2c)$. A Poynting-vektor az energiaáramlás erősségét jelenti, azaz az adott felületegységen időegységként átáramló energiát. A Lagrange-felírásban a q^k kanonikus koordináták a négyespotenciál komponensei, és az ezekből kifejezett \mathcal{L} Lagrange-függvényéből (vagy inkább Lagrange-sűrűségéből) adódik a Noether-tétel segítségével

$$T^{ij} = \sum_k \partial_i q^k \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_j q^k} - \delta^{ij} \mathcal{L} \quad (4.83)$$

energiaimpulzus-tenzor, és ennek kontinuitása ($\partial_i T^{ij} = 0$) adja az Euler-Lagrange-egyenleteket. Az energiaimpulzus-tenzor T^{i0} komponensei (a fénysebességgel osztva) éppen az **impulzussűrűséget** jelentik, a fénysebességgel szorozva pedig (szimmetrikus energiaimpulzus-tenzor esetén) az **energiaáram-sűrűséget**, azaz a Poynting-vektort:

$$p^i = \frac{T^{i0}}{c}, \quad \mathbf{p} = \epsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (\text{impulzussűrűség}), \quad (4.84)$$

$$S^i = cT^{i0} = c^2 p^i, \quad \mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (\text{energiaáram-sűrűség}), \quad (4.85)$$

$$u = T^{00} = |\mathbf{S}|/c = c|\mathbf{p}| = \frac{\epsilon_0}{2} (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) \quad (\text{energiasűrűség}). \quad (4.86)$$

Ebből közvetlenül is adódik, hogy az **impulzusáram nagysága** tehát megegyezik az **energiasűrűséggel**, ezért az időátlagolt Poynting-vektorból a **sugárzás által kifejtett nyomás** is kiszámolható: $p_{\text{nyomás}} = \langle |\mathbf{S}| \rangle / c$ (az energiasűrűség osztva a sugárzás sebességével), azaz az időegység alatt felületegységként elnyelt energia (energiafluxus) osztva a sebességgel. Ez a nyomás értelmezhető a **fotonok által átadott impulzusként** is, és ekkor jön ki a korábban is említett $p = E/c$ érték. Ez a relativitáselmélet értelmében a $p = \sqrt{E^2 - m^2 c^4} / c$ kifejezésből is adódik, a foton $m = 0$ tömege miatt. Ezen áttekintés után lássunk néhány jelenséget, amelyek mindezekre alapulnak.

A foton impulzusát használjuk ki a lézerrel történő **Doppler-hűtés** során. Ennek lényege, hogy egy adott sebességeloszlású (azaz hőmérsékletű) atomcsomagot két irányból lézerrel megvilágítanak úgy, hogy a lézer frekvenciája valamivel az atom hiperfonom

(lásd később) **gerjesztési energiája alá** van hangolva. A sugárzás hatása az atom hatáskeresztmetszetével lesz arányos, ami a rezonanciafrekvencián sok-sok nagyságrenddel nagyobb, mint egy kicsit is eltérő frekvencia esetén. Mivel itt a rezonanciafrekvencia alatt vagyunk, így a lézer nem ad át energiát az atomoknak, csak rugalmasan szóródhat, tehát nem növeli az átlagos hőmérsékletet. Ugyanakkor előfordulhat, hogy egy atom éppen a lézerrel szemben mozogva lép egy fotonnal kölcsönhatásba – ekkor a Dopplereffektus miatti **kékeltolódás** („blueshift”) éppen megnövelheti a foton látszólagos frekvenciáját annyira, hogy az atom gerjesztődhessen. Mivel az elnyelt foton impulzussal is rendelkezett, az atom **lelassulva** megy tovább. Később persze újra kibocsátja a foton, és ettől egy kis, oldalirányú impulzusra tesz szert, de számos egymás utáni elnyelés és kibocsátás után ez kiátlagolóódik, tehát az atom impulzusa lecsökken. Az eddig tárgyalt lézerrel egy irányban mozgó atomok az ellentétes irányú lézerrel kerülnek szembe, így mindkét irányban lassulnak az atomok. Ha a tér mindhárom irányában alkalmazunk egy-egy lézernyalábot, akkor végeredményben lecsökken a gáz hőmérséklete. Ekkor végeredményben a tér bármely irányában mozgó atomok egyfajta „súrlódást” éreznek, ezért ezt a módszert „optikai melasznak” is nevezik. Mivel a gerjesztési energiát legerjesztődéskor ki is sugározzák az atomok, ezért van egy minimális hőmérséklet, amely az itt leírt Doppler-hűtéssel elérhető:

$$T = \frac{\hbar\Gamma}{2k_{\text{Boltzmann}}}, \quad (4.87)$$

ahol Γ a színképvonalak természetes szélessége. Ez az érték tipikusan nagyságrendileg 10^{-3} K, de ez alá is lehet menni bizonyos továbbfejlesztett technikákkal, mint például a Sziszifusz-hűtés, ezeket azonban itt nem tárgyaljuk. Annyit megemlítenek, hogy ezekhez a lézerre merőleges irányban valahogy csapdázni is kell az atomokat, hogy az atomcsoomag egyben maradjon. Az ilyen csapdákat hívják magneto-optikai fogónak, amelyben két, egymással ellentétes irányú, cirkulárisan polarizált fénynyaláb és egy kifelé növekvő mágneses tér tartja egyben az atomcsomagot.

Ezenkívül érdemes megemlíteni a **Mössbauer-effektust** is, amely szintén a foton impulzusán alapul. Alapesetben egy atom által kibocsátott foton energiája valamivel kisebb, mint az átmenetben felszabadult energia: ez lecsökken az atom visszalökődésére fordított energiával, amelynek nagysága tipikusan jó közelítéssel

$$R = \frac{E^2}{2mc^2}, \quad (4.88)$$

ahol E a gerjesztési energia, és m az atom tömege. Ha ugyanakkor az álló atom elnyelne egy foton, akkor a fotonenergiának nagyobbak kell lennie, mint az átmenet energiaszintje: ismét az atom meglökődése okozza az eltérést. Így az álló (de nem rögzített) atom által kibocsátott foton egy másik, szintén álló (és szintén nem rögzített) atom nem tudná elnyelni, nem jön létre rezonáns abszorpció. Kikaput jelent ugyanakkor a később tárgyalt határozatlanság: a gerjesztett állapot τ karakterisztikus élettartamának megfelelően

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}, \quad (4.89)$$

mértékben **természetesen kiszélesednek** az emissziós és abszorpciós vonalak szélességei. Ha még így sem fednek át, akkor a **Doppler-kiszélesedés** érkezik segítségül: az

atomok hőmozgása miatt mindig lesz olyan, a fotonnal szemben mozgó atom, amely mégis el tudja nyelni azt. Míg optikai (elektronhéjbeli) átmenetek esetén a határozatlanságból adódó kiszélesedés is már elegendő tipikusan, addig magfizikai átmeneteknél olyan nagy a visszalökődés energiája (akár 10–100 eV nagyságú), hogy ilyenkor csak a Doppler-kiszélesedés engedné meg, hogy az atomok újra elnyelhessék saját sugárzásukat. Ezt kísérletileg Malmfors demonstrálta 1951-ben: a **hőmérséklet növelésével megnőtt** a rezonáns abszorpció, azaz az atomok saját sugárzásának az elnyelése. Ezzel szemben Mössbauer 1958-ban kristállyal végzett kísérleteiben furcsa jelenséget észlelt: a **hőmérséklet csökkenésével ismét nőni kezd** a rezonáns abszorpció valószínűsége. Ennek magyarázata a Mössbauer-effektus, melynek során a fotont elnyelő atom a kristályban való rögzítettsége okán nem egyedül, hanem az **egész kristállyal együtt** lökődik vissza, így a nagy tömeg miatt az elvitt mozgási energia igen kicsi lesz. A kvantumfizikát is figyelembe véve kiderül, hogy a kristály persze nemcsak egészében meglökődni tud, de kvantált globális rezgési gerjesztései is vannak, az úgynevezett **„fononok”**. A legkisebb ilyen fononenergia alatti fotonenergia esetén (figyeljünk az egyetlen betű különbségre a két szó között) a kristály nem tud gerjesztődni, így minimális lesz a visszalökődés, és ezért lesz esély a rezonáns abszorpcióra. Valójában az is kiderül, hogy nincsen ilyen „legkisebb” fononenergia, a fononok spektruma folytonosan eltart nulláig, ugyanakkor alacsony hőmérsékleten mégis egyre növekvő esélye lesz a fonongerjesztés-mentes abszorpciónak.

5. Anyaghullámok

5.1. Elektronok elhajlása

A fentiekben részletesen láttuk tehát, hogy az elektromágneses hullámok hol hullám-, hol részecsketermészetüket mutatják, nem lehet a kettő között dönteni, hanem új elméletet kell létrehozni. Az elektron ezzel szemben eddig csak részecskeként viselkedett. Lehetséges, hogy szintén rendelkezik hullámtulajdonsággal? A fénynél az $E = hf$ összefüggésből $E = pc$ és $f = c/\lambda$ miatt

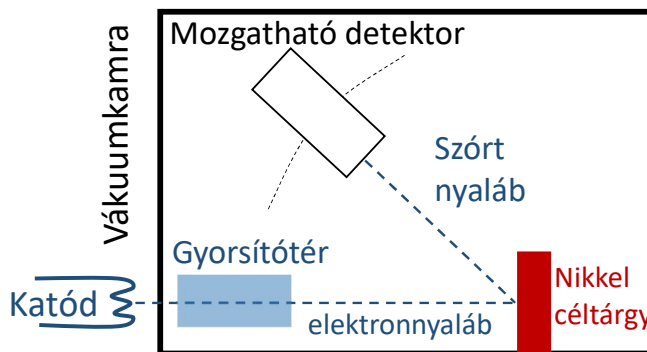
$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (5.1)$$

adódik. Lehetséges, hogy igaz valami hasonló részecskékre is? Louis de Broglie éppen ezt javasolta 1924-ben írt PhD-dolgozatában, ezért ezt a fenti összefüggést **de Broglie-hipotézisnek** hívjuk (de Broglie pedig 1929-ben Nobel-díjat kapott). A redukált Planck-állandóval és a hullámszámmal is kifejezhető ugyanez, ekkor a

$$p = \hbar k \quad (5.2)$$

összefüggésre jutunk. A következőkben azt tekintjük át, hogy milyen kísérletek igazolták végül ezt az összefüggést.

1927-ben végezték el a **Davisson–Germer-kísérletet** (lásd a 24. ábrát, illetve az eredeti Nature **119**, 558–560 [1927] és Phys.Rev.**30** [1927] 705 publikációkat), amelynek során vákuumcsövek elektródjainak szekunder elektronemisszióját mérték. Elektronnyalábot irányítottak egy nikkeltárgyra, hogy az atomok elektromos terét, illetve a felület szerkezetét vizsgálják, az elektronok rugalmas szórását megfigyelve. Arra számítottak, hogy az elektronok számára még a legsímább kristályfelület is felbontható az atomos szerkezet miatt, és így erről lehet információt szerezni a szögeloszlásból. Az 1925-ben elvégzett kísérlet során oxigén került a vákuumcsöbe, amely oxidréteget képezett a nikkelfelületen. Ezt magas hőmérsékletre való fűtéssel távolították el, nem tudván, hogy a nikkeltárgy korábban polikristályos szerkezete egykristállyá változik így, illetve az elektronnyaláb számára azonos kristályfelület látszódik majd. Az újra elvégzett kísérletben már a kristálysíkok befolyásolták az elektronszórást. Ennek nyomán Davisson és



24. ábra. A Davisson–Germer-kísérlet felépítése

Germer számára váratlan módon diffrakciós mintázatok jelentek meg. Végül 1927-ben sikerült áttörést elérniük, ahol Born és mások javaslatai nyomán világossá vált, hogy az interferenciát kvantumjelenségek okozzák.

Ahogy a 4.1. fejezetben említett kétréskíséletben, úgy elektromágneses sugárzás kristálysíkokon való szóródása nyomán is interferencia léphet fel. 1913 óta (Laue és Bragg munkája alapján) ismert volt, hogy ilyenkor az interferenciamintázatban

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (5.3)$$

hullámhosszknál maximumok jelentkeznek, ahol θ a bejövő sugárzás kristálysíkkal bezárt szöge, azaz $\phi = \pi - 2\theta$ a szórás szöge. A feltétel oka, hogy a 25. ábrának megfelelően az útkülönbség (a sugárzásra merőleges felületekhez képest mérve) egy oldalon éppen $2d \sin \theta$, és ez akkor okoz erősítést, ha ez a λ hullámhossz egész számú többszöröse. Ha ennek megfelelő mintázatot találnak az elektronszórásban, akkor **elektron-interferencia** jött létre, tehát az anyag hullámként viselkedett!

Davissón és Germer apparátusában a szórási szöget és a gyorsítófeszültséget is le lehetett állítani, és adott feszültségek esetén a szórás szögfüggését vizsgálták. (Az eredeti cikkekben kicsit más logika szerint fejtették ki az eredményeket, itt a jegyzetben egyszerűsítünk a tárgyaláson.) Eredményeiket úgy interpretálhatjuk, hogy 54 V gyorsítófeszültség mellett a detektor $\phi = 50$ fokos állásánál tapasztaltak intenzitásmaximumot. Ez $\theta = 65$ foknak felel meg, és így a nikkeld $d = 0,091$ nm-es rácstávolságának ismeretében

$$\lambda = 2d \sin \theta = 0,165 \text{ nm} \quad (5.4)$$

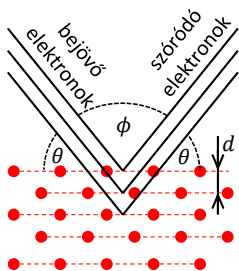
adódik. A de Broglie-hipotézisből pedig a következőkre jutunk

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{1,225 \text{ nm} \cdot \text{V}^{1/2}}{\sqrt{U}}, \quad (5.5)$$

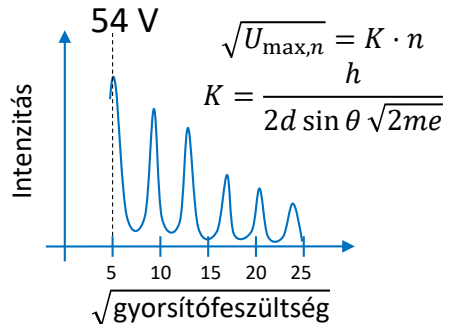
ahol $\text{V}^{1/2}$ a volt mértékegység gyökét jelöli, és ebből $U = 54$ V feszültség esetén $\lambda = 0,167$ nm adódik, ami jól egyezik a mérési eredménnyel.

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

$$\sqrt{U} = \frac{hn}{2d \sin \theta \sqrt{2me}} = K \cdot n, \text{ ahol } K = \text{konstans}. \quad (5.6)$$



az erősítés
Bragg-feltétele:
 $n\lambda = 2d \sin \theta$



25. ábra. A Davissón–Germer-kísélet eredménye és magyarázata: a részleteket lásd a szövegben

Ha a kilépő nyaláb intenzitását vizsgáljuk ennél a fix θ szögnél (ahogy a későbbi, PNAS Apr 1928, 14 [4] 317–322 cikkben szerepelt), akkor a gyorsítófeszültség gyökének függvényében maximumokat tapasztalunk, méghozzá éppen a fenti K konstans egész számú többszöröseinél, ahogy az a 25. ábrán látható. Fontos korrekció, hogy kis n esetén jelentős eltérést tapasztalhatunk a fenti formulától. Ennek oka, hogy a kilépési munkát is figyelembe kell venni. Itt $\lambda = h/\sqrt{2me(U - W)}$, tehát ekkor

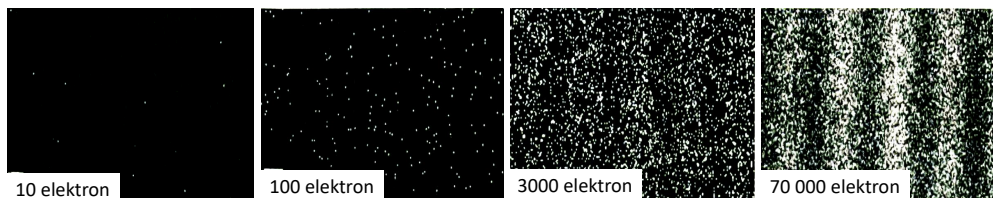
$$\sqrt{U} = \sqrt{K^2 n^2 + W}. \quad (5.7)$$

Mindezek tehát bizonyították, hogy kristályon történő szórás (diffrakció) során a de Broglie-hipotézisnek megfelelő hullámként viselkedik az elektron. Ezért Davisson és a hasonló kísérleteket valamivel később szintén elvégző G. P. Thomson (a Nobel-díjas J. J. Thomson fia) 1937-ben Nobel-díjat kaptak. Ugyanakkor egy ilyen horderejű állítást sok egyéb kísérleti elrendezéssel is érdemes ellenőrizni.

Éppen ezért fontos tudni, hogy a későbbi kísérletekben kristály szélén való elhajlást (Boersch, *Naturwissenschaften* **28** [1940] 709), áthaladó nyalábot (Ruska, TEM, 1931, ezért 1986-ban Nobel-díjat kapott), mesterséges vonalrácson vagy szálakkal történő szórás (Düker, *Naturwissenschaften*, **42** [1955] 41), kétréskísérletet (Jönsson, *American Journal of Physics* **42** [1974] 4) és alacsony intenzitású, **akár egyelektronos** nyalábokat (Tonomura, *American Journal of Physics* **57** [1989] 117) is vizsgáltak. Összességében az elektronok hullámtulajdonsága bizonyítást nyert, amelyet egyetlen elektron is mutat (lásd 26. ábra), és a hullámhossz valóban nagy pontossággal követi a $\lambda = h/p$ formulát. 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 elektron van, akkor mindkét detektor megszólal-e. Ilyenkor azonban mindig csak az egyik detektor szólal meg: lehetetlen interferenciát megfigyelni és az elektron útját is követni!

Gyakorlófeladat

Szabályozható feszültséggel gyorsított elektronok érkeznek 45 fokos beesési szöggel egy 0,1 nm-es rácsállandójú kristályra, majd a szórt elektronokat 90 fokos szórási szög mellett észleljük. Milyen gyorsítófeszültségek mellett lesz maximális az észlelt elektronintenzitás?



26. ábra. Egyelektronos interferencia. A jobb oldalt ábrázolt mintázat kialakulására 20 percet kellett várni. Az ábra az eredeti kísérlet bemutató Tonomura *et al.*, *American Journal of Physics* **57** (1989) 117 publikációból származik.

5.2. Atom- és molekulanyalábok elhajlása

Fontos kérdés az is, hogy az **anyag** általában van-e hullámtulajdonsága, vagy az elektron speciális mikrorészecske-e ilyen szempontból. Ez ma is aktívan kutatott terület (bár egyértelműen azt gondoljuk, hogy minden anyagdarab mutatja ezt a viselkedést), és ma is a Nature címlapjára lehet kerülni ilyen tárgyú kísérletekkel. Mindazonáltal tekintsünk most át néhány fontos eredményt az elmúlt 100 évből.

Az Otto Stern által kifejlesztett molekulanyalábos módszerrel 1929-ben sikerült kimutatni atomok és molekulák interferenciáját. Ehhez látni kell, hogy adott hőmérsékletű gázban az atomok vagy molekulák átlagos impulzusa

$$p = \sqrt{3mkT} \quad (5.8)$$

módon számolható, innen pedig az átlagos hullámhossz

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mkT}}. \quad (5.9)$$

Egy számszerű példával élve: 300 K hőmérsékletű He gáz esetén (tudva, hogy 1 K kb. 86 μeV -nak felel meg, a He tömege pedig $3,73 \text{ GeV}/c^2$, továbbá $h = 197 \text{ MeV}\cdot\text{fm}/c$) az átlagos impulzus kb. 16 keV/c , és így $\lambda = 0,01 \text{ nm}$. Hasonlóan megkaphatjuk, hogy 300 K hőmérsékletű H_2 gázban az átlagos hullámhossz 0,016 nm, tehát elég alacsony hőmérséklet esetén is nagy hullámhosszat kapunk.

A fontos különbség az elektronokkal végzett kísérletekhez képest, hogy ezek a nyalábok nem hatolnak be az anyagba, csak a felületi réteggel lépnek kapcsolatba, így két-dimenziós rácson való diffrakciót kell figyelembe venni. Itt az útkülönbségből a Bragg-feltételhez hasonlóan megkaphatjuk, hogy ϕ_0 szögű bejövő és ϕ szögű kimenő nyaláb és a rácsávolság mellett

$$a(\cos \phi - \cos \phi_0) = n\lambda \quad (5.10)$$

esetén van interferencia. Az első erősítés szimmetria esetén jelenik meg, ahol $\phi = \phi_0$ (azaz $n = 0$), a további maximumok pedig az $n = 1, 2, \dots$ értékekhez kapcsolódóan kaphatóak meg. Ha a nyaláb nem a rácsnak megfelelő síkban esik be, akkor külön a két rácsirányban lehet vizsgálni a szögeltérést. Ez azt jelenti, hogy ekkor

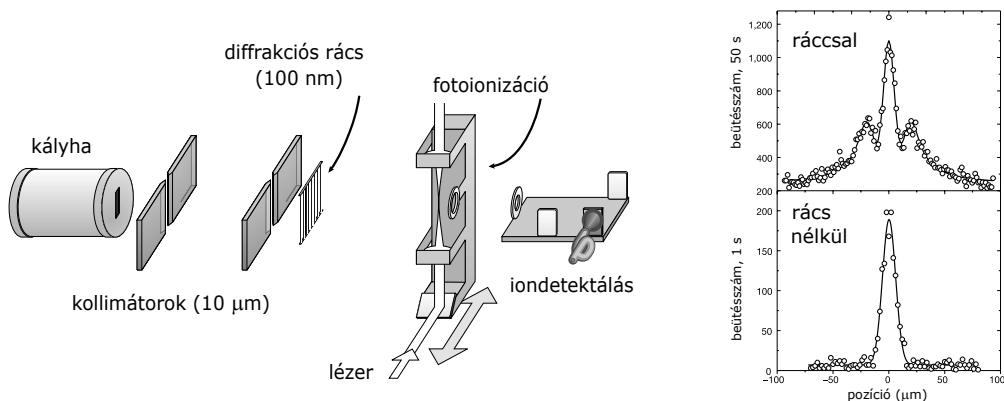
$$a(\cos \phi - \cos \phi_0) = n_x \lambda \quad \text{és} \quad (5.11)$$

$$a(\cos \psi - \cos \psi_0) = n_y \lambda \quad (5.12)$$

esetén van erősítés

Stern konkrétan H_2 és He szórását vizsgált alkáli-halogén sókristályon, és valóban megfigyelte az $n = 1$ -hez tartozó csúcst. Érdekes tudni, hogy ezek a kísérletek nehezek, mert monoenergiás nyaláb és pontos detektor kell – cserébe ezek után megállapítható, hogy a hullámviselkedés az anyag általános tulajdonsága.

Ez ma is kutatott terület. Zeilinger és kollégái Innsbruckban 1999-ben végzett kísérleteik során fullerénnel figyelték meg interferenciát. C_{60} nyalábot hoztak létre, 900 K-nek megfelelő energiánál, ahol a sebesség átlagosan 210 m/s, a hullámhossz kb. 2,5 pm, azaz lényegesen kisebb a C_{60} kb. 0,7 nm-es méreténél. 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



27. ábra. A C_{60} molekulák interferenciáját kimutató kísérlet és a megfigyelt mintázat, ráccsal (van interferencia) és rács nélkül (nincs interferencia). Az ábra forrása a Nature **401**, 680–682 (1999) publikáció.

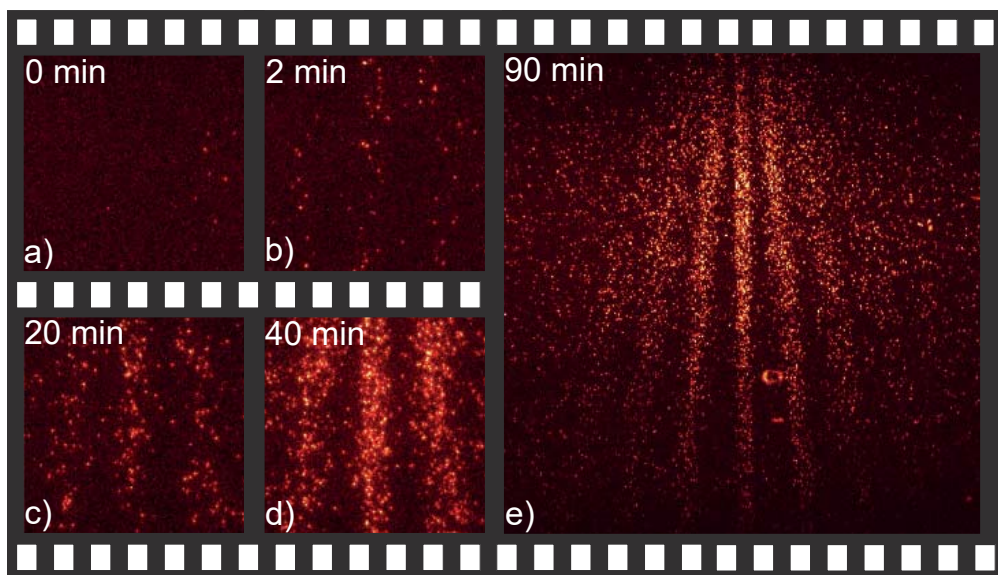
során 100 nm-es SiN rácsot alkalmaztak, majd 1 méternyi szabad út után Argon-ion lézerrel ionizálva a molekulákat, detektálhatták őket. Az eredményt lásd a 27. ábrán és a Nature **401**, 680–682 (1999) cikkben. Egyértelműen interferenciavonalakat láttak, az elmélet és a kísérlet jó egyezést mutatott, noha a molekulák bonyolultak, erősen gerjesztettek, széles sebességeloszlással rendelkeznek, és többféle izotóp volt a mintában. A hiba javarészt a kollimáció hiányából, a sebességeloszlás szélességéből és a résvastagság bizonytalanságából adódik.

Egymolekulás interferenciát is sikerült létrehozni (Juffmann, Nature Nanotechnology **7**, 297–300 [2012]). A kísérletben nagy szerves molekulákat (ftálocianin-származékokat) vizsgált, többek között az 1298 atomi tömegűnek megfelelő, 114 atomból álló $C_{48}H_{26}F_{24}N_8O_8$ molekulát. Ezeket 10 nm vastagságú anyagba vágott rácsra irányítottak egyesével, és ténylegesen megfigyelték az interferenciakép kialakulását, lásd a 28. ábrán.

Az elmúlt években sikerült egy atom különböző atomi állapotainak interferenciáját is kimutatni (Parazzoli, Phys.Rev.Lett **109**, 230401 [2012]) Itt egy Mach–Zehnder-jellegű interferométerben vizsgáltak egy lézercsipesz (optical tweezer) segítségével szabadesésbe helyezett céziumatomot. Tükrök helyett fényimpulzusokat használtak, amelyek Raman-átmenetre kényszerítik a céziumatomot. Ezen átmenet során ahol a szórt foton energiájának egy része az atomot gerjeszti, és csökkent energiájú foton halad tovább, jelen esetben hiperfinom gerjesztésről van szó, az $F = 3$, illetve $F = 4$ állapotokról, ennek jelentését lásd a hidrogénatomról szóló 8. fejezetben (de itt is megemlítünk annyit, hogy az állapot a mag- és az elektronperdület egymáshoz viszonyított irányától függ). Ezután az atom a két hiperfinom állapot koherens szuperpozíciójába kerül, amelyek között $\hbar k_{\text{eff}}$ impulzuskülönbég van, ahol k_{eff} a Raman-gerjesztő fény hullámszámvektora. Az impulzuskülönbég miatt m tömeg esetén a két állapot távolsága

$$x(t) = \frac{\hbar k_{\text{eff}} t}{m} \quad (5.13)$$

módon növekszik, a kísérletben 3,5 μm értékig jutottak el. Ezután további impulzusokkal újra egymás felé irányították az atom két állapotát, amelyek rekombinálódtak, majd

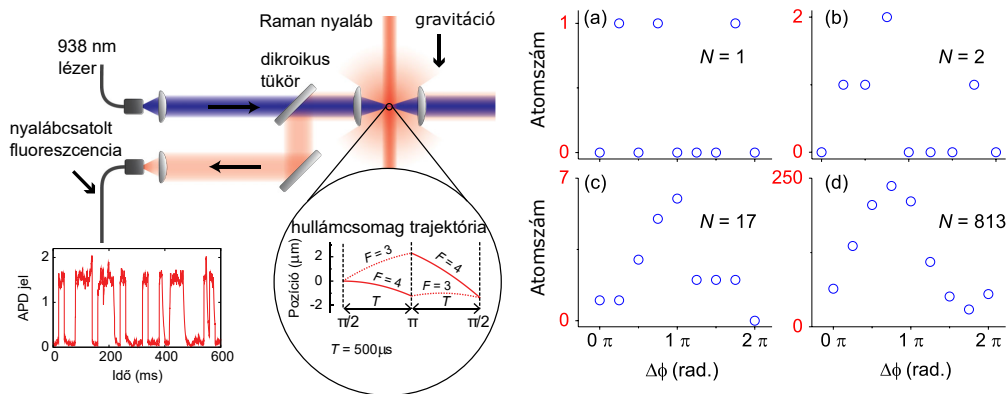


28. ábra. Juffmann egymolekulás interferenciakísérletének eredménye: idővel kirajzolódik az egyesével beérkező molekulák interferenciamintázata. Az ábra forrása a Nature Nanotechnology 7, 297–300 (2012) publikáció.

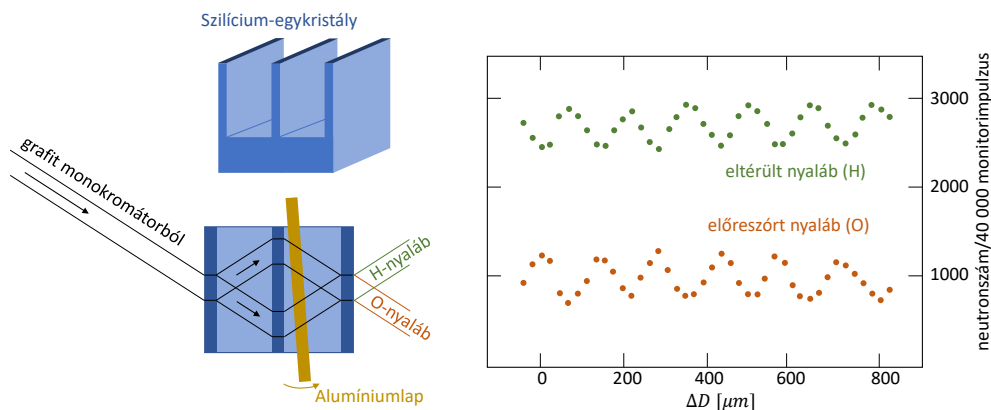
a lézercsipesz segítségével „befogták” az atomot, és így a két állapot közötti fázistolás lemérhető. A folyamat során összegyűjtött fáziseltéréstől függően az interferométerben vagy jelentkezik az atom hatása, vagy nem. Konkrétan 813 egyedi atom vizsgálata után szépen kirajzolódik az interferenciamintázat (a fázistolás függvényében észlelt kumulált atomszám az $F = 3$ állapotban), ahogy azt a 29. ábra illusztrálja.

Neutronokkal is végeztek hasonló kísérletet (Rauch, Phys.Lett. **47A** [1974] 369), reaktorból származó alacsonyenergiás, monokromatikus neutronokkal. Itt is lényegében Mach–Zehnder-interferométert használtak, de tükrök helyett természetesen más módszert kellett alkalmazni. A 0,6%-os pontosságon belül monokromatikus, $\lambda = 2 \text{ \AA}$ hullámhosszú nyalábot monolitikus, tökéletes szilícium-egykristályon történő kettős töréssel osztották két részre (érdekességképpen megemlíthetjük, hogy a Wacker–Chemitronic által növesztett egykristály 8 cm átmérőjű és 7 cm hosszú volt, és ebből alakították ki a kísérleti berendezést), majd egyesítették újra egy-egy közbenső „fallal”, ahogy az a 30. ábrán is látható. A létrehozott struktúráknak a rácsállandónak megfelelő skálán belül párhuzamosnak kellett lenniük. 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. Ha a nyaláb útjába valamilyen anyagot helyezünk, annak törésmutatója a b_c koherens szórási hosszától, a neutronok λ hullámhosszától és az anyagban lévő atomok ν sűrűségétől függően

$$n = 1 - \lambda^2 \frac{N b_c}{2\pi} \quad (5.14)$$



29. ábra. A Parazzoli-féle egyatmos interferenciakísérlet elrendezése (balra) és eredménye (jobbra). A jobb oldali ábrán az egyre több mérés után kirajzolódó eloszlást mutatják: a (d) panelen már jól látható az interferenciamintázat. Az ábra forrása a Phys.Rev.Lett**109** (2012) 230401 publikáció.



30. ábra. A Rauch-féle neutronnyalábos interferenciakísérlet elrendezése (balra) és eredménye (jobbra). Az elrendezésben *S*-sel jelölt nyalábosztó (splitter) után az *M* tükör (mirror) következik, majd az *A* analizáló. Az alumíniumlap elfordulását az ϵ szög jelzi. Az egyes struktúrák távolsága $27,2936 \pm 0.0009$ mm volt, míg a méretük 4.3954 ± 0.0008 mm. A jobb oldali grafikonon a nyaláb útjába helyezett alumíniumlemez okozta fáziseltérés függvényében ábrázolták a két detektált nyaláb intenzitását. Az ábra a Phys.Lett.**47A** (1974) 369 publikáció alapján reprodukálva.

lesz. Ha az anyag vastagsága ΔD , akkor kifejezhető a megjelenő fázistolás:

$$\Delta\phi = (1 - n)2\pi \frac{\Delta D}{\lambda} = \lambda N b_c \Delta D. \quad (5.15)$$

Végül a ΔD optikai hossz az útban elhelyezett alumíniumlap ϵ forgatásával variálható, illetve annak szögével kifejezhető. Ennek függvényében mérték az intenzitást, és a 30. ábra jobb oldalán látható, harmonikus oszcillációt tapasztalták. Érdekeség, hogy a gravitáció szerepe is kimutatható, ha az elrendezést a bejövő nyalábút mentén elforgatjuk. Ekkor az egyik ágon a nyaláb az út egy részét magasabb gravitációs potenciálon tölti. Emiatt kisebb lesz itt a hullámszáma, konkrétan:

$$k'^2 = k^2 - \frac{2m^2 g H}{\hbar^2}, \quad (5.16)$$

ahol H a magasság, m a részecske tömege, g pedig a gravitációs gyorsulás értéke. Emiatt azonos s úton is $(k - k')s$ fáziseltérés lesz, ez pedig kimutatható a megjelenő interferenciamintázatban! A részletek megtalálhatóak Colella, Overhauser és Werner eredeti Phys. Rev. Letters **34** (23), 1472 (1975) cikkében is. A kísérletet később (1980-ban) függőleges bejövő nyalábbal és a függőleges tengely körül forgatott interferométerrel is megismételték. Ekkor a Coriolis-hatás jelenik meg, és így a függőleges tengely körüli forgásszögének függvényében változni fog az egyes detektorokban észlelt intenzitás – ezt a kísérletet Straudenmann, Werner, Colella és Overhauser Phys. Rev. **A21** (1980) 1419 cikke írja le. Mindezek elolvashatóak Patkós András „Bevezetés a kvantumfizikába” (Typotex, 2012) című könyvében is.

5.3. Terjedési amplitúdó és hullámfüggvény

Az anyaghullámok tehát **kísérleti tényként kezelendők**, a kísérletek megkövetelik, hogy a részecskékhez 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

$$A_1 = a_1 e^{i(\omega t + \phi_1)} \text{ és} \quad (5.17)$$

$$A_2 = a_2 e^{i(\omega t + \phi_2)}, \quad (5.18)$$

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

$$I_{12} = |A_1 + A_2|^2 = |e^{i\omega t}|^2 \left| a_1 e^{i\phi_1} + a_2 e^{i(\phi_1 + \delta)} \right|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta, \quad (5.19)$$

azaz $I_1 = I_2 = I$ esetén $0 \leq I_{12} \leq 4I$. Anyaghullámokkal hasonló a tapasztalat, de kérdés, hogy mit jelent az A mennyiség, hogyan értelmezzük anyaghullámok esetén.

Vezessünk be egy $P(x)$ megtalálási **valószínűsége**sűrűségét: ez azt jelenti, hogy x és $x + dx$ között $P(x)dx$ a megtalálási valószínűség. Ez a $P(x)$ lehetne az amplitúdó négyzete, ahogy az elektromágneses sugárzás esetén az intenzitás az elektromos és/vagy a mágneses tér négyzetével arányos. Tehát legyen

$$P(x) = |\Psi(x)|^2, \quad (5.20)$$

ahol $\Psi(x)$ komplex értékű függvény, egyfajta valószínűségi amplitúdó

Ha kísérletben észlelni próbáljuk (pl. fotocellával megmérjük), hogy melyik résen megy át az elektron vagy a foton, és ezt koincidenzába kötjük a mintázattal, akkor szimplán az egyes réseken való áthaladás valószínűségének összegét kapjuk vissza. Tehát 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 valószínűségi amplitúdói összeadódnak, és

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \quad (5.21)$$

$$P = |\Psi_1 + \Psi_2|^2. \quad (5.22)$$

Ez több lehetőségre is kiterjeszhető, és akkor érvényes, ha nem lehet eldönteni, hogy melyik valósult meg. Ha eldönthető, mert például észleltük az elektron vagy a foton útját, akkor

$$P = P_1 + P_2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2. \quad (5.23)$$

Kérdés, hogy mit válasszunk Ψ alakjával (mielőtt matematikailag megalkothatnánk egy „valódi” elméletet). A síkhullámnak megfelelően lehetne

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}. \quad (5.24)$$

További 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 $p = \hbar k$, ahogy a de Broglie-relációban, illetve a fotoeffektus és egyéb kísérletek nyomán láttuk. Ekkor

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (px - Et) \right] \quad (5.25)$$

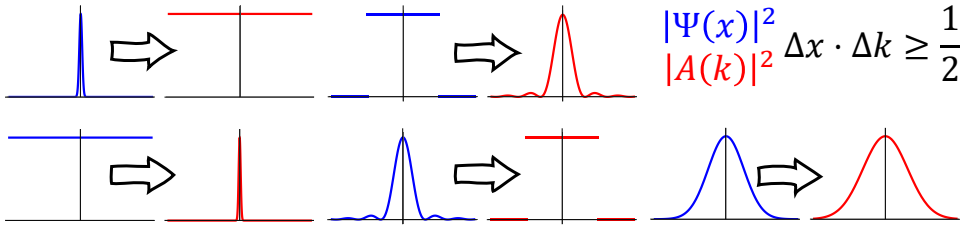
lesz a p impulzusú, E energiájú részecske valószínűségi amplitúdója. Vegyük észre, hogy a p és E határozott értéket vesz fel, akkor $P \equiv 1$, tehát a részecske nem lokalizálható térben és időben! Ha viszont Ψ -t úgy akarjuk megkonstruálni, hogy lokalizált részecskét adjon, azaz $P(x)$ valamilyen korlátos tartományon legyen csak nemnulla értékű, akkor nem lehet határozott impulzust megadni, márpedig csak lokalizált részecske észlelhető és közvetíthet jelet! Hogy hogyan oldjuk fel ezt a látszólagos dilemmát, az a következő szakasz témája.

5.4. Határozatlanság és hullámcsomagok

Ha két hullámot veszünk ω_1 és ω_2 frekvenciákkal és k_1 és k_2 hullámszámvektorokkal, akkor az összeadás után a

$$2 \exp(i(k_1 + k_2)x - i(\omega_1 + \omega_2)t) / 2 \cos((\Delta kx - \Delta\omega t) / 2) \quad (5.26)$$

hullámfüggvény jön létre, a koszinuszos tag a görbe burkolója lesz, azaz egyfajta **hullámcsomagot** hoz létre. A burkoló fázissebessége (azaz a körfrekvencia és a hullámszám hányadosa, azaz az a sebesség, amellyel a fázis, avagy a maximumok helye halad) itt $\Delta\omega / \Delta k$ lesz, amely egyúttal a csoportsebesség is. A teljes hullám fázissebessége az



31. 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 $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

összegek hányadosa, $(\omega_1 + \omega_2)/(k_1 + k_2)$. Ekkor a részecske helye rögzített t esetén egy $2\pi/\Delta k$ intervallumon adott csak, tehát $\Delta x \Delta k = 2\pi$ (mivel $\Delta k x/2$ a cos argumentuma).

A valóságban, ennél összetettebb hullámcsomagokban a **hullámszámok egy tartományban folytonosan vannak jelen**, azaz megjelenik egy $A(k)$ amplitúdó, azaz

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk, \quad (5.27)$$

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx, \quad (5.28)$$

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 Δk intervallumon konstans $A(k)$ -hoz $4\pi/\Delta k$ szélességű sinc hullámcsomag tartozik (amely még ezen túl is oszcillál, mint egyfajta csillapított oszcillátor), illetve a térben Δx intervallumon konstans valószínűsűrséggel lokalizált **hullámcsomag** impulzuseloszlása például szintén sinc jellegű, $\sin(k\Delta x\pi)/k$ alakú függvényből állítható elő (pontosabban ez az $A(k)$ eloszlás alakja, az impulzus valószínűsűrsége ennek négyzete). Mindezeket a 31. ábra is mutatja, illetve az alábbiakban is összefoglaljuk:

$$A(k) \propto \delta(k - k_0) \rightarrow \Psi(x) \propto e^{ik_0 x} \quad (5.29)$$

$$A(k) \propto e^{ik(x-x_0)} \rightarrow \Psi(x) \propto \delta(x - x_0) \quad (5.30)$$

$$A(k) \propto \chi_{[-\Delta k/2, \Delta k/2]} \rightarrow \Psi(x) \propto \frac{\sin(\Delta k x \pi)}{x} \quad (5.31)$$

$$A(k) \propto \frac{\sin(k\Delta x\pi)}{k} \rightarrow \Psi(x) \propto \chi_{[-\Delta x/2, \Delta x/2]} \quad (5.32)$$

$$A(k) \propto e^{-k^2/\Delta k^2} \rightarrow \Psi(x) \propto e^{-x^2 \Delta k^2/2}, \quad (5.33)$$

ahol χ_A az A halmaz karakterisztikus függvényét jelöli, azaz egy intervallum esetén a „doboz” függvényt. Ha a

$$\langle x \rangle = \int x |\Psi(x)|^2 \quad \text{és} \quad \langle k \rangle = \int k |A(k)|^2 \quad (5.34)$$

jellegű várható értékek segítségével bevezetjük általánosságban a hely- és hullámszám-

bizonytalanság

$$\Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \quad (5.35)$$

$$\Delta k^2 = \langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle \quad (5.36)$$

fogalmát, akkor kiderül, hogy bármely függvényre $\Delta x \Delta k$ alulról korlátos, és Gauss-alaknál a legkisebb, itt $\Delta x \Delta k = 1/2$, azaz

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.37)$$

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

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.38)$$

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. Ez egyúttal azt is jelenti, hogy a kvantumelméletben nincsenek pontos koordináták, a pályafogalom értelmetlen, és egyes fizikai mennyiségek nem határozhatóak meg egyszerre. Később látni fogjuk: a mérhető mennyiségek az állapotok terén ható lineáris operátorokként értelmezhetőek. Mérésük esetén a hullámfüggvény az operátor sajátfüggvénye lesz, a mérés eredménye pedig a sajátérték. Éppen emiatt csak kommutáló operátoroknak megfelelő mennyiségek mérhetőek (értelmezhetőek) egyetlen állapotra vonatkoztatva, mivel az ilyen operátorok sajátállapotai ugyanazok (amennyiben az operátorok értelmezési tartománya is ugyanaz). Mindez azt jelenti, hogy a határozatlanság a mikrovilág objektív törvényszerűsége, és nem a kísérletező ügyetlensége. Még ha a mérőrendszer és az objektum kölcsönhatása a nullához is tart, a határozatlanság akkor is jelen lesz.

Noha Feynman még azt írta, hogy egyelektronos (sőt: egymolekula-) interferenciát még senki sem látott, de azóta ezt a kísérletet ténylegesen el is végezték, ahogy fentebb részleteztük. Az előző bekezdésben említették szempontjából fontos, hogy a pontosan azonos részecskék egyike véletlenszerűen itt csapódik be, a másik véletlenszerűen ott, és sok részecske alakítja ki az interferenciamintázatot, amely végeredményben tényleg $|\Psi|^2$ -nek megfelelően adódik. Tehát az események **valószínűségi jellege** valamilyen értelemben elsődleges tulajdonsága a fizikának. Vagy az is lehet, hogy nem értjük valamely rejtett, de mérhető változók időbeli fejlődését? Erről is szót ejtünk a következő szakaszban. Mindez azért is kiemelten fontos, mert a fizika a reprodukálható kísérleteken nyugszik, ugyanakkor az említett interferenciakísérletekben egyetlen részecske helye nem reprodukálható, kizárólag az átlagos viselkedés! És mindez nem úgy értendő, mint a kinetikus hőtanban, ahol ugyan a gyakorlatban nem tudjuk mindegyik részecske mozgását követni, de azért elvileg ez megtehető lenne. Itt azonban ez az „átlagolódás” fundamentálisan, az elméletből következő módon van jelen.

Gyakorlófeladat

Ha a neutron valójában egy protonméretű (kb. 1 fm-es méretskálájú) térrészbe koncentrált proton-elektron „kötött állapot” lenne, akkor mekkora lenne az elektron energiájának bizonytalansága? Hogy viszonyul ez a proton $938,3 \text{ MeV}/c^2$ -es tömegéhez, a neutron $939,6 \text{ MeV}/c^2$ tömegéhez, illetve a kettő különbségéhez?

5.5. A kvantummechanika értelmezései, determinizmus

Interpretációk lehetnek szükségesek a fentiek „feldolgozásához”. Ezekből sokféle van, az alábbiakban néhány alapvető verziót megemlítünk, hozzáátve, hogy ezek tárgyalása többnyire inkább a tudományfilozófia, mintsem a tudomány tárgykörébe tartozik.

- **Schrödinger** eredetileg úgy gondolta, hogy a hullámfüggvény ténylegesen a térbeli töltéeloszlást jelenti.
- A Bohr és Heisenberg nevéhez köthető **koppenhágai interpretáció** szerint a hullámfüggvény nem jelent fizikailag semmit, és csak azt értelmes vizsgálni, hogy mi lesz az egyes mérések következménye. Az interpretációt sokan azzal egészítik ki, hogy méréskor a hullámfüggvény „omlik össze” egy adott kimenetelnek megfelelően.
- A **Neumann- és Wigner-féle** interpretáció szerint tudattal való kölcsönhatás okozza az „összeomlást”.
- A Everett, Wheeler és DeWitt által megformált **sokvilág-interpretáció** szerint méréskor minden lehetséges hullámfüggvény egyszerre megvalósul, emiatt a valóság mindig felhasad sok „párhuzamos” világra, valahányszor mérés történik.
- Feynman és Mermin **instrumentalista** interpretációja szerint nincs szükség interpretációra, a kvantummechanika egyszerűen egy receptet ad arra, hogy egyes mérések kimenetelét megmagyarázzuk („shut up and calculate”).
- A Born-féle **statisztikus interpretáció** szerint a hullámfüggvény önmagában nem értelmezendő, csak egy sokaság részeként.
- A **kvantumbayesiánus** interpretációkban (ezek jeles képviselője az úgynevezett QBism) a hullámfüggvény nem a valóság része, az csak a konkrét megfigyelő szempontjából vett valószínűségeket tartalmazza: azt, hogy ez a megfigyelő várhatóan mikor mit mér majd.
- Az **objektív kollapszusra** építő interpretációk szerint a hullámfüggvény-összeomlások ténylegesen létrejönnek. Ezen interpretációk egyike szerint a fekete lyukak ellentétéként a hullámfüggvény-összeomlás egyfajta „fehér lyukat” jelent, és fizikai határa van annak, hogy milyen méret felett beszélünk mérésről és összeomlásról, és mi alatt folytonos időfejlődésről. Ez az elmélet Roger Penrose és Diósi Lajos nevéhez köthető. Érdekesség, hogy 2021-ben egy kísérletsorozat eredményeként megjelent Donadi, Diósi és munkatársaik Nature Physics **17** (2021) 74 cikke, amely szerint tesztelték ezt az interpretációt, de a kísérletek ellentmondanak neki.
- Egyes interpretációk szerint a kvantumelmélet nem teljes, és vannak valamilyen rejtett változók, amelyek időbeli fejlődése adná meg a determinisztikus viselkedést. Többek között Einstein is ehhez ragaszkodott (ahogy 1926-os levelében Max Bornnak írta: „Isten nem kockajátékos”). De Broglie és Bohm eköré felépülő elméletében van egy irányító egyenlet, amely kialakítja a részecske trajektóriáját a hullámfüggvény által leírt valószínűségben belül.

Az utolsó pontot érinti **EPR-paradoxon**. Ezt a paradoxont Einstein, Podolsky és Rosen állították fel Phys. Rev. **47**, 777 (1935) cikkükben. A paradoxon alap gondolata az, hogy ha (például egy elektron-pozitron annihiláció vagy kétfotonos bomlás során) keletkezik egy fotonpár, akkor a perdületmegmaradás miatt a teljes spinjük (azaz perdületük) ismert, hiszen meg kell egyeznie az eredeti részecske perdületével. Ugyanekkor a kvantummechanikai valószínűség szerint az egyik kiválasztott részecske spinje tetszőleges lehet. Emiatt a két részecske állapota **összefonódott**, tehát ha megmérjük az

egyik spinjét, akkor abból azonnal következtethetünk a másik spinjére is. A részecskét vizsgálva a tetszőleges spinállapotok között „elkent” állapot egyetlen sajátállapotra redukálódik. Így azonban nem csak a mért részecske, hanem a másik részecske állapota is összeomlik, hiszen *tudjuk* a spinjét!¹⁴ Lehet azonban, hogy ez a másik részecske már közben nagy távolságba került az eredetitől, mégis *azonnal* sajátállapotba kell kerülnie! Ez távolhatásnak tűnik! Fontos látni ugyanakkor, hogy itt nem történik információtovábbítás, a másik részecskét megfigyelve semmilyen változást nem látunk. A távoli részecske állapotáról amúgy is csak akkor tudnánk meg bármit, ha megmérnénk a spinjét, ekkor azonban amúgy is „összeomlana” a sajátállapota.

A jelenség mélyebb megértése érdekében megvizsgálhatjuk a két foton mért spinje közötti korrelációt. Erre vonatkozik az alábbiakban vázolt kísérlet, amelyet a 32. ábra is illusztrál. A kísérlet lényege, hogy a fent leírt, valamilyen konkrét irány szerinti felbontásban egyszerre „fel” (\uparrow) és „le” (\downarrow) állapotban lévő részecskepár összes perdülete biztosan nulla, tehát ha az egyiket adott irányban „fel” perdületűnek mérjük, akkor a másik biztosan „le” perdületet adna, ha megmérnénk a perdületét ugyanabban az irányban. Jelöljük a teljes kísérlet kimenetelét egy ab párral, ahol $a, b \in \{+, -\}$. Itt tehát a $++$ kimenetel azt jelenti, hogy mindkét részecskét $+$ („fel”) perdületűnek mértük, $+-$ azt, hogy az egyik $+$, a másik $-$ eredményt adott a két oldalon lévő detektorok állásához képest. Az egyes részecskéket külön vizsgálva a perdületek iránya véletlenszerű, ezért ha a két detektor azonos állásban van, akkor a $+-$ és a $-+$ esetek esélye 50-50%, míg az $++$ és $--$ események kizárhatóak. Ha bevezetjük az adott N_{ab} kimenetelek számát vagy arányát, akkor tehát azonos állású detektorok esetén

$$N_{+-} = N_{-+} = 50\%, \quad (5.39)$$

$$N_{++} = N_{--} = 0\%. \quad (5.40)$$

Ha azonban a két detektor ellentétes irányban áll (azaz 180° szög van közöttük), akkor

$$N_{+-} = N_{-+} = 0\%, \quad (5.41)$$

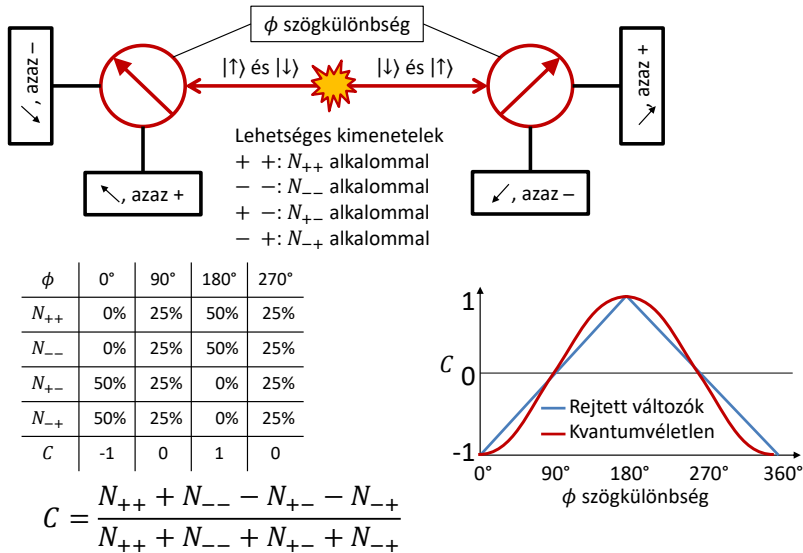
$$N_{++} = N_{--} = 50\%, \quad (5.42)$$

hiszen a „lefelé” álló detektorban „le” eredményt adó részecske perdülete valójában ekkor felfelé mutat, tehát a másik, felfelé mutató detektorban „le” eredményt kell kapnunk. Mindezt úgy is összefoglalhatjuk, hogy a

$$C = \frac{N_{++} + N_{--} - N_{+-} - N_{-+}}{N_{++} + N_{--} + N_{+-} + N_{-+}} \quad (5.43)$$

korrelációs hányados értéke azonos állású detektorok esetén fixen -1 , míg ellentétes állás esetén $+1$. Ugyanígy láthatjuk azt is, hogy merőleges detektorok esetén $C = 0$, hiszen ekkor minden kimenetel esélye 25%. A detektorok tetszőleges egyéb szöge esetén viszont nem kapható meg ilyen egyszerűen az eredmény. A klasszikus lokális valószínűségszámítás szerint, rejtett változók által okozott spinbeállásból kiindulva, legfeljebb a 32. ábra grafikonját látható szögletes eredményt kapjuk (azaz pl. 135° foknál $1/2$ -et) – míg kvantumfizikai véletlenből kiindulva a szinuszos görbét (azaz pl. foknál $1/\sqrt{2}$ -t, ami több, mint $1/2$). Az adatok pedig a második eshetőséget támasztják alá, azaz a kísérlet kizárja, hogy az a kísérlet eredményét a kiinduláskor már meghatározott, lokális kölcsönhatásokban részt vevő rejtett változók okozzák!

¹⁴ Mindez természetesen a valódi hullámfüggvény-összeomlást tartalmazó interpretációkban van így.



32. ábra. Az EPR-paradoxonra épített Bell-féle kísérlet. A felső ábrán a kísérlet elrendezése látható, egymástól független szögekben mérő detektorokkal. Bal alul adott szögeknél a négy „fix” kimenetel valószínűsége, míg jobb alul a kvantumvéletlen és a rejtett változók klasszikus véletlen (maximális) előrejelzése. Ez utóbbi úgy értendő, hogy C értéke 0 és a kék „görbe” közötti értéket veheti fel.

Mindezt elméleti oldalról részletesen Bell vizsgálta meg a *Physics* 1 (3) 195–200 (1964) cikkében, majd Aspect és munkatársai végeztek elsőként erre vonatkozó méréseket (a részleteket lásd a *Phys. Rev. Lett.* 47 [1981] 460 publikációban). Azóta újabb és újabb kikapukat vizsgálnak meg, hogy lehetséges-e fenntartani a fizika lokális, determinisztikus jellegét – egyelőre minden eredmény a „kvantumvéletlen” megvalósulását igazolja. Lásd ezzel kapcsolatban többek között a 4.5. szakaszban említett Elitzur–Vaidman-féle kísérletet és a Wheeler-féle késleltetett válaszos kísérletet is. Mindez tehát azt jelenti, hogy el kell fogadnunk, hogy a fizika a fenti értelemben véve nem determinisztikus, azaz a kiindulóállapotból nem tudjuk meghatározni a kísérlet végeredményét, a véletlen szerepe megkerülhetetlen!

Érdekes hozzáfűzni, hogy valójában van egy filozófiai jellegű „kiút”: a szuperdeterminizmus, azaz hogy a kísérlet eredménye valahogy „eleve elrendeltetett”. Ekkor azonban a fizika törvényei csak annyiban írják le a világot, amennyiben egy épület alakját a tervrajz vagy egy színdarab történéseit a szövegkönyv: nem tudunk logikai alapon előrejelzést tenni, legfeljebb felismerni a tervező/író gondolkodását. Ez azonban tulajdonképpen nem tudományos értelemben vett elmélet, hiszen nem ad tesztelhető jóslatot, és így tulajdonképpen inkább a filozófia tárgykörébe tartozik. A szuperdeterminizmus egyes „természettudományosabb” ágai korrelációkat írnak elő, amelyek végül is az EPR-paradoxonhoz kapcsolódó megfigyeléseket megmagyaráznák. Ezekben tehát azért kapunk a klasszikus valószínűség által megengedettnél nagyobb értékeket a fent definiált C korrelációs változóra, mert eleve valamilyen, a hagyományos kvantummechanikában le nem írt korreláció volt jelen a két foton között. Ezek az elméletek tulajdonképpen a Bell-féle kísérlet kikapuit igyekeznek megkerülni, de ez idáig mindegyik lehetőséget

cáfolta egy-egy speciális kísérlet. Ezek közül is kiemelendők Anton Zeilinger bécsi csoportjának Phys. Rev. Lett. **118** (2017) 060401 és Phys. Rev. Lett. **121** (2018) 080403 cikkekben leírt eredményei: előbbi két távoli (de a Tejútrendszerben található) csillag fénye segítségével legalább 600 évre teszi ki a szuperdeterminizmus által létrehozott korrelációk időtartamát, utóbbi viszont távoli kvazárok segítségével 7,8 milliárd évre tolja ki ezt a határt. Tehát ha meg is formálunk valamilyen szuperdeterminisztikus elméletet, az ténylegesen szinte az ősröbbanás óta fennálló korrelációkat kell hogy tartalmazzon – mintegy eleve elrendelve tetszőleges mérés eredményét.

Mindezek alapján meg kell állapítanunk, hogy van három tulajdonsága a fizikai világnak, amelyek közül a a kvantumfizika alapjait tesztelő kísérletek szerint (legalább) az egyik biztosan igaz:

- indeterminisztikus,
- nemlokális,
- szuperdeterminisztikus.

A fizikusok többsége (valószínűleg, statisztikailag megalapozott véleményfelmérés nem ismert e tárgyban) az indeterminizmust „választja”, de ennek részletesebb tárgyalása kívül esik jelen kurzus és jegyzet keretein.

6. A kvantummechanika alapjai

6.1. A kvantummechanika matematikai képe

A kvantummechanika matematikai képe az, hogy egy részecske állapota egy $\Psi(x)$ **állapotfüggvény**. Ezen állapotfüggvények a \mathbb{M} téren a Lebesgue-mérték szerint négyzetesen integrálható függvények Hilbert-teréből¹⁵ kerülnek ki, azaz

$$\Psi \in \mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C}). \quad (6.1)$$

Ezen a \mathcal{H} Hilbert-téren a függvények pontonkénti szorzatának integrálja adja a skalárszorzatot:

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{M}} \Psi_1^* \Psi_2. \quad (6.2)$$

Vegyük észre, hogy ez a skalárszorzat az első (egyes konvenciók szerint a második) változójában konjugált lineáris, illetve a fordított szorzat is az eredetinek a komplex konjugáltja: ez tehát egy „hermitikus forma”. Erre a tulajdonságra azért van szükség, hogy a szorzat normát definiáljon:

$$|\Psi|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle = \int_{\mathbb{M}} \Psi^2, \quad (6.3)$$

mert ez a komplex konjugálás nélkül nem lenne pozitív definit. Innen továbbá az is látható, hogy miért kell az egyéb jó tulajdonságokkal is bíró függvényeken belül kizárólag a négyzetesen integrálható függvényekre szorítkoznunk. Megemlítendő, hogy valójában ha két állapot egymás számszorosa, azt fizikailag azonosnak tekintendő. Sőt, igazából ha ragaszkodunk a $P(x) = |\Psi(x)|^2$ mennyiség valószínűségi értelmezéséhez, akkor kizárólag a $|\Psi|^2 = 1$ normájú állapotokat fogadhatjuk el – két állapot összegére viszont ez már nem teljesülne. Ezért igazából az egymás számszorosaiként felírható állapotok ekvivalenciaosztályait kell vennünk, amelyet az az állapot reprezentál, amelyre közülük teljesül a $|\Psi|^2 = 1$ normálás.

Fontos továbbá, hogy valójában ezt a teret a disztribúciókkal is ki kell egészítenünk: ezek legyenek itt a $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ folytonos lineáris formák¹⁶, amelyek tehát függvényekhez számokat rendelnek. Ilyen disztribúcióra példa a tetszőleges $\Phi \in \mathcal{H}$ függvény esetén használt

$$\langle \Phi | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \Psi \rightarrow \langle \Phi, \Psi \rangle \quad (6.4)$$

jelölés, amelynek segítségével a Φ állapothoz a $\langle \Phi |$ disztribúciót rendeltük. Ha Ψ is függvény, akkor valójában a fent említett integrált kapjuk vissza. Ez a $\Phi \rightarrow \langle \Phi |$ hozzárendelés tulajdonképpen „beágyazza” a négyzetesen integrálható függvényeket a disztribúciók közé. Jelölje mostantól \mathcal{H} ezen disztribúciók terét; de többnyire olyan disztribúciókkal

¹⁵ A Hilbert-tér olyan vektortér, amelyben van belső szorzás (kb. skalárszorzás), metrika, és még teljes is, azaz a Cauchy-sorozatoknak van határértéke a térben. Például a racionális számok tere nem teljes, mert egyes konvergens sorozatok irracionális számokhoz tartanak – és vice versa.

¹⁶ A disztribúciók bizonyos speciális tulajdonságokkal is kell hogy bírjanak még, ezeket itt azonban nem részletezzük.

fogunk foglalkozni, amelyek egyúttal „függvények is”, azaz a fent definiált $\langle \Phi |$ módon írhatóak fel.

Természetesen olyan disztribúciók is léteznek, amelyekhez nem tartozik a fenti értelemben függvény. Erre fontos példa a Dirac-delta, amelyet (kellően sima függvényeken) így definiálhatunk:

$$\delta : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad \Psi \rightarrow \delta(\Psi) = \Psi(0). \quad (6.5)$$

Ez tehát minden függvényhez hozzárendeli a nullában felvett értékét. Elvileg ezt is elképzelhetnénk egy $\langle \delta, \Psi \rangle$ skalárszorzatként, és akkor δ egy olyan függvény lenne, amely mindenhol nulla, kivéve egyetlen pontban, ahol viszont végtelen, és az integrálja nem nulla – csakogy ilyen függvény nem létezik, úgyhogy ez nem megfelelő definíció, helyette a fenti disztribúciót kell használnunk. Ennek ellenére gyakran használjuk a $\delta(x)$ függvényjelölést, elsősorban integrálokban, ilyenkor mindig azt értjük alatta, hogy a többi, x -et tartalmazó függvényekben $x = 0$ helyettesítéssel kapjuk az integrál eredményét. Továbbá még a δ_{x_0} jelölést is használjuk, amely x_0 -ra centrált Dirac-deltát jelöl, ennek hatása így írható le $\delta_{x_0}(\Psi) = \Psi(x_0)$.

Adottak tehát az állapotok és ezek Hilbert-tere. A fizikai mennyiségek legyenek az ezen a téren ható **lineáris operátorok**, azaz

$$\hat{A} \in \text{Lin}(\mathcal{H}). \quad (6.6)$$

A lineáris operátoroknak vannak **sajátállapotaik**, amelyekre

$$\hat{A}\Psi_A = A\Psi_A, \quad (6.7)$$

ahol Ψ_A az operátor **sajátállapota**, míg az A szám (vegyük észre itt a hiányzó „kalapot”) az operátor ezen sajátállapotához tartozó **sajátérték**. Egy fizikai mennyiségnek az értéke egy adott részecskére (az energiája, impulzusa, helye stb.) akkor ad előre tudható választ, ha a részecske a megfelelő operátor sajátállapotában van, és ekkor a mérés eredménye az ennek a mennyiségnek megfelelő operátor sajátértéke az állapoton. Egyéb esetben a mérés után a kvantummechanika egyes interpretációi szerint a megfigyelt rendszer hullámfüggvénye „összeomlik”, és egy adott sajátállapotba kerül. Ez annyiban igazolt tény, hogy másodsor ugyanazt a fizikai mennyiséget mérve nem fogunk mást kapni – hacsak közben egy másik fizikai mennyiségre vonatkozó mérést el nem végeztünk, mert az „elronthatja” az előző mérés eredményeként létrejött tiszta állapotot. (Erről bővebben a 7.1. szakaszban, a perdület operátorának tárgyalásánál olvashatunk.) Adott fizikai mennyiség mérésének várható eredménye, azaz a mennyiség (az adott állapotban vett) várható értéke az operátor várható értékével egyezik meg:

$$\langle \hat{A} \rangle_\Psi := \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{A}\Psi. \quad (6.8)$$

Hozzáfűzzük mindehhez, hogy nem minden operátornak vannak sajátértékei – ilyenkor is értelmezzük azonban az operátor spektrumát. Ez azon λ számok halmaza, amely esetében a $\hat{A} - \lambda \cdot \text{id}_{\mathcal{H}}$ operátornak nincs (korlátos, ami itt a folytonossal egyenértékű) inverze; itt $\text{id}_{\mathcal{H}}$ az állapottéren vett identitásoperátor. Értelemszerűen a sajátértékek a spektrum elemei, de ez utóbbi elemei nem feltétlenül mindannyian sajátértékek.

Fontos megemlíteni az operátorok adjungáltját is. Az A folytonos operátor adjungáltja az A^\dagger operátor, amely esetében tetszőleges $\Psi_{1,2}$ állapotokra teljesül a

$$\langle \hat{A}\Psi_1, \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1, \hat{A}^\dagger\Psi_2 \rangle \quad (6.9)$$

összefüggés. Valójában az adjungált definíciója ennél összetettebb, de itt meglegszünk a fenti tulajdonság megadásával. Annyit hozzáteszünk azonban, hogy az adjungált létezését és egyediségét a Riesz–Fréchet-tétel bizonyítja, illetve megemlítjük, hogy véges dimenziós mátrixok (azaz \mathbb{R}^n terek) esetén az adjungált megegyezik a transzponált mátrix komplex konjugáltjával.

Mivel valós fizikai mennyiségek valós várható értékkel kell hogy rendelkezzenek, ezért

$$\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^* = \langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle = \langle \Psi, \hat{A}^\dagger \Psi \rangle, \quad (6.10)$$

ahol az első egyenlőség a várható érték valós voltából származik, a második a skalárszorzat definíciójából, a harmadik pedig az \hat{A} operátor \hat{A}^\dagger adjungáltjának definíciójából. Az egyenlet bal oldalával ezt összehasonlítva azt kapjuk, hogy az operátor önadjungált, azaz

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (6.11)$$

Mindezt úgy összegezhethetjük, hogy valós fizikai mennyiségek operátorai önadjungáltak. Az önadjungált operátorok sok hasznos tulajdonsággal rendelkeznek (főleg persze véges dimenziós Hilbert-terekben), különös tekintettel arra, hogy a Φ_i sajátállapotaik ortogonális (megfelelő választás esetén ortonormált) rendszert alkotnak. Így az operátor ebben a bázisban a λ_i sajátértékeiből alkotott diagonális mátrixként írható fel:

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i \Phi_i \langle \Phi_i |. \quad (6.12)$$

Végtelen dimenziós terekben léteznek „folytonos spektrumú” operátorok is, amelyek esetében a fent említett spektrum folytonosan végtelen sok elemből áll. Ilyenkor a spektrum elemeihez nem tartoznak sajátállapotok, de egyes esetekben mégis felírhatunk egy, a fentihez hasonló összefüggést, amelyben összegzés helyett integrálás szerepel. A legfeljebb megszámlálhatóan végtelen sajátértékkel rendelkező („diszkrét spektrumú”) operátorknál maradva az is igaz, hogy minden állapot kifejezhető tetszőleges fizikai mennyiség sajátállapotai szerinti felbontásban:

$$\Psi = \sum_i a_i \Phi_i \text{ ahol } a_i = \langle \Psi, \Phi_i \rangle. \quad (6.13)$$

Ilyen értelemben azt mondjuk, hogy ha egy állapot nem sajátállapot, akkor „szuperpozíció”, azaz több (akár végtelen sok) sajátállapot összegeként írható fel.

Gyakorlófeladat

Tulajdonképpen a deriválás és az integrálás is operátorok, noha nem a teljes $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C})$ téren értelmezettek, ugyanis egyes függvények deriváltja vagy integráltja lehet, hogy nem négyzetesen integrálható. Adjunk meg olyan négyzetesen integrálható függvényt, amelynek integráltja vagy deriváltja nem négyzetesen integrálható! Határozzuk meg azt is, hogy mely függvények a deriválás- és az integrálásoperátorok sajátfüggvényei! Vegyük észre továbbá, hogy az ezekkel való „felbontás” a Fourier-transzformációnak felel meg.

6.2. Fizikai mennyiségek határozatlansága

Vegyük észre, hogy általánosságban $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, azaz

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0, \quad (6.14)$$

ahol a szögletes zárójel az úgynevezett kommutátort jelöli. Ez az egyenlőtlenség nemcsak az értelmezési tartományok különbözősége miatt lehet, hanem egyszerűen más értéket is adhat a kétféle szorzat. Az ilyen **nem kommutáló** operátorok különböző sajátállapotokkal rendelkeznek. Ekkor a két operátorhoz tartozó fizikai mennyiségek egyszerre nem lehetnek teljesen meghatározottak, hiszen Ψ csak az egyiknek lehet sajátállapota (kivéve speciális eseteket, amikor a két operátor sajátállapotai között van átfedés).

Ennek mélyebb megértéséhez vezessük be a $\Delta_\Psi \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi$ operátort (ahol az utolsó tag egy szám, tehát valójában ezt még az $\text{id}_{\mathcal{H}}$ identitásoperátorral is kellene szorozni, de ezt innentől az egyszerűség kedvéért többnyire elhagyjuk). Ennek segítségével pedig definiáljuk így egy fizikai mennyiség adott Ψ állapotban vett szórását:

$$(\sigma(A))_\Psi^2 := \langle (\Delta_\Psi \hat{A})^2 \rangle_\Psi = \langle \hat{A}^2 \rangle_\Psi - \langle \hat{A} \rangle_\Psi^2, \quad (6.15)$$

$$(\Delta A)_\Psi := \sqrt{(\sigma(A))_\Psi^2}, \quad (6.16)$$

és ez lényegében az adott fizikai mennyiség „standard bizonytalansága” vagy „határozatlansága” a Ψ állapotban. Vegyük észre, hogy ha $\hat{A}\Psi = A\Psi$, azaz a Ψ állapot az \hat{A} operátor sajátállapota, akkor $\langle \hat{A}^2 \rangle_\Psi = \langle \hat{A} \rangle_\Psi^2 = A^2$, azaz $(\Delta A)_\Psi = 0$. Eszerint tiszta, avagy szórásmentes állapotnak azt nevezzük, amely valamely mennyiség sajátállapota, azaz arra vonatkozóan a szórása nulla.

Vizsgáljuk meg ezek után két tetszőleges \hat{A} , \hat{B} operátor szórását. Első lépésként vezessük be a

$$\Phi = (\Delta_\Psi \hat{A} - i\lambda \Delta_\Psi \hat{B})\Psi \quad (6.17)$$

állapotot, valamely tetszőleges λ érték mellett. Induljunk ki az általános $\Phi^2 \geq 0$ összefüggésből. Ebbe Φ definícióját behelyettesítve

$$\langle (\Delta_\Psi \hat{A} - i\lambda \Delta_\Psi \hat{B})\Psi, (\Delta_\Psi \hat{A} - i\lambda \Delta_\Psi \hat{B})\Psi \rangle \geq 0 \quad (6.18)$$

adódik. Ebben a szorzásokat kifejtve (és az adjungálás definícióját és az operátorok önadjungáltóságát is kihasználva) a következő adódik:

$$(\Delta A)_\Psi^2 + \lambda^2 (\Delta B)_\Psi^2 - i\lambda \left\langle \left[\Delta_\Psi \hat{A}, \Delta_\Psi \hat{B} \right] \right\rangle_\Psi \geq 0. \quad (6.19)$$

Vegyük észre, hogy a definíciók alapján

$$\left[\Delta_\Psi \hat{A}, \Delta_\Psi \hat{B} \right] = [\hat{A}, \hat{B}], \quad (6.20)$$

és ez egy antiönadjungált operátor (azaz adjungáltja a mínusz egyszerese), így várható értéke imaginárius. Ezért a fenti egyenlőtlenség bal oldalán lévő kifejezés minden tagja valós, a kifejezés pedig kvadratikus λ -ban. Ez akkor lesz pozitív definit, ha nincs két

valós gyöke (amelyek között különben negatív lenne), amely pedig akkor teljesül, ha a diszkrimináns nem pozitív:

$$\left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_{\Psi} \right|^2 - 4(\Delta A)_{\Psi}^2 (\Delta B)_{\Psi}^2 \leq 0. \quad (6.21)$$

Ebből pedig az következik, hogy tetszőleges állapotban igaz a

$$(\Delta A)_{\Psi} (\Delta B)_{\Psi} \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_{\Psi} \right| \quad (6.22)$$

egyenlőtlenség, amely tulajdonképpen a Heisenberg-féle határozatlansági reláció általánosítása (és néha Robertson-féle határozatlansági relációnak is nevezik).

Érdemes megemlíteni, hogy a fentiek kicsit bonyolódhatnak, ha az A vagy B operátorok nem a teljes \mathcal{H} téren értelmezettek, ekkor furcsa ellenpéldák is adódhatnak, illetve lényeges az is, hogy noha $[A, B] \neq 0$, ez nem jelenti azt, hogy adott, speciálisan preparált állapotban a várható értéke nem lehet nulla.

Végezetül fűzzük ehhez hozzá, hogy a Bohr-modell pályafogalma a fentiek miatt értelmetlen, hiszen nem értelmezhető egyszerre az elektron helye és impulzusa. Vegyük ugyanakkor az impulzus bizonytalanságát a teljes impulzus felének, $\Delta p = p/2$, a hely bizonytalanságát pedig a pályasugárnak, $\Delta x = r$. Ekkor a minimális bizonytalanságot alapul véve $pr = \hbar$ adódik, ami éppen a Bohr-modell posztulátuma az első energiaszintre! 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 (az utóbbi negatív, hiszen annál kedvezőbb a helyzet, minél távolabb vagyunk a magtól) rendelkezik egy minimummal, amely a Bohr-sugárnak felel meg, és a minimum értéke éppen $-13,6$ eV. Tehát a Bohr-modell alapállapotbeli energiaszintje a pályafogalom nélkül is kijön, csak a határozatlanságból – és némi becslésből. . .

Gyakorlófeladat

Ellenőrizzük, hogy önadjungált \hat{A} és \hat{B} operátorok esetén $[\hat{A}, \hat{B}]$ valóban antiönadjungált-e, illetve hogy antiönadjungált operátorok várható értéke valóban imaginárius-e mindig (legalábbis megfelelően jól viselkedő operátorok esetén). Keresünk továbbá olyan állapotot, ahol $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, de ennek várható értéke mégis nulla.

6.3. Az impulzus és a hely operátora

Kérdés ezek után, hogy hogyan definiáljuk az egyes fizikai mennyiségeket jelentő operátorokat. Először is vizsgáljuk meg az impulzus esetét. Írjuk fel az impulzust a hullámszámmal $p = \hbar k$ módon, és legyen egy $A(k)$ hullámszámspektrummal rendelkező állapotunk. Ekkor értelemszerűen

$$\langle p \rangle = \int dk A^*(k) \hbar k A(k), \quad (6.23)$$

ugyanis a k hullámszámvektorok valószínűségi eloszlását éppen $|A|$ adja meg. Itt $A(k)$ helyére $\Psi(x)$ Fourier-transzformáltját helyettesítve a következő adódik:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx \Psi^*(x) e^{ikx} \hbar k \int dx' \Psi(x') e^{-ikx'}. \quad (6.24)$$

Ezek után a k -t az $e^{-ikx'}$ deriváltjának szorzójaként értelmezve a

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk dx dx' e^{ikx} \Psi^*(x) \Psi(x') i\hbar \frac{d}{dx'} e^{-ikx'} \quad (6.25)$$

összefüggésre jutunk. Végezzünk itt el egy parciális integrálást, amellyel a deriválás (mínusz egygel szorozva) átkerül az exponenciálisról Ψ -re. Ekkor további tagok nem jelennek meg, mivel Ψ négyzetesen integrálható, és így szükségszerűen eltűnik a végtelemben). Használjuk ki ezen kívül azt is, hogy

$$\int dk e^{ikx} e^{-ikx'} = 2\pi \delta(x - x'), \quad (6.26)$$

ezzel pedig a következő összefüggésre jutunk:

$$\langle p \rangle = \int dx' dx \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx'} \right) \Psi(x') \delta(x - x') \quad (6.27)$$

$$= \int dx \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi(x). \quad (6.28)$$

Hasonlítsuk össze ezt azzal, ahogy a \hat{p} operátor várható értékét megkaphatnánk:

$$\langle p \rangle = \int dx \Psi^*(x) (\hat{p}\Psi)(x). \quad (6.29)$$

Ebből közvetlenül adódik, hogy az impulzusoperátor

$$\hat{p} : \Psi \rightarrow -i\hbar \nabla \Psi \quad (6.30)$$

módon adható meg (ahol ∇ a deriválást jelenti). Síkhullámok esetén ezt egyből láthatjuk, hogy tényleg működik:

$$\hat{p} e^{ikx} = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx} = p e^{ikx}. \quad (6.31)$$

Míndez több dimenzióban is felírható: ekkor az impulzusoperátor a deriválásoperátornak felel meg továbbra is. Ugyanakkor ilyenkor az impulzus és a deriválás is vektoroperátor, azaz értéke az impulzustér és a \mathcal{H} Hilbert-tér tenzorszorzatában van; háromdimenziós tér és koordináták bevezetése esetén ezeket az operátorokat a $\mathcal{H} \rightarrow (\mathcal{H}, \mathcal{H}, \mathcal{H})$ halmazok közötti leképezést adnak meg. Így tehát az impulzusoperátor komponensei az adott koordináta szerinti deriválások lesznek. Természetesen a fentieket az energiára mint az impulzus nulladik komponensére is kiterjeszthetjük, és így $\hat{E} = i\hbar \partial_t$ lesz – az impulzusoperátorhoz képest adódó előjelkülönbség a relativisztikus négyesvektorok indexváltásából adódik, ahogy az a $px - Et$ vagy $kx - \omega t$ Lorentz-invariáns kifejezésekben is látszik.

Vegyük észre, hogy a síkhullámok nem elemei a fent definiált \mathcal{H} Hilbert-térnek, hiszen nem integrálhatóak négyzetesen, kivéve, ha a fizikai tér (a „koordinátatér”) véges kiterjedésű. Hogyan értelmezhetőek általánosságban az impulzusoperátor sajátállapotai a Hilbert-térben? Ezen kérdés vizsgálatához a fentieknél kicsit korrektebb matematikai kezelésre lenne szükség, amelynek néhány elemét megemlíjtük itt is. Először is: az impulzusoperátor valójában nem önadjungált, hanem szimmetrikus, azaz a Hilbert-térből

az értelmezési tartományába tartozó Ψ és Φ elemekre $\langle \Psi, \hat{p}\Phi \rangle = \langle \hat{p}\Psi, \Phi \rangle$. Szimmetrikus operátoroknak vehetjük az adjungált kiterjesztését, ha értelmezési tartományuk sűrű a Hilbert-téren – ez utóbbi állítás igaz a fenti definiált impulzusoperátorra. Ez az adjungált kiterjesztés ekkor önadjungált lesz. Mindez összességében úgy is megfogalmazható, hogy az impulzusoperátor „lényegében önadjungált”. Ugyanakkor nincsenek sajátvektorai és sajátértékei, de van spektruma, amelyet a korlátos operátorokra értelmezett spektrum definíciójából általánosíthatunk (a spektrum azon λ értékek halmaza, amelyekre az $\hat{A} - \lambda \text{id}_{\mathcal{H}}$ operátornak nincs korlátos inverze, ahogy fentebb említettük). Látjuk tehát, hogy a kvantummechanika matematikailag tényleg korrekt megfogalmazása korántsem olyan egyszerű, mint ahogy fizikus nyelven erről beszélni szoktunk, de efelett a probléma felett, mint oly sok másik helyen és alkalommal, most is átsiklunk (bízva benne, hogy attól még az eredményeinkben nincs hiba).

Vegyük észre ugyanakkor azt is, hogy az impulzusoperátor az eltolásokkal igen egyszerű kapcsolatban van. Definiáljuk az $\mathbb{M} = \mathbb{R}^3$ tér adott $a \in \mathbb{M}$ vektora esetére $D(a)$ eltolásoperátort:

$$\begin{aligned} D(a) : \mathcal{H} &\rightarrow \mathcal{H}, \Psi \rightarrow D(a)\Psi \\ (D(a)\Psi)(x) &= \Psi(x+a). \end{aligned} \quad (6.32)$$

Ha most egy infinitezimális ϵ eltolásvektort veszünk, arra

$$\epsilon \nabla \Psi(x) = \Psi(x + \epsilon) - \Psi(x) \text{ miatt} \quad (6.33)$$

$$D(\epsilon)\Psi = \Psi + (\epsilon \cdot \nabla)\Psi = e^{\epsilon \cdot \nabla} \Psi \quad (6.34)$$

lesz igaz, ahol kihasználtuk, hogy ϵ infinitezimális. Itt természetesen ügyelnünk kellene a matematikai részletekre, de szerencsére ezt helyettünk más már megtette, így csak észrevesszük, hogy ebből sok infinitezimális eltolás összege esetén, véges eltolásokra is

$$D(a)\Psi = e^{a \cdot \nabla} \Psi = e^{-\frac{i}{\hbar} a \cdot \hat{p}} \Psi \quad (6.35)$$

lesz igaz. Ilyen értelemben az impulzusoperátor az eltolások által (a kompozícióval mint csoportművelettel) alkotott csoport generátora.

Ezek után tegyük fel a kérdést, hogy hogyan adjuk meg a helyoperátort. Világos, hogy mivel $|\Psi|^2$ a térbeli valószínűségi sűrűség, így

$$\langle x \rangle = \int dx x |\Psi(x)|^2 = \int dx \Psi^*(x) x \Psi(x) = \int dx \Psi^*(x) (\hat{x}\Psi)(x), \quad (6.36)$$

ahol folytatjuk a kicsit pongyola „fizikusjelölést”, hogy x a hely mint fizikai mennyiség értéke, és \hat{x} pedig a helyoperátor. Ebből világosan látszik, hogy a helyoperátor nem más, mint az „ x -szel szorzás”, azaz

$$\hat{x} : \Psi \rightarrow \text{id}_{\mathbb{M}} \cdot \Psi, \quad (6.37)$$

ahol $\text{id}_{\mathbb{M}}$ a tér identitásoperátora. Több térbeli dimenzió esetén természetesen ez is vektoroperátor, hiszen \mathbb{M} egy vektortér. Mik a helyoperátor sajátállapotai, azaz milyen állapotra igaz, hogy létezik olyan x_0 , amelyre $x\Psi(x) = x_0\Psi(x)$ minden x -re? Ez a $\delta(x - x_0)$ állapot lesz, amely ugyan nem függvény, de a disztribúciók terében már értelmezhető. Az időre is kiterjeszthetjük a fentieket, ekkor az időoperátor a t -vel való szorzás lesz.

Vegyük észre, hogy általában a hely- és az impulzusoperátor komponensei egymás között felcserélhetőek, azaz

$$\hat{x}\hat{y} = \hat{y}\hat{x} \text{ és} \quad (6.38)$$

$$\hat{p}_x\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{p}_x, \text{ ugyanakkor} \quad (6.39)$$

$$\hat{x}\hat{p}_x \neq \hat{p}_x\hat{x}, \quad (6.40)$$

tehát a hely és az impulzus azonos komponensei nem felcserélhetőek. Konkrétan

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \cdot \text{id}_{\mathcal{H}}, \quad (6.41)$$

kanonikus kommutációs reláció adódik, amely tulajdonképpen megfelel a Heisenberg-féle határozatlansági relációnak, hiszen ebből (6.22) segítségével tetszőleges állapotban

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \langle |[\hat{x}, \hat{p}_x]| \rangle = \frac{\hbar}{2} \quad (6.42)$$

adódik (mivel ez tetszőleges állapotra igaz, ezért itt általánosan Δ_x és Δp szórásokat írtunk). Természetesen az időre és az energiára is ugyanilyen határozatlansági reláció vonatkozik:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (6.43)$$

amely szemléletesen azt jelenti, hogy E energiát t ideig „kölcönözhetünk”.

Érdeemes megemlíteni, hogy valójában a kvantummechanika eggyel korrektebb (matematikailag konzisztensebb) leírása érhető el, ha Borel-halmazokból, σ -véges mértékterekéből, és az ezekkel alkotott projektormértékekből indulunk ki, ez azonban túlmutat jelen jegyzeten, sőt, talán az egész fizikusoktatáson – érdeklődőknek például Matolcsi Tamás „Kvantumvalószínűség” című jegyzete ajánlható figyelmébe.

Gyakorlófeladat

Vegyük az $\hat{x} : \Psi \rightarrow \text{id}_{\mathbb{M}} \cdot \Psi$ és $\hat{p} : \Psi \rightarrow -i\hbar \nabla \Psi$ operátorokat. Tetszőleges Ψ állapotra vett hatásuk alapján közvetlenül határozzuk meg kommutátorukat, azaz igazoljuk a $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \text{id}_{\mathcal{H}}$ relációt!

6.4. A Schrödinger-egyenlet

Lássuk mindezek után, hogy a megismert operátorok alapján milyen fizikai rendszereknek milyen sajátállapotai lehetnek. Ha egy részecske egy adott, helyfüggő $V(x)$ potenciális energia által kialakított térben (pl. gravitációs vagy elektromos helyzeti energia) vesz fel egy statikus állapotot, akkor $E = E_{\text{kin}} + V(x)$. Tekintsünk az energiára és az impulzusra mint operátorokra, ekkor a

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi(x) + V(x) \Psi(x) = \hat{E} \Psi(x) \quad (6.44)$$

egyenlet adódik. Ha a részecske energia-sajátállapotban van, akkor $\hat{E} \Psi = E \Psi$. Itt az energiaoperátor helyett a $\hat{H} = \hat{E}$ Hamilton-operátorról is beszélhetünk, amely a rendszer teljes energiájának felel meg. A sajátérték-egyenletet is figyelembe véve megkapjuk

a **Schrödinger-egyenletet**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (6.45)$$

Itt tehát $V(x)$ a részecske mozgását befolyásoló potenciál avagy energia. Potenciál nélkül $\Psi(x) = \exp(ikx)$ síkhullám alak adódik. Időfüggő potenciál vagy nem statikus viselkedés esetén az energiaoperátor $\hat{E} = i\hbar\partial_t$ módon írható, tehát

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, t)\right)\Psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) \quad (6.46)$$

de hogy az időfüggést mely ponton engedjük meg, az már a kvantummechanikai képünk függvénye – Heisenberg-képben avagy Heisenberg-reprezentációban csak az operátoroknak van időfüggése, az állapotoknak nincs, míg Schrödinger-képben az operátorok időfüggetlenek, és az állapotoknak van időfüggése. Van egy harmadik, kölcsönhatási- avagy Dirac-kép is. Mindezekről azonban itt nem ejtünk szót, a kvantummechanika kurzuson és kvantummechanika jegyzetekben találkozhat velük az olvasó. Amennyiben a hullámfüggvény időfejlődésére vagyunk kíváncsiak, akkor az $i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi$ egyenletből

$$\Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(0) \quad (6.47)$$

adódik. Érdeemes észrevenni, hogy itt \hat{U} unitér operátor, másrészt hogy nem korlátos energia esetén matematikailag kicsit jobban oda kellhet figyelni, számunkra azonban többnyire megfelelő a fenti, egyszerűsített kezelésmód.

Érdeemes ugyanakkor feltenni a kérdést, hogy a Schrödinger-egyenlet által leírt folytonos időfejlődés mellett miként értelmezhető a nem folytonos hullámfüggvény-összeomlás, és pontosan mi számít mérésnek, ahogy az 5.5. szakaszban is említettük. Ez a téma jelenleg is aktívan kutatott, ugyanakkor (sajnos?) nem feltétlenül a „mainstream” kvantumfizikai kutatások része, még ha olyan elmék is foglalkoznak vele, mint 't Hooft vagy éppen Penrose.

További kiegészítésként megemlíthető, hogy Feynman a Huygens-elv (azaz hogy az új hullámfüggvény az előzőből megkapható, „a hullámfront minden pontja elemi hullámok kiindulópontja”) alapján ezt írta fel:

$$\Psi(x, t_2) = \int G(x, y)\Psi(y, t_1)dy, \quad \text{ha } t_2 > t_1, \quad (6.48)$$

majd az ebben szereplő $G(x, y)$ függvénybe (kernelbe) Dirac ötlete alapján az $S = \int \mathcal{L}$ hatásból kapott $\exp(iS/\hbar)$ kifejezést helyettesítve vezette le a Schrödinger-egyenletet. Ennek részleteit lásd pl. D. Derbes Am. J. Phys. **64** (7), 881 (1996) cikkében.

6.5. A harmonikus oszcillátor

Vegyünk most egy

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (6.49)$$

időfüggetlen Hamilton-operátorral (avagy energiaoperátorral) rendelkező harmonikus oszcillátort. A Schrödinger-egyenlet megoldásai ekkor a következők lesznek:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad (6.50)$$

ahol n egész szám, a $H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \partial^n e^{-y^2}$ függvények pedig az Hermite-polinomok. Az ezen állapotokhoz tartozó energiaszintek értékei

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (6.51)$$

lesznek. Az érdekesség kedvéért arra kérjük az olvasót, vesse ezt össze a Sommerfeld–Wilson-kvantálásról szóló 3.5. szakaszban tanultakkal! Ott az energiaszintekre hasonló eredményt kaptunk, egy fontos különbséggel: ott nem szerepelt az $1/2$ -es tag. Itt viszont igen, tehát a nulladik energiaszinthez (a „vákuumhoz”) tartozó energia sem nulla! Definiáljuk ezek után a

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p} \quad (6.52)$$

kanonikus változókat. Ezekkel

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2\right) \quad (6.53)$$

módon írható fel a Hamilton-operátor. Vezessük be ezután az

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{X} + i\hat{P}\right) \quad (6.54)$$

operátort, amelynek adjungáltja

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{X} - i\hat{P}\right) \quad (6.55)$$

lesz, amely az skalárszorzat definíciója alapján parciális integrálással belátható. Ezen operátorok fontos tulajdonsága, hogy

$$\hat{a}\Psi_n = \sqrt{n}\Psi_{n-1}, \quad (6.56)$$

$$\hat{a}^\dagger\Psi_n = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}, \quad (6.57)$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi_n = n\Psi_n, \quad (6.58)$$

azaz $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ egyfajta számoperátor, amely megadja az energiaszint sorszámát. Ezekkel az \hat{a} és \hat{a}^\dagger **léptető operátorokkal** a Hamilton-operátorra (a \mathcal{H} Hilbert-tér $\text{id}_{\mathcal{H}}$ identitásoperátorát bevezetve)

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{\text{id}_{\mathcal{H}}}{2}\right) \quad (6.59)$$

adódik, ugyanis $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\text{id}_{\mathcal{H}}$ miatt $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \text{id}_{\mathcal{H}}$ is igaz. Innen az is látszik, hogy $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ valójában az energiaszint nagyságát is megadja, $\hbar\omega$ egységekben, a $\hbar\omega/2$ zérusponti

energiától eltekintve. A fenti operátorok azért is lényegesek, mert sok fizikai probléma kezeléséhez elég ezeket és kommutációs relációikat felhasználni, a Schrödinger-egyenlet vizsgálata nélkül.

Gyakorlófeladat

Számítsuk ki az impulzus $\langle \hat{p} \rangle_n$ várható értékét a fentiekben leírt Ψ_n állapotokban!

6.6. A valószínűségi áram

Figyeljük meg, hogy mi adódik, ha a (6.46) Schrödinger-egyenletet (pontonként, tehát nem skalárisan) megszorozzuk a Ψ^* állapottal, illetve az egyenlet komplex-konjugáltját Ψ -vel, majd a két egyenlet különbségét vesszük:

$$\begin{aligned} \Psi^*(x, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \Psi(x, t) - \Psi(x, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \Psi^*(x, t) = \\ i\hbar \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) + i\hbar \Psi(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x, t). \end{aligned} \quad (6.60)$$

Ekkor az időderiváltakból ez lesz:

$$i\hbar \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} + \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \right) = i\hbar \frac{\partial |\Psi(x, t)|^2}{\partial t} = i\hbar \partial_t P(x, t), \quad (6.61)$$

ez tehát a $P = |\Psi|^2$ valószínűségsűrűség időderiváltjával arányos. A Schrödinger-egyenlet másik oldala esetében a potenciállal arányos tagok kiesnek, és az alábbi marad:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = -i\hbar \nabla j_P, \quad (6.62)$$

ahol bevezettük a

$$j_P = i \frac{\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (6.63)$$

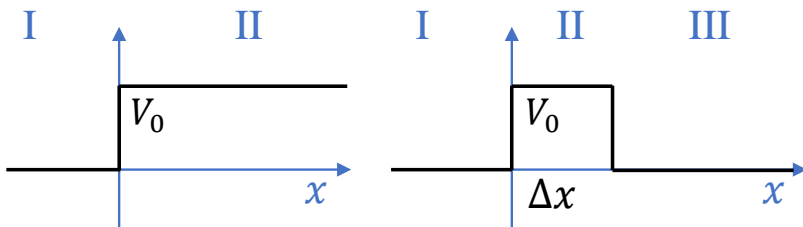
valószínűségi áramot. Erre a fentiek alapján a

$$\partial_t P + \nabla j_P = 0 \quad (6.64)$$

kontinuitási egyenlet adódik, ami azt jelenti, hogy a valószínűség lokálisan megmarad, ami az időfejlődés unitér voltával függ össze. Síkhullám esetében j_P időfüggetlen, stationárius, és mivel $\nabla \Psi = ik\Psi$, így

$$j_P = \frac{i\hbar}{2m} (-ik - ik) |\Psi|^2 = \frac{\hbar k}{m} |\Psi|^2, \quad (6.65)$$

ami $|\Psi|^2 = 1$ esetében $j_P = \frac{\hbar k}{m} = v$ miatt a részecske sebességét adja vissza.



33. ábra. Részecske áthaladása kétféle helyfüggő potenciálon

6.7. A Schrödinger-egyenlet alkalmazásai

A valószínűségi áramot, illetve a hullámfüggvény alakulását érdemes megvizsgálnunk különféle, szakadással rendelkező potenciálok esetén (illusztrációnak lásd a 33. ábrát).

Ilyenkor noha $\Delta\Psi$ -nek szakadása van (ez a potenciál ugrása miatt elkerülhetetlen), Ψ és $\nabla\Psi$ is folytonos a határon. Ennek belátásához legyen olyan potenciálunk, amely V_I értéket vesz fel $x < x_0$ esetén, míg V_{II} értéket $x \geq x_0$ esetén. Integráljuk a Schrödinger-egyenlet két oldalát a „határt” tartalmazó $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ intervallumra:

$$i\hbar \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x) \Psi(x), \text{ azaz} \quad (6.66)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right]_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} + V_I \int_{x_0-\epsilon}^{x_0} \Psi(x) + V_{II} \int_{x_0}^{x_0+\epsilon} \Psi(x). \quad (6.67)$$

Vegyük észre, hogy ha Ψ korlátos függvény, akkor az $\epsilon \rightarrow 0$ határesetben az így adódó infintezimális intervallumra vett integrálja nulla, amiből ez adódik:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \Big|_{x_0-\epsilon} - \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \Big|_{x_0+\epsilon} \right] = 0, \quad (6.68)$$

azaz Ψ deriváltja folytonos a határon. Egyúttal itt említjük meg azt is, hogy ez a levezetés megmutatja, hogy valóban jogos a helyzeti energia operátoraként a Schrödinger-egyenletben egy $V(x)$ potenciállal való szorzást szerepeltetnünk – ha $V(x)$ -et lépcsős függvényként képzeljük el, akkor minden lépcsőnél a Ψ második deriváltjának lesz szakadása, Ψ és az első deriváltja folytonos marad.

Legyen most tehát egy V_0 potenciállépcső a 33. ábra bal oldalának megfelelően, és egy E energiájú részecske. A teljes energia, illetve a hozzá kapcsolódó ω körfrekvenencia nem változik meg, viszont k igen. Így tehát a lépcső bal és jobb oldalán ezek az összefüggések lesznek érvényesek a k , illetve k' hullámszámokra:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (6.69)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_0 \quad \Rightarrow \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}, \quad (6.70)$$

ha a részecske energiájára igaz az $E > V_0$ feltétel. Ekkor a 33. ábra bal oldalának I. régiójában az alap, $Ae^{ikx - i\omega t}$ bejövő hullámon kívül lesz egy visszaverődő, $Be^{ikx - i\omega t}$

hullám is, a II. régióban pedig egy $Ce^{ik'x-i\omega t}$ hullám (mivel ebben a régióban a balra haladó a végtelenből jönne, ami nem fizikai):

$$\Psi_{\text{I}} \propto Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (6.71)$$

$$\Psi_{\text{II}} \propto Ce^{-ik'x}. \quad (6.72)$$

Az $x = 0$ pontban vett folytonosság megköveteli, hogy $A + B = C$ legyen. A derivált folytonossága ezenkívül azt is megköveteli, hogy $ikA - ikB = ik'C$ legyen. Így összességében

$$C = A \frac{2k}{k+k'}, B = A \frac{k-k'}{k+k'} \quad (6.73)$$

adódik. Az áthaladás valószínűségi árama (6.65) miatt $j_{\text{át}} = |C|^2 \hbar k' / m$ lesz, míg a visszaverődésé $j_{\text{vissza}} = -|B|^2 \hbar k / m$. Ezekben a B és C amplitúdókra vonatkozó iménti kifejezéseket behelyettesítve ezt kapjuk:

$$j_{\text{át}} = \frac{\hbar k'}{m} |C|^2 = \frac{\hbar k'}{m} \frac{4k^2}{(k+k')^2} |A|^2, \quad (6.74)$$

$$j_{\text{vissza}} = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2 = -\frac{\hbar k (k-k')^2}{m (k+k')^2} |A|^2. \quad (6.75)$$

Innen a reflexióra és a transzmisszió r és t valószínűségére a $j_{\text{be}} = |A|^2 \hbar k / m$ bemenő árammal összevetve

$$r = \frac{|j_{\text{vissza}}|}{j_{\text{be}}} = \frac{(k-k')^2}{(k+k')^2}, \quad (6.76)$$

$$t = \frac{j_{\text{át}}}{j_{\text{be}}} = \frac{4kk'}{(k+k')^2}, \quad (6.77)$$

adódik, és természetesen $r + t = 1$. A klasszikus képben pedig $r = 0$ és $t = 1$, az ettől való eltérés, azaz a nem nulla valószínűségű visszaverődés a kvantummechanika következménye.

Legyen most $E < V_0$. Ekkor a II. régióban $k' = i\kappa$ bevezetésével

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (6.78)$$

és ekkor $\exp \kappa x$ és $\exp -\kappa x$ megoldások lehetségesek. Ezek közül az első „nem fizikai”, hiszen ez korlát nélkül erősödő amplitúdót adna. Így végül a két régióban ezek a hullámfüggvények alakulnak ki:

$$\Psi_{\text{I}} \propto Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (6.79)$$

$$\Psi_{\text{II}} \propto Ce^{-\kappa x}. \quad (6.80)$$

Mivel az átjutó (II.) hullám tisztán valós, így $j_{\text{át}} = 0$ és $t = 0$, és hasonlóan $r = 1$. Ugyanakkor a részecske nem nulla valószínűséggel megtalálható a klasszikusan tiltott régióban is (tehát a hullámfüggvény abszolút értékének négyzete nem nulla). Konkrétan

x mélységben $\exp(-2\kappa x)$ valószínűséggel tartózkodik a részecske (ahol a kettes a valószínűség kiszámításakor vett négyzetből származik). A behatolás Δx mélysége legyen úgy definiálva, hogy itt $1/e$ a megtalálási valószínűsége, ezzel:

$$\Delta x = \frac{1}{2}\kappa = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(V_0 - E)}}. \quad (6.81)$$

Ez tulajdonképpen a határozatlansági relációnak felel meg, ugyanis a részecske „kölcsönvesz” $\hbar\kappa$ impulzust, amelyet viszont csak $1/2\kappa$ távolságon tud megtartani, a kettő szorzata a Heisenberg-féle relációnak megfelelően $\hbar/2$.

Nézzük meg, mi történik egy szintén V_0 magasságú, de ezúttal csak Δx széles potenciálgáton való áthaladáskor, ahogy az a 33. ábra jobb oldalán látható. Legyen $E < V_0$. Ekkor három hullámfüggvényünk lesz a három régióban:

$$\Psi_{\text{I}} \propto Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (6.82)$$

$$\Psi_{\text{II}} \propto Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad (6.83)$$

$$\Psi_{\text{III}} \propto Ee^{ikx} + Fe^{-ikx}, \quad (6.84)$$

ahol az energiamegmaradás miatt két „szabad régióban” (ahol $V = 0$) azonos a hullámszám, és

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \text{ és} \quad (6.85)$$

$$\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad (6.86)$$

ismét. Mivel jobbról, a végtelenből nem jön részecske, ezért $F = 0$, a többi együtthatót a két határon adódó két-két határfeltételből kaphatjuk meg (ami négy egyenlet, tehát minden együtthatót meg tudunk határozni). A számolás részleteitől eltekintve csak az áthaladás (transzmisszió) valószínűségét adjuk meg a $\kappa\Delta x \gg 1$ határesetben:

$$t = \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa\Delta x}. \quad (6.87)$$

Ez azt jelenti, hogy véges valószínűséggel a potenciálgáton is áthalad a részecske, és az áthaladás a potenciálgát Δx szélességével exponenciálisan csökken. Vegyük észre itt is a határozatlansági reláció megjelenését: a részecske egy kis időre „kölcsönvesz” valamennyi energiát, és az idő és az energia szorzata itt is \hbar nagyságrendű.

A pásztázó alagútmikroszkóp (STM, Binning és Rohrer, Nobel-díj 1986) elvét is megérthetjük ezen keresztül. Fémekben ugyanis egy potenciálgödörben vannak az elektronok, vagyis az egyik oldalon egy potenciállépcsővel néznek szembe, és csak az ennek megfelelő kilépési munka befektetése árán léptethetjük ki őket onnan. Ha azonban a fém egyik oldalán egy $V \propto x$ potenciált építünk ki (azaz konstans elektromos teret), akkor az tulajdonképpen egy „fűrészfog” alakú potenciálgátat hoz létre (potenciállépcső helyett), és emiatt az elektronok mégis nem nulla valószínűséggel ki fognak lépni a fém-ből (ezt nevezzük téremisszióknak). Mivel azonban a kilépő elektronok áramát $e^{-2\kappa\Delta x}$ határozza meg, így ez a rögzített síkban mozgó túl alatti anyag szerkezetét árulja el nekünk.

Legyen most egy Δx szélességű, V_0 mélységű potenciálgödör, amelyben egy $-V_0 < E < 0$ kötött részecske van jelen. Mivel negatív az energiája, így a gödrön kívül mindenhol tisztán valós, $\exp -\kappa x$ jellegű amplitúdóval rendelkezik, és ennek árama nulla

– azaz mindkét falon teljes visszaverődés alakul ki. Emiatt bent a gödörben időben állandó valószínűséggel van a részecske. A gödör két szélén vett határfeltételek megadják a hullámfüggvények relatív erősségét, ugyanakkor itt azt kell megkövetelnünk, hogy a falakról visszaverődő hullámok konstruktív interferenciát alakítsanak ki. Ebből végeredményben kvantált energiájú, diszkrét spektrum alakul ki. Ha végtelen magas falú potenciálgödör van, és benne egy E energiájú részecske, akkor is hasonló eredményre jutunk.

Gyakorlófeladat

Legyen egy $m = 500 \text{ keV}/c^2$ tömegű részecskénk, amelynek energiája 400 eV . Érkezzen ez egy 800 eV nagyságú, 10 pm széles potenciálgáthoz. Mekkora a részecske átjutásának (az alagúteffektus megvalósulásának) valószínűsége?

6.8. A radioaktivitás

A kvantummechanika további fontos következménye a **radioaktivitás**, amelyet a hullámfüggvény időfüggésnek vizsgálatával érdemes tárgyalni.¹⁷ Ez valamelyest túlmutat jelen jegyzet keretein, de röviden annyit mondhatunk, hogy a Schrödinger-egyenletet olyan időfüggő alakban is felírhatjuk, ahol jobb oldalon $E\Psi$ helyett $i\hbar\partial_t\Psi$ jelenik meg. Az ezt megoldó függvényekben (a potenciál alakjától függően) jellemzően $\exp(-iEt/\hbar)$ szerepel. Elképzelhető ugyanakkor, hogy bizonyos potenciálok esetén a hullámfüggvényben $\exp(-i(E + i\Gamma t))$ jelenik meg, ahogy az alagúteffektus leírásakor is $\exp(-\kappa x)$ adódott. Ekkor a létezés teljes valószínűsége csökken, azaz a teljes térre vett integrál

$$\int |\Psi|^2 = e^{-2\Gamma t} = e^{-\lambda t} \quad (6.88)$$

módon adódik, ahol $\lambda = 2\Gamma$. Az ilyen részecskét vagy állapotot instabilnak nevezzük. Ilyen esetben amikor észlelni akarjuk az adott részecskét, arra juthatunk, hogy az sehol sincs, azaz megszűnt létezni, elbomlott. Ez valójában nem a „semmibe” történik, hanem egy új állapot jön létre – jellemzően egy gerjesztett állapotot leíró hullámfüggvény ilyen, ekkor a bomlás egy kisebb energiájú állapot létrejöttét is jelenti.

Egy adott instabil részecskéről/állapotról nem tudhatjuk előzetesen, hogy mikor fog elbomlani, azaz mely időpillanattól kezdve nem lesz észlelhető. Ugyanakkor az észlelés valószínűségét megadja a fenti $e^{-\lambda t}$ kifejezés. Az adott instabil részecske bomlása átlagosan ezen valószínűségnek megfelelően következik be, és sok ilyen részecske esetén az el nem bomlottak száma is követi ezt a függvényt. Ezért ezt az instabilitást egy

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (6.89)$$

felezési idővel jellemezhetjük: ha N részecske van jelen egy adott időpontban, akkor T idő múlva nagy pontossággal fele annyi, $N/2$ lesz. A részecskék számának időfüggése ilyenkor

$$N(t) = N(0) \cdot e^{-\lambda t} = N(0) \cdot 2^{-t/T}, \quad (6.90)$$

¹⁷ Időfüggetlen felírás is létezik, hasonlóan az alagúteffektusnál írtakhoz, de mivel az elbomlott részecskék számát az idő függvényében szoktuk vizsgálni, ezért időfüggő hullámfüggvényekkel szemléletesebb a tárgyalás.

amely pontosan az előző mondatban leírt állítást vonja maga után, azaz hogy minden egyes T idő elteltével a részecskék száma újra és újra feleződik. Sok atommag is ilyen hullámfüggvénnyel írható le, azaz instabil – többnyire valamilyen kvantummechanikai potenciálgát jelenik meg ezekben, és ennek nagysága határozza meg a bomlást jellemző λ állandó értékét. Ezek bomlását nevezzük radioaktivitásnak. Az ilyen atommagok kibocsáthatnak magukból α -részecskét (héliumatommagot), γ -sugárzást, β -sugárzást (ilyenkor egy neutron alakul át protonná, elektron kibocsátása mellett), de létezik neutron- és protonkibocsátás is. Mindez a magfizikáról szóló 9.–10. fejezetekben is előkerül még.

6.9. Az időfüggetlen perturbációs számítás

Sok esetben a Schrödinger-egyenletben olyan potenciáli szerepel, amellyel egzakt megoldás nem adható meg. Előfordulhat azonban, hogy egy „kicsit máslyen” potenciállal viszont ismert a megoldás. A kis módosításból adódó korrekciót ilyenkor az úgynevezett időfüggetlen perturbációs számítás segítségével határozzuk meg. Ennek vizsgálatához adjunk hozzá a Hamilton-operátorhoz egy kis paraméterrel (itt konkrétan λ -val) szorzott, a perturbációt okozó potenciálnak megfelelő operátort:

$$H = H^{(0)} + \lambda V. \quad (6.91)$$

Legyenek az eredeti Hamilton-operátor sajátállapotai $\Psi_n^{(0)}$ állapotok, $E_n^{(0)}$ sajátértékekkel (vagyis legyen $\{E_n^{(0)}, n \in \mathbb{N}\}$ a spektruma). Az új Hamilton-operátor spektrumát és sajátállapotait fejtsük sorba λ szerint:

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots, \quad (6.92)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots. \quad (6.93)$$

Ezzel a sajátérték-egyenlet így alakul:

$$(H^{(0)} + \lambda V)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \dots), \quad (6.94)$$

amely $\lambda \ll 1$ feltevése mellett λ -ban első rendig sorba fejtvé egyszerűsíthető:

$$H^{(0)} \Psi_n^{(0)} + \lambda H^{(0)} \Psi_n^{(1)} + \lambda V \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} + \lambda E_n^{(0)} \Psi_n^{(1)} + \lambda E_n^{(1)} \Psi_n^{(0)}. \quad (6.95)$$

Vegyük észre, hogy itt a nulladrendű tagok az eredeti sajátérték-egyenlet miatt kiesnek, a maradékban pedig λ -val egyszerűsíthetünk, és így ezt kapjuk:

$$H^{(0)} \Psi_n^{(1)} + V \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \Psi_n^{(0)}. \quad (6.96)$$

Skalárisan szorozzuk most ezt az egyenletet balról a $\Psi_n^{(0)}$ állapottal:

$$\langle \Psi_n^{(0)}, H^{(0)} \Psi_n^{(1)} \rangle + \langle \Psi_n^{(0)}, V \Psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \langle \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)} \rangle. \quad (6.97)$$

Vegyük észre, hogy az első tagban a $H^{(0)}$ operátor – önadjungáltsága miatt – átvihető a szorzat bal oldalára, ott pedig alkalmazhatjuk a sajátérték-egyenletet, tehát $E_n^{(0)}$ jelenik meg szorzóként. Ez azt jelenti, hogy a fenti egyenlet két oldalának első tagja azonos lesz. A jobb oldal második tagjában pedig $\Psi_n^{(0)}$ normája szerepel, amelyet egynek vehetjük. Mindezek után így írható fel az energiasajátérték módosulásának értéke:

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V \Psi_n^{(0)} \rangle = \langle V \rangle_{\Psi_n^{(0)}} = \langle V \rangle_n. \quad (6.98)$$

Ezt λ -val szorozva a bal oldalon a $\Delta E_n = \lambda E_n^{(1)}$ energiaeltolódást kapjuk, a jobb oldalon pedig λV , a teljes perturbáló potenciál szerepel. Ez azt jelenti, hogy a perturbációs számítás első rendje szerint az energiaeltolódás a perturbáló potenciál várható értéke – a perturbálatlan (eredeti) állapotban. A későbbiekben a λ paramétert egyszerűen beledefiniálhatjuk a perturbáló operátorba és az energiaszintek eltolódásába is, és így is egyszerűen

$$\Delta E_n = \langle V \rangle_n \tag{6.99}$$

lesz az energiaperturbáció.

7. Perdület és sajátperdület a kvantummechanikában

7.1. A perdületoperátor

Az előzőkben láttuk, hogy mi a hely és az impulzus operátora. Vajon mi a perdületé? Ezt körüljárandó elsőként gondoljunk vissza a Stern–Gerlach-kísérletre. Ez alapján az atomok mágneses momentumának adott irányú vetülete kvantált (azaz diszkrét értékeket vehet fel), az Einstein–de Haas-kísérlet eredményei alapján pedig ez a perdületvetületek kvantáltságát is jelenti. Az atomok perdületének különböző irányokba vett vetületeit is vizsgálhatjuk egymás utáni Stern–Gerlach-mérésekkel, ahogy a 34. ábrán látható. Ennél a megismételt felbontásnál technikailag az a fontos, hogy a két mágnes közötti átmenet az atom belső elektromágneses válaszához képest legyen gyors, ami megvalósítható. Megemlítendő ezenkívül, hogy noha ez a téma (az egymás utáni Stern–Gerlach-méréseké) a standard kvantummechanika-könyvek része, értelmezése ma is kutatott: lásd például Benitez Rodríguez Phys. Rev. **A103** (2021) 042217 cikkét minderről. Ha kétszer egymás után y (a 34. ábrán „fel-le”) irányú szelekciót végzünk, a nyalábok nem bomlanak fel újra. Az y irányú után x irányú („jobbra-balra”) felbontást végezve viszont mindkét eshetőség előfordulhat. Talán a legérdekesebb, hogy ha egy y , majd egy x irányú felbontás után megint egy y irányú felbontást veszünk (mindig csak az egyik komponenst vizsgálva újra), akkor megint felbomlik a nyaláb. Ez azt mutatja, hogy nem szelekció történik, hanem ténylegesen megváltozik az atomok állapota (egyes interpretációkban az atomok állapotáról alkotott tudásunk) a „mérés” során. Hogyan érthetjük ezt meg a kvantummechanika alapján? Természetesen úgy, hogy a perdület is egy fizikai mennyiség, és így az operátorát kell vizsgálni, és ennek (illetve vetületeinek, avagy komponenseinek) diszkrét lehetséges sajátértékei vannak. A perdület adott irányú vetületei pedig nem kommutáló (azaz nem felcserélhető) operátorok, így különbözőek a sajátértékeik.

Hogyan írjuk fel ezután a perdület operátorát? Mivel a **pályaperdület** definíciója klasszikusan $L = r \times p$, így operátorosan is legyen

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar \hat{r} \times \nabla. \quad (7.1)$$

Ez szintén vektoroperátor, amely a perdületértékek vektorterének és az állapottérnek a tenzorszorzatterébe képez (valójában a modern elméleti fizikában a klasszikus perdület is a tér és az impulzustér külső szorzatában veszi fel értékeit, tehát ezt kellene a standard állapottérrel tenzorszorozni, de ez túlmutat jelen jegyzeten és kurzuson).

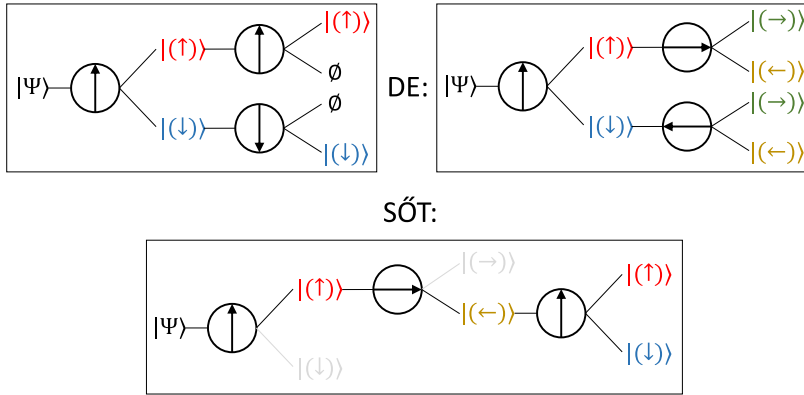
Ha bevezetünk egy (x, y, z) bázist, akkor a perdületoperátor komponenseit (vagyis a perdület vetületeinek operátorát)

$$\hat{L}_x = \hat{r}_y \hat{p}_z - \hat{r}_z \hat{p}_y = i\hbar(z\partial_y - y\partial_z), \quad (7.2)$$

$$\hat{L}_y = \hat{r}_z \hat{p}_x - \hat{r}_x \hat{p}_z = i\hbar(x\partial_z - z\partial_x), \quad (7.3)$$

$$\hat{L}_z = \hat{r}_x \hat{p}_y - \hat{r}_y \hat{p}_x = i\hbar(y\partial_x - x\partial_y) \quad (7.4)$$

módon írhatjuk fel. Ezekre az $[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}\text{id}_{\mathcal{H}}$ kanonikus kommutációs relációk se-



34. ábra. Egymás utáni Stern–Gerlach-mérések eredményei. A mérés irányát (azaz hogy milyen irányú vetületet mérünk) a körben elhelyezett nyíl mutatja. Az atomnyaláb z irányú, a első mérés pedig y irányú. A második mérés a bal felső esetben szintén y irányú, jobb fent és alul pedig x irányú; míg alul egy harmadik mérés is szerepel, ismét y irányban. Az első mérés mindig kettéosztja a nyalábot. A jobb felső ábra azt mutatja, hogy újra ugyanazt a perdületvetületet mérve mindig ugyanazt az eredményt kapjuk. A jobb felső ábra azt illusztrálja, hogy egy másik irányú vetületet mérve mindkét eshetőség előfordulhat. Ha ugyanakkor ismét az eredeti irányú vetületet mérjük, ahogy az alsó ábra mutatja, akkor ismét mindkét eshetőség előfordul; annak ellenére, hogy ez a résznyaláb már csak „fel” típusú állapotokból állt eredetileg.

gítségével egyszerűen belátható, hogy

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad (7.5)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad (7.6)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y, \quad (7.7)$$

vagy általánosan (a triviális önkommütálást is leírva):

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \hat{L}_l, \quad (7.8)$$

ahol ϵ_{jkl} Levi-Civita-szimbólum¹⁸. Érdekeséggéppen megemlíthető, hogy mivel éppen ezek a szimbólumok a vektoriális szorzatban is használatosak, így a fenti egyenlet ekvivalens az $\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar\hat{L}$ kifejezéssel. Az itt megadott nem kommutálás (nem felcserélhetőség) tehát azt jelenti, hogy a kísérleteknek megfelelően akárcsak két vetületet sem lehet *egyszerre* pontosan meghatározni, a (6.22) egyenletben adott határozatlansági reláció miatt. Érdeemes azonban tudni, hogy a három perdületkomponens tekintetében korántsem olyan triviális a konkrétan adódó határozatlanság, mint \hat{r} és \hat{p} esetén, ahogy például Dammeier és munkatársai New J. Phys. **17** (2015) 093046 cikkében olvashatjuk.

Ahogy a következő szakaszban látni fogjuk, a perdületoperátor komponensei a forgáscsoport algebrájának generátorai. Ismert (bár esetleg túlmutat a jelen kurzushoz

¹⁸ Itt kivételesen két kiskötőjel van, ugyanis ez a szimbólum (amelyet nem hívunk tenzornak, ugyanis nem transzformálódik megfigyelő váltásakor) egyetlen ember, Tulio Levi-Civita után kapta a nevét.

kapcsolódó vagy azt megelőző matematikai tárgyakon), hogy az ilyen generátorok négyzetösszege az algebra Casimir-eleme (Casimir-operátor), amely az algebra minden elemével felcserélhető, azaz a kommutátora tetszőleges operátorral nulla. Ez a bizonyos Casimir-operátor itt a $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ operátor. Ez bármely perdületvetülettel együtt mérhető tehát, és így egyszerre meghatározható a perdület nagysága és adott irányú vetülete.

Gyakorlófeladat

Ellenőrizzük, hogy \hat{L}^2 és \hat{L}_z tényleg kommutálnak-e egymással! Ehhez használhatjuk a fent adott kommutációs relációkat.

7.2. Perdület-sajátállapotok

A perdületkomponensek nem felcserélhetőek, tehát sajátállapotaik különbözőek – azonban ezek természetesen egymás elforgatottjai, ezért elegendő az egyik komponens sajátállapotait megkeresni. Legyen ez az \hat{L}_z operátor, amely az előző fejezet (7.4) egyenlete alapján gömbi koordinátákban egyszerűen

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (7.9)$$

módon írható fel, míg az \hat{L}^2 operátor alakja az alábbi lesz:

$$\hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (7.10)$$

Ezen operátorok sajátállapotai a gömbfüggvények, amelyek l és $m = l_z$ egész számokkal indexelhetőek, amelyekre a $l \geq 0$ és $|m| \leq l$ relációk igazak. Az ezekkel számozott hullámfüggvények pedig a következők:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (7.11)$$

ahol P_{lm} a Legendre-polinomokat jelöli. Az ezen állapotokhoz tartozó perdület-sajátértékek pedig az

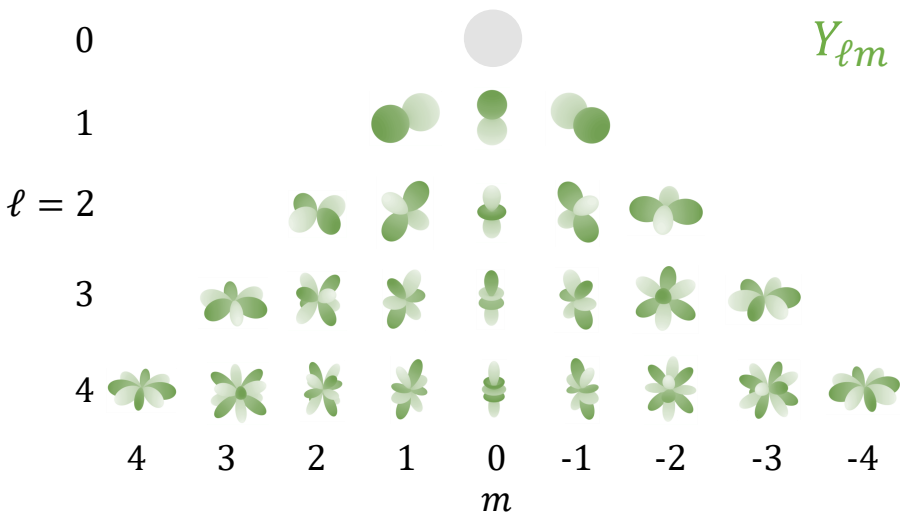
$$\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}, \quad (7.12)$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad (7.13)$$

egyenleteknek megfelelően adódnak.

A perdület-sajátállapotok azért is fontosak, mert a kinetikus energia operátora szétválasztható a perdületre és a radiális impulzusra

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}. \quad (7.14)$$



35. ábra. Az ábrán az Y_{lm} gömbfüggvények szögfüggése látható: az egyes felületek origótól vett távolsága a gömbfüggvény értékének nagyságát jelöli (a függvények nem függenek a gömbi koordinátákban vett sugárváltozótól, csak a szögektől). A sötétebb árnyalat a negatív, a világosabb a pozitív függvényértékeket jelöli.

Ez a kifejezés gömbi koordinátákban így írható fel:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (7.15)$$

Ha a potenciál csak a távolságtól függ (azaz a szögektől nem), akkor a teljes energia operátorában csak a kinetikus energia ad szögfüggést, és így ilyenkor a (7.11) gömbfüggvények az energia-sajátállapotok szögfüggő részét is megadják. Ahogy fent írtuk, az \hat{L}^2 és \hat{L}_z operátorok sajátállapotait az l és m egész számokkal indexelhetjük, a hozzájuk tartozó sajátértékek pedig $\hbar^2 l(l+1)$ és $\hbar m$. Szögfüggetlen potenciál esetén az energia-sajátállapotokat is az ezen két operátor szerinti sajátértékekkel szoktuk jellemezni, tetszőleges irányt kijelölve (és a konvenció szerint ezt z -vel jelölve) m (avagy l_z) és l értékeivel, ahol $|m| \leq l$. Minderre később, a hidrogénatom tárgyalásakor visszatérünk, ahol azt is látni fogjuk, hogy míg a Stern–Gerlach-jellegű kísérletekben csak a perdület vetületeit mérhetjük, a hidrogénatom spektruma a perdület nagyságáról is árulkodik majd.

7.3. A perdület és a forgatások kapcsolata

Emlékezzünk vissza a 6.3. szakaszra, ahol a (6.35) egyenletben megmutattuk, hogy az impulzusoperátor az eltolások generátora. Vizsgáljuk meg most hasonló módon a $\mathbb{M} = \mathbb{R}^3$ térben forgatásokat. Jelölje $R(\vec{\theta})$ a $\vec{\theta}$ tengely körüli $\theta = |\vec{\theta}|$ szögű forgatást (egyezményesen a jobbkéz-szabálynak megfelelően). Ekkor könnyű belátni, hogy $R^T(\vec{\theta})R(\vec{\theta}) = 1$ és $\det R(\vec{\theta}) = 1$. Ez definiálja (háromdimenziós térben) az $SO(3)$ forgáscsoportot. Vegyük itt észre, hogy egy infinitezimális $\vec{\epsilon} = (0, 0, \epsilon)$ forgatásra a forgásmátrix (itt külön fel nem írt, de általánosan ismert) alakját figyelembe véve a $\cos \epsilon \rightarrow 1$

és $\sin \epsilon \rightarrow \epsilon$ elsőrendű közelítéssel

$$R(\vec{\epsilon}) = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \text{id}_{\mathbb{M}} + \epsilon \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \text{id}_{\mathbb{M}} - \epsilon \frac{i}{\hbar} J_z = e^{-\epsilon \frac{i}{\hbar} J_z} \quad (7.16)$$

adódik. Az x és y tengelyek körüli forgatások esetére is hasonló kifejezéseket kapunk, az ezekben szereplő $J_{x,y,z}$ mátrixok pedig

$$J_x = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.17)$$

módon írhatóak fel. Ezek után a 6.3. szakaszban bemutatott eltolások esetéhez hasonlóan véges forgatásokra

$$R(\vec{\theta}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \cdot \vec{J}\right), \quad (7.18)$$

ahol $k = x, y, z$ esetére a J_k antiszimmetrikus mátrixok az $SO(3)$ csoport generátorai. Az antiszimmetrikusság közvetlenül az $R^T(\theta) = R^{-1}(\theta) = R(-\theta)$ tulajdonságból adódik, hiszen emiatt $\exp(\theta_k J_k^T) = \exp(-\theta_k J_k)$, és így a J_k mátrixok az antiszimmetrikus mátrixok terének egy bázisát is megadják. Hogy így valóban az $SO(3)$ csoport elemeit kapjuk meg (azaz a fenti exponenciálisok szorzata továbbra is hasonló exponenciálisként írható fel), az azért is lehetséges, mert valójában az $\exp A \exp B$ jellegű szorzatban az $[A, B]$, $[A, [A, B]]$ stb. kommutátorok jelennek meg, azonban a fenti J_k mátrixokra éppen a (7.8) jellegű egyenlet lesz érvényes, azaz $[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} \hat{J}_l$.

Jelölje ezek után $\mathcal{R}(\vec{\theta})$ (amelyben „írott R” szerepel, szemben az előző bekezdés $R(\vec{\theta})$ mátrixával) azt a hullámfüggvényekre ható operátort, amelyre

$$\left(\mathcal{R}(\vec{\theta})\Psi\right)(\vec{r}) = \Psi(R^{-1}(\vec{\theta})\vec{r}), \text{ azaz} \quad (7.19)$$

$$\mathcal{R}(\vec{\theta})\Psi = \Psi \circ R(-\vec{\theta}), \quad (7.20)$$

ahol \circ a kompozíciót jelöli, tehát először az $R(-\vec{\theta})$ hat az az \vec{r} vektorra, majd utána Ψ . Mindez azt jelenti, hogy az állapot forgatása a helyvektor inverz forgatásának felel meg, és figyelembe vettük, hogy egy forgatás inverze éppen az ellentétes szögű forgatás. Mivel infinitezimális $\vec{\epsilon} = (0, 0, \epsilon)$ körüli forgatásra

$$R^{-1}(\vec{\epsilon})\vec{r} = R(-\vec{\epsilon})\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 & \epsilon & 0 \\ -\epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + \epsilon y \\ y - \epsilon x \\ z \end{pmatrix}, \quad (7.21)$$

így

$$\left(\mathcal{R}(\vec{\epsilon})\Psi\right)(\vec{r}) = \Psi \begin{pmatrix} x + \epsilon y \\ y - \epsilon x \\ z \end{pmatrix} = \Psi(\vec{r}) + \epsilon y \partial_x \Psi(\vec{r}) - \epsilon x \partial_y \Psi(\vec{r}) = \left(\Psi - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{L}_z \Psi\right)(\vec{r}), \quad (7.22)$$

ahol éppen a korábban definiált $\hat{L}_z = i\hbar(y\partial_x - x\partial_y)$ perdületoperátor jelenik meg! Ebből egyszerűen belátható, hogy véges szöggel történő, tetszőleges irányú forgatásokra

$$\mathcal{R}(\vec{\theta})\Psi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\theta} \cdot \hat{L}\right), \quad (7.23)$$

tehát az $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ perdületoperátor a forgatások $SO(3)$ csoportjának (illetve általánosabban az $SU(2)$ csoport) generátora.

7.4. A sajátperdület

A perdületoperátor és sajátállapotainak megismerése után idézzük fel az Einstein–de Haas-kísérlet és a Stern–Gerlach-kísérlet eredményeit. Ezekben több érdekes dolgot tapasztaltunk:

- Az atomnyaláb inhomogén mágneses térben diszkrét részekre szakad fel, a mágneses momentum adott irányú vetülete tehát kvantált.
- A klasszikus fizikai jóslat alapján a mágneses momentum a perdülettel $\mu = eL/2m$ kapcsolatban van, és kvalitatív értelemben meg is erősíti a két mennyiség kapcsolatát az Einstein–de Haas-kísérlet, tehát a perdület vetülete is kvantált.
- A klasszikus ponttöltésre adódó eredményt cáfolja a kísérleti eredmény. Az összefüggés $\mu = geL/2m$ módon írható fel, ahol g a μ és L kapcsolatát leíró giromágneses faktor. Ennek értéke klasszikusan $g = 1$ lenne, de a valóságban ettől eltérés adódik: általában 1 és 2 közötti értékeket mérünk. Mi lehet ennek az eredete?
- További meglepetés, hogy egyes atomok esetén a perdület páros számú lehetséges vetülete jelenik meg, ami a $-l, \dots, l$ sémába nem illik bele: eszerint csak páratlan számra való felhasadás lenne lehetséges.

A perdület kvantálása a perdületoperátor sajátértékeit vizsgálva egyértelműen adódott, ez a fentiek közül az első két pontot megoldja. A többi kérdés azonban továbbra is nyitva van; ezeket a következőkben megkíséreljük értelmezni.

A Sommerfeld-féle kvantálás tárgyalásakor definiáltuk már a mágneses momentum kifejezésében a Bohr-magnetont is:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \approx 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}} \approx 5,788 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}}. \quad (7.24)$$

Ezzel $L_z = \hbar l_z$ perdületvetület esetén

$$\mu_z = g\mu_B l_z \quad (7.25)$$

mágnesesmomentum-vetület adódik. A kérdés tehát az, hogy miért különbözik az ebben szereplő g faktor értéke egytől. Ahogy az alábbiakban látni fogjuk, az atomi elektron mágneses momentuma csak részben származik az L -lel leírt pályaperdületből: az elektronnak van egyfajta belső perdülete is. Ezt **sajátperdületnek**, **spinnek** neveztek el, amely szintén hozzájárul a teljes perdülethez és így a mágneses momentumhoz is, módosítva g értékét.

A spin a pályaperdülethez hasonló tulajdonság, kvantummechanikailag is részben hasonlóan kezelendő. Erre a következőkben még visszatérünk, de addig is, néhány egyszerű tulajdonságát figyelembe vehetjük. Konstruáljuk meg a spinoperátort úgy, hogy a perdülethez hasonlóan igaz rá legyen rá: a négyzete és valamely vetülete egyszerre mérhető. Előbbi rendelkezzen

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1) = \frac{3\hbar}{4} \quad (7.26)$$

sajátértékekkel, ahol elektronok esetén mindig $s = 1/2$. A spin vetületének pedig legyen

$$S_z = \hbar s_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (7.27)$$

a sajátértéke, azaz a kapcsolódó kvantumszám $s_z = \pm 1/2$. A spinhez tartozó mágneses momentumról azonban kiderül, hogy

$$\mu_z^{(S)} \approx \frac{e\hbar}{m} \quad (7.28)$$

a z -vetülete, azaz a (7.25) egyenlethez képest hiányzik a kettes faktor! Ugyanezt Bohrmagnetonnal és a spinre vonatkozó g_s giromágneses faktorról kifejezve

$$\mu_z^{(S)} = g_s \mu_B \frac{S_z}{\hbar} = g_s \mu_B s_z, \quad (7.29)$$

ahol $g_s \approx 2$. Ezt klasszikusan lehetetlen megmagyarázni (lehetséges különböző töltés- és tömegeloszlású gömböt felíró félklasszikus számolással próbálkozni, de lényegében sikertelenül – érdekesség, hogy az elektront fekete lyukként leíró számolás viszont éppen $g_s = 2$ eredményt ad, lásd B. Carter Phys. Rev. **174** [1968] 1559 cikkét). Itt tehát egy kvantummechanikai tulajdonságról van szó, amelynek matematikáját a 7.6. szakaszban tárgyaljuk majd.

Addig is fontos megemlíteni, hogy nemcsak az elektronnak, de minden részecskének van spinje, amely $\hbar/2$ egész számú többszöröse lehet. Ezen belül megkülönböztetünk feles és egész spinű részecskéket, előbbieket fermionnak, utóbbiakat bozonnak hívjuk, és érdekes módon fundamentálisan más statisztikai tulajdonságaik vannak. Az elektron, proton, neutron, illetve az őket felépítő kvarkok is $1/2$ spinűek, csak a kölcsönhatást közvetítő részecskéknél (foton, gluon) egész a spinje. (Minderre a részecskefizikai fejezetekben még visszatérünk.) Az összetett részecskék, atomok, molekulák spinje is fontos, de ez gerjesztéssel változhat. Az α -részecske spinje 0, gerjesztett magoké akár például $80\hbar$ is lehet.

7.5. A teljes perdület és a giromágneses faktor

A spint tehát azért kellett bevezetnünk, mert a mágneses momentum és a perdület kapcsolatában megjelenő g giromágneses faktor értékét nem tudtuk megmagyarázni. Ebben a szakaszban erre térünk ki, megvizsgáljuk tehát, hogy mitől függ g értéke. Fontos látni, hogy a Stern–Gerlach-kísérletben és az Einstein–de Haas-kísérletben a J teljes perdület játszik szerepet, amely az L pályaperdület és az S sajátperdület összege. Vezessük be ezért a teljes perdület

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad (7.30)$$

operátorát (amely \hat{L} -hez és \hat{S} -hez hasonlóan vektoroperátor). A különféle perdületeperátorok négyzetének sajátértékére¹⁹ az

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1), \text{ ahol } s = 1/2, \quad (7.31)$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \text{ ahol } l \geq 0 \text{ (egész)}, \quad (7.32)$$

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \text{ ahol } j \geq 0 \text{ (egész) és } |l-s| \leq j \leq l+s \quad (7.33)$$

összefüggések legyenek érvényesek²⁰, míg (tetszőleges, itt konkrétan z -irányú) vetületük sajátértékére:

$$S_z = \hbar s_z, \text{ ahol } s_z = \pm 1/2, \quad (7.34)$$

$$L_z = \hbar l_z, \text{ ahol } |l_z| \leq l, \quad (7.35)$$

$$J_z = \hbar j_z, \text{ ahol } |j_z| \leq j, \quad (7.36)$$

ahol fennáll a $j_z = l_z + s_z$ összefüggés (illetve néha az $m = l_z$ és $m_j = j_z$ elnevezéseket használjuk). Minden fenti kvantumszám egész lépésekben változhat, és pl. $l = 2$ esetén $m = -2, -1, 0, 1, 2$ lehet, j pedig $3/2$ vagy $5/2$ értéket vehet fel. Innen már a Stern-Gerlach-kísérletben észlelt két (vagy páros) részre szakadást is értjük: ilyenkor $j = 1/2$ esetén $j_z = \pm 1/2$, azaz kétféle értéket vehet fel.

Tartozzon ezek után mindhárom fenti perdületeperátorhoz egy-egy mágneses momentum is. Vonatkozzon a mágneses momentum vektoroperátoraira a

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}^{(S)} + \hat{\mu}^{(L)} = \frac{\mu_B}{\hbar} (g_l \hat{L} + g_s \hat{S}) = \frac{\mu_B}{\hbar} g_j \hat{J}, \quad (7.37)$$

összefüggés, míg a z -vetület sajátértékeire legyen igaz

$$\mu_z = \mu_z^{(S)} + \mu_z^{(L)} = (g_l l_z + g_s s_z) \mu_B = g_j j_z \mu_B. \quad (7.38)$$

Ezek után a korábbiaknak megfelelően $g_s = 2$ és $g_l = 1$, az elektron teljes g_j giromágneses faktora pedig e kettőből az adott állapottól függő módon adódik, és sokféle értéket vehet fel (különféle állapotokban). Próbáljuk meghatározni, hogy g_j értéke mitől és hogyan függ! Ehhez felhasználjuk, hogy a \hat{J} , \hat{L} , \hat{S} perdületeperátorok adott komponensei felcserélhetőek, azaz kommutálnak egymással; és ez az operátorok négyzetére is igaz. Használjuk fel továbbá a (7.33) és (7.36) egyenletekben adott sajátértékeket is. Szorozzuk meg ezután a teljes mágneses momentum $\hat{\mu}$ operátorát a \hat{J} teljes perdülettel. Ez egyrésztől $\hat{\mu} = g_j \hat{J} \mu_B / \hbar$ miatt

$$\hat{\mu} \hat{J} = \frac{\mu_B}{\hbar} g_j \hat{J}^2 \quad (7.39)$$

módon írható le, másrészt $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ miatt

$$\hat{\mu} \hat{J} = \frac{\mu_B}{\hbar} (g_s \hat{S} + g_l \hat{L}) \hat{J} \quad (7.40)$$

¹⁹ Ezen perdület jellegű mennyiségek esetében jelen jegyzetben általában azzal a konvencióval élünk, hogy \hat{A} az operátor, A a sajátértéke, és a a hozzá tartozó kvantumszám.

²⁰ Ezt a pályaperdületre fent láttuk, a spinoperátorra a következőkben látjuk majd, a teljes perdület tekintetében pedig az olvasóra bízunk ennek ellenőrzését.

is adódik, és innen a konstans faktoriall egyszerűsítve:

$$g_j \hat{J}^2 = g_s \hat{S} \hat{J} + g_l \hat{L} \hat{J}. \quad (7.41)$$

Ebben a kifejezésben tehát az $\hat{S} \hat{J}$ és $\hat{L} \hat{J}$ operátorok jelennek meg. Ezeket az $\hat{L} = \hat{J} - \hat{S}$, illetve $\hat{S} = \hat{J} - \hat{L}$ összefüggésekből határozhatjuk meg:

$$\hat{L}^2 = (\hat{J} - \hat{S})^2 \quad \Rightarrow \quad \hat{J} \hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2), \quad (7.42)$$

$$\hat{S}^2 = (\hat{J} - \hat{L})^2 \quad \Rightarrow \quad \hat{J} \hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 + \hat{L}^2 - \hat{S}^2). \quad (7.43)$$

Ezek sajátértékeire (figyelembe véve, hogy a négyzetek sajátértékeiben $j(j+1)$, $l(l+1)$ és $s(s+1)$ szerepel) a következő egyenletek adódnak tehát:

$$JS = \frac{\hbar}{2}(j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)), \quad (7.44)$$

$$JL = \frac{\hbar}{2}(j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)). \quad (7.45)$$

Ezek után a (7.41) egyenlet mindkét oldalának vehetjük a várható értékét valamely l, j, s, \dots kvantumszámokkal jellemzett perdület-sajátállapotban. Ekkor persze a várható értékek maguk a sajátértékek lesznek, és így a g_j faktor (amelyet Landé-féle g -faktornak is szokás hívni) a következőképpen írható fel:

$$\begin{aligned} g_j &= g_l \frac{j(j+1) - s(s+1) + l(l+1)}{2j(j+1)} + g_s \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \\ &= \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}, \end{aligned} \quad (7.46)$$

ahol az utolsó egyenlőséghez felhasználtuk, hogy $g_l = 1$ és $g_s = 2$. Mindezek kiegészítéseként érdemes megemlíteni, hogy noha a teljes mágneses momentum (mint vektoroperátor) nem J irányába mutat, de a várható értéke már igen (ahogy az később a Wigner–Eckart-tétel segítségével bebizonyítható), és így valóban használható a $\mu = g_j J$ összefüggés – amennyiben a várható értékekre értjük.

Végezetül térjünk ki arra is, hogy egy atomot mágneses térbe helyezve (ahogy a hidrogénatom spektrumának tárgyalásakor említettük majd) az energiaszintek a teljes mágneses momentum hatása miatt felhasadnak: különféle j_z -hez tartozó állapotokhoz más és más energia tartozik majd. Az így módosult energiák (amennyiben a z irányt a mágneses mező irányának megfelelően vettük fel)

$$E(j_z) = \mu_z B_z = g_j \mu_B j_z \quad (7.47)$$

módon számolhatóak. A szomszédos j_z -khez tartozó szintek közötti különbség g_j -n keresztül függ j -től, de j_z -től nem, hiszen ilyenkor j_z változása egységnyi.

Gyakorlófeladat

Mekkora az alapállapotú hidrogénatom mágneses momentuma? Használjuk ehhez a fent tárgyalt $g_j = 3/2 + (3/4 - l(l+1))/(2j(j+1))$ összefüggést, és vegyük észre, hogy alapállapotban $l = 0$ lehet csak, ehhez pedig szükségszerűen $j = 1/2$ tartozik. Hogyan módosul a mágneses momentum az $l = 1$ gerjesztett állapotban? Értelemszerűen itt a $j = 1/2$ és a $j = 3/2$ konfigurációknak megfelelően két lehetőség lesz. Mekkora lesz az energiakülönbség az „egymás melletti” (azaz j_z -ben $1/2$ eltéréssel rendelkező) állapotok között $B = (0, 0, 1)$ T külső térben? Itt j_z lehetséges értékei: $-3/2, -1/2, 1/2$ és $3/2$, a Bohr-magneton értéke pedig, ahogy fentebb is olvasható, $5,788 \cdot 10^{-5}$ eV/T.

7.6. A spinoperátor

A fentiekben többször is előkerült a spin és a spinoperátor, de adósak vagyunk ennek konkrét megadásával. Vizsgáljuk meg most, hogyan tudjuk a spint mint kvantummechanikai fizikai mennyiséget bevezetni és leírni. Láttuk, hogy a perdületoperátor egyszerűen az impulzus- és a helyoperátorok segítségével adhattuk meg. A spin ennél komplexebb tárgyalást igényel, ugyanis a spinhez át kell alakítanunk magát az állapotteret is. Legyen a spinnel is rendelkező részecskék állapota a spin Hilbert-terének és a szokásos kvantummechanikai állapottérnek a szorzata, és a spinoperátor hasson a spintéren, míg a szokásos operátoraink a korábban bevezetett „hagyományos” állapottéren. (Emiatt lesz igaz, hogy a pályaperdület és a spin operátorai felcserélhetőek.) Vizsgáljuk meg most, hogy mi lesz ez a bizonyos spintér.

Mivel elektronra a spin adott irányú vetületeinek operátora két sajátértékkel kell hogy rendelkezzen (a $\pm \hbar/2$ értékek egyikével), így kétdimenziós Hilbert-teret elég választani, és ezért spinoperátorok 2×2 -es önadjungált mátrixok lesznek. Mivel a $\pm \hbar/2$ sajátértékek összege nulla, ezért a spinoperátorok nyoma is nulla kell hogy legyen. Innen már adódnak a Pauli-mátrixok ($\hbar/2$ -vel szorozva):

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.48)$$

Ezekre a (7.8) jellegű kommutációs reláció vonatkozik, a pályaperdülethez hasonlóan:

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} \hat{S}_l, \quad (7.49)$$

a spinoperátorok tehát nem felcserélhetőek, azaz egyszerre csak az egyiknek lehet meghatározott értéke.

Egyszerűen belátható, hogy a fenti mátrixok a korábban említett $\pm \hbar/2$ sajátértékekkel bírnak. Vegyük észre, hogy \hat{S}_x megcseréli a komponenseket, sajátvektorai

$$\Psi_x^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \Psi_x^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (7.50)$$

lesznek, amelyekre a sajátérték is egyszerűen adódik. A másik két irányban vett spin-

operátorok sajátvektorai

$$\Psi_y^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \Psi_y^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (7.51)$$

$$\Psi_z^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \Psi_z^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (7.52)$$

a sajátértékek pedig továbbra is $\pm \hbar/2$ módon adódnak. Megjegyezzük, hogy a $\Psi_z^{(\pm)}$ állapotokat szokás $|\uparrow\rangle$ és $|\downarrow\rangle$ módon is jelölni, ahogy majd a 8.6. szakaszban is látni fogjuk.

Láttuk, hogy a spinoperátor komponensei nem felcserélhetőek, tehát egyszerre csak egyikük lehet meghatározott. Most vizsgáljuk meg, hogy ilyenkor mennyi a másik két irányú spin szórása. Ehhez először a várható értékre van szükségünk. A spintéren a várható érték egyszerűen mátrixszorzásként írható fel:

$$\langle \hat{S}_k \rangle_\Psi = \Psi^T \hat{S}_k \Psi, \quad (7.53)$$

ahol Ψ egy tetszőleges, kétkomponensű vektorral felírt spinvektor (később: spinor), Ψ^T pedig ennek transzponáltja. Adott irányú spinoperátor határozatlansága a szokásos módon az

$$\Delta S_k = \langle \hat{S}_k^2 \rangle - \langle \hat{S}_k \rangle^2 \quad (7.54)$$

módon írható. A spinoperátorok definíciójából látszik, hogy:

$$\hat{S}_k^2 = \frac{\hbar^2}{4} \text{id}_\mathbb{M}. \quad (7.55)$$

Azt is könnyen megkaphatjuk, hogy adott irányú spin sajátállapotában a másik két spinvetület várható értéke nulla. Emiatt ilyenkor a szórásnégyzet $\hbar^2/4$. Ez a (7.49) kommutációs relációból is adódik, amennyiben felhasználjuk a (6.22) határozatlansági egyenletet is.

Vegyük észre végül, hogy

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \text{id}_\mathbb{M}, \quad (7.56)$$

tehát az \hat{S}^2 operátor mindegyik spinoperátorral kommutál, minden állapot a sajátállapota, és degenerált sajátértéke a (7.26) egyenletnek megfelelően $3\hbar^2/4$. Látható, hogy ez az $s(s+1)\hbar^2$ általános kifejezésnek felel meg, $s = 1/2$ mellett.

A fentiekben kizárólag a spintér elemeit jelentő állapotokat vizsgáltuk. Immár a teljes állapottérre visszatérve: a spint is figyelembe vevő hullámfüggvény $(\Psi_+, \Psi_-)^T$ vektorként írható (ahol a T felső index a transzponáltat jelenti, mivel hagyományosan a spinállapot „oszlopvektor”). Ennek mindkét komponense egy-egy hullámfüggvény. A z -irányú spinoperátor hatása ezen állapotra:

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +\Psi_+ \\ -\Psi_- \end{pmatrix}. \quad (7.57)$$

Ekkor a $(0, \Psi_-)$ állapot a $-\hbar/2$, míg a $(\Psi_+, 0)$ a $+\hbar/2$ sajátértékű sajátállapot. Követeljük meg továbbá a valószínűségi értelmezésből adódó normálási feltételt is, azaz legyen

$$\left| \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} \right|^2 = |\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2 = 1, \quad (7.58)$$

ahol $|\Psi_{+,-}|^2$ a teljes hullámfüggvény-integrált (normát) jelenti. Vonatkozzon erre a két komponensre egy-egy Schrödinger-egyenlet. Ezeket így írhatjuk le egyben:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \begin{pmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (7.59)$$

(Ilyenkor a „hagyományos” operátorok külön-külön hatnak a komponensekre, ezt értjük úgy, hogy ők a „normál” állapottéren fejtik ki hatásukat.) Mivel ez az egyenlet ugyanaz az egyenlet a két komponensre, ezért ezek megoldásai (a két komponens) is ugyanazok – egy komplex faktortól eltekintve. A fenti egyenlet megoldása tehát

$$\begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \Psi \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (7.60)$$

ahol α és β komplex számok, amelyekre a normálási feltétel miatt

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (7.61)$$

lesz igaz. A spinoperátorok ekkor tehát tényleg csak az α, β komponensekkel leírt vektoron hatnak, méghozzá

$$\hat{S}_x \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad \text{azaz } \langle S_x \rangle_{\alpha, \beta} = \hbar \operatorname{Re}(\alpha^* \beta), \quad (7.62)$$

$$\hat{S}_y \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = i \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\beta \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad \text{azaz } \langle S_y \rangle_{\alpha, \beta} = \hbar \operatorname{Im}(\alpha^* \beta), \quad (7.63)$$

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix}, \quad \text{azaz } \langle S_z \rangle_{\alpha, \beta} = \frac{\hbar}{2} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) \quad (7.64)$$

az adott irányú spin várható értéke.

Kiegészítésként érdemes észrevenni, hogy az $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ relációt az unitér mátrixok tartják meg, és a fenti Pauli-mátrixok éppen az $SU(2)$ speciális unitér csoportot generálják. Ezzel kapcsolatban csoportelméleti tanulmányok során tudhatunk meg többet, ahogy fentiek korrekt kezeléséhez szükséges Clifford-algebrákról is. Annyit itt is érdemes megemlíteni, hogy Pauli-mátrixok a nulla nyomú, hermitikus mátrixok bázisát jelentik, amelyek egy háromdimenziós Clifford-algebrát alkotnak, és ez a spin általános leírását adja majd. Érdekes továbbá, hogy ezek az $SU(2)$ komplex mátrixok éppen három valós paraméterrel írhatóak le, hiszen a három Pauli-mátrix egy-egy egyparaméteres valós részcsoportjának szorzatából már az egész csoport adódik. A három paraméter az $SO(3)$ -mal való ekvivalencia tekintetében a három tértengely körüli forgatás három szögét jelenti.

7.7. A Pauli-egyenlet és a spin oszcillációja

Vizsgáljuk meg most egy feles spinű, $(\Psi_+, \Psi_-)^T$ hullámfüggvénnyel leírt részecske viselkedését \vec{B} mágneses tér jelenlétében. Ehhez első lépésben vegyünk egy adott

$$n = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (7.65)$$

irányt: ekkor az ezen irányú spinvetület operátora az $n \cdot S$ skalárszorzatnak megfelelően számolható ki. Konkrétan a Pauli-mátrixokat behelyettesítve

$$S_n = n \cdot S = n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (7.66)$$

adódik, és ennek azon (α, β) spinorok (és bármely komplex számszorosaik) lesznek a sajátállapotai, amelyekre

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{\sin \theta e^{i\phi}}{\cos \theta \pm 1}, \quad (7.67)$$

és ebből a $+1/2$ sajátértékű állapot (egyre normálva)

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix}. \quad (7.68)$$

Érdemes észrevenni azt is, hogy ekkor a z irányú spin várható értékére

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \quad (7.69)$$

adódik, azaz éppen az n vektor z irányú vetülete adja ezt meg.

Vizsgáljuk meg, hogy mi történik mágneses térben a spinállapotokkal. Tudjuk, hogy a mágneses momentum és a mágneses tér μB skalárszorzata hozzájárul az energiához (azaz a potenciálhoz). A spinből származó mágneses momentum operátorára a fentiekben is említett

$$\hat{\mu} = g_s \frac{e}{2m} \hat{S} = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S} \quad (7.70)$$

összefüggés igaz (ahol $\hat{\mu}$ és \hat{S} is vektoroperátor). Mindezek alapján a Schrödinger-egyenlet a $\Psi = (\Psi_+, \Psi_-)^T$ állapotra a potenciál módosításával naivan a

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} - g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B} \right) \Psi = E \Psi \quad (7.71)$$

alakot ölti, amely egymáshoz csatolja a Ψ_+ és Ψ_- hullámfüggvényeket. Valójában a \vec{B} teret egy \vec{A} vektorpotenciál generálja, és ez az impulzusoperátort is módosítja, $\hat{p} \rightarrow \hat{p} - e\vec{A}$ módon (tehát ez lesz a kanonikus impulzus). Nemnulla elektromos tér esetén még a Φ skalárpotenciál is megjelenik, ezt $V = e\Phi$ módon a potenciális energia tartalmazza. Ezzel a Pauli-egyenlet:

$$\left(\frac{1}{2m} (\hat{p} - e\vec{A})^2 + e\Phi - g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B} \right) \Psi = E \Psi. \quad (7.72)$$

Ez adja meg tehát az adott, időfüggetlen mágneses térben kialakuló spinállapotokat és az ezeknek megfelelő energiákat. Megemlítendő, hogy gyenge mágneses térben elengedő az $\hat{S} \cdot \vec{B}$ tagot figyelembe venni, ahogy azt alább ki is használjuk.

Amennyiben a hullámfüggvény időfüggését is megengedjük, akkor a jobb oldalon $E\Psi$ helyett $i\hbar\partial_t\Psi$ jelenik meg, az időfüggő Schrödinger-egyenlet mintájára; mágneses tér híján ilyenkor a

$$\Psi(t) \propto \exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right] \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (7.73)$$

időfüggés adódik, azaz $\omega = E/\hbar$ körfrekvenciájú oszcilláció következik be. Legyen ezek után térben és időben homogén, $B = (0, 0, B_z)$ módon írható mágneses mezőnk. Ekkor a Pauli-egyenletben

$$g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B} = g_s \mu_B B_z \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.74)$$

szerepel. Az időfüggő Pauli-egyenletben a jobb oldalon lévő $i\hbar\partial_t\Psi$ operátor miatt ebből

$$\partial_t\Psi_{\pm} = \pm i\frac{\mu_B}{\hbar}\Psi_{\pm} + \dots \quad (7.75)$$

egyenlet következik, ahol ‘...’ a Pauli-egyenlet bal oldalának itt le nem írt tagjait jelöli, és a $g_s = 2$ közelítéssel éltünk, továbbá bevezettük a $\mu = e\hbar/2m$ jelölést. Mindez azt jelenti, hogy a spinkomponensek körfrekvenciája $\mu B/\hbar$ mértékben módosul, de ellenkező irányban:

$$\Psi(t) \propto \exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right] \begin{pmatrix} \alpha \exp\left[i\frac{\mu_B}{\hbar}t\right] \\ \beta \exp\left[-i\frac{\mu_B}{\hbar}t\right] \end{pmatrix}. \quad (7.76)$$

Az oszcilláció frekvenciája tehát a mágneses tér okozta energiaeltolódástól is függ, de ez az eltolódás ellentétes a két spinkomponens esetében. A (7.68) egyenlettel összevetve ez azt jelenti, hogy a spin mint vektor (amennyiben ez a fogalom értelmes a komponensek egyszerre nem mérhetőségét figyelembe véve) tulajdonképpen $\mu B/\hbar$ körfrekvenciával forog körbe. Minderre kis képzavarral úgy is gondolhatunk, hogy maga a részecske egyfajta precessziót végez.

Az említett (7.68) egyenlet alapján a sajátállapotban $\phi/2$ szerepel, tehát 2π forgatás után nem az eredeti állapotba tér vissza, hanem az ellentettjére vált! Ezt a furcsa viselkedést Rauch, Zeilinger és munkatársaik neutronokkal ellenőrizték, amelyben két ágra bontottak egy adott E energiájú bejövő nyalábot. Az alsó ágban nulla mágneses tér mellett E/\hbar körfrekvenciával oszcillál a hullámfüggvény két komponense, míg a felső ágban a spin miatt egy $\mu B/\hbar$ további körfrekvenciát jelent meg, a spin két komponensében ellenkező előjellel, a (7.76) egyenletnek megfelelően. Mivel a fentiekben láttuk, hogy a sajátállapotban $\phi/2$ szerepel, így τ mérési idő (a mágneses téren történő áthaladási idő) alatt

$$\frac{1}{2}\phi(\tau) = \frac{1}{2}\phi(0) - \frac{\mu B}{\hbar}\tau \quad (7.77)$$

spinfázisváltozás jelenik meg. Ha a jobb oldal második tagja éppen π , akkor a fázis az ellentettjére változik, ami azt jelenti, hogy a térbeli ϕ fázisban viszont 2π forgás után

következik be az előjelváltás. A mágneses teret változtatva kimérhető, hogy milyen B mágneses tér mellett történik újra erősítés, így az eredeti ϕ fázishoz való visszatérés szöge mérhető. Ez Rauch, Zeilinger és munkatársaik Phys.Lett. **A54** (1975) 425 cikkében 704 ± 38 foknak adódott (ahol a mérési bizonytalanság a mágneses tér méréséből adódott főleg), amely radiánban kifejezve a 4π értékkel szépen egyezik. A spinvektor („spinor”) tehát két teljes körbefordulás után tér csak vissza eredeti állapotába! Érdekesség, hogy ezt a balinéz pohártrükk (vagy tálcatrükk) illusztrálja, melynek során a tenyerünkre teszünk egy poharat, majd megforgatjuk a függőleges tengely körül 360 fokkal. Ekkor a tenyerünk nem az eredeti állapotában van – de egy további (az előzővel azonos irányú) 360 fokos forgás után igen.

7.8. Az anomális mágneses momentum

Fentebb láttuk, hogy a Pauli-egyenlet adja meg a spin egy lehetséges (és történetileg az első) leírását, amely a Schrödinger-egyenlet Pauli-féle módosítása, feles ($1/2$) spinű részecskék leírására. Később kiderült, hogy a Dirac-egyenlet (amely a relativisztikus kvantummechanika alapegyenlete, a hidrogénatom spektrumának vizsgálatakor is többször előkerülnek következményei, illetve röviden a 11.3.1. szakaszban térünk vissza rá) önmagában tartalmazza a feles spint és a $g = 2$ összefüggést. Ma viszont kísérletileg úgy tudjuk, hogy $g \approx 2,0023$, és kb. 12 értékes jegyig mérhető. Mérése most is abszolút aktuális, ugyanis ez a korábban bevezetett finomszerkezeti állandóhoz kapcsolódik. Kvantum-elektrodinamikai számolással extrém pontossággal megkapható a fenti érték, méghozzá a foton-elektron kölcsönhatás perturbációjának vizsgálatából. Általában az **anomális mágneses momentumot** fejezik ki az

$$a = \frac{g - 2}{2} \quad (7.78)$$

kifejezéssel, amelyre a finomszerkezeti állandóval kifejezett

$$a \approx \frac{\alpha}{2\pi} \quad (7.79)$$

első közelítés adódik – ezt a becslést az elektron-foton kölcsönhatás ún. egyhurok-korrekciónak lehet megkapni (ebben az elektron és a foton úgy lép kölcsönhatásba, hogy először az elektron kibocsát egy fotont, utána kölcsönhat a másik fotonnal majd elnyeli a korábban kibocsátottat). Az anomális mágneses momentum 2011-es mért értéke

$$a = (1159\,652\,180,73 \pm 0,28) \times 10^{-12} \approx 0,00116, \quad (7.80)$$

ahogy a Phys. Rev. **A83** (2011) 052122 publikációban szerepel. Elméleti számolásból ettől a perturbációs számítás tizedik (!) rendjében

$$a_{\text{elmélet}} - a_{\text{mérés}} = (1,05 \pm 0,82) \times 10^{-12} \quad (7.81)$$

mértékű eltérést lehet találni (lásd Aoyama és munkatársai Phys. Rev. Lett. **109** [2012] 111807 cikkét). A számolás alapja a kvantum-elektrodinamika, az elektromágnesség relativisztikus kvantumtérelmélete. Figyelembe véve, hogy az eltérés a tizenkettedig értékes jegyben jelenik meg, kijelenthetjük, hogy ez a legpontosabban ellenőrzött természettudományos elmélet.

Végezetül említsük meg, hogy ilyen (anomális) mágneses momentuma van a müonnak is, amely körülbelül fél százalékkal nagyobb az elektronénál:

$$a_\mu = (1165\,847\,847,51 \pm 0,80) \times 10^{-12}, \quad (7.82)$$

ahogy az a szintén Aoyama és munkatársai által jegyzett Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 111808 publikációban szerepel (amely közvetlenül az előző bekezdésben említett publikáció után következik a PRL hasábjain). A müon esetében érdekes módon valamivel nagyobb a relatív eltérés az elméleti számolás és a mérések között, ez emiatt ma is aktívan kutatott terület. A proton mágneses momentumára pedig

$$g_p = 5,5856946893(16) \quad (7.83)$$

vonatkozik (a CODATA 2018-as adatösszegzése alapján²¹), és itt (és a jegyzet más pontjain is) a végén a zárójel az utolsó számjegyekben megjelenő bizonytalanságot jelöli. Ezt a g -faktort felhasználva

$$\mu_p = g_p \mu_N \frac{S_p}{\hbar} \quad (7.84)$$

módon adhatjuk meg a proton mágneses momentumát. Itt

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2M_p} \quad (7.85)$$

a mag-magneton egység, és M_p a proton tömege. Még érdekesebb, hogy a semleges neutronnak is van mágneses momentuma (holott nincs is töltése – de a benne lévő kvarkoknak igen), és g -faktora (szintén a CODATA 2018-as összegzése alapján)

$$g_n = -3,82608545(90), \quad (7.86)$$

amely tehát negatív értéket vesz fel. Ezen mágneses momentumok értéke intenzív kutatások tárgyát képezi ma is, ugyanis a nukleonok összetételével van bonyolult kapcsolatban. Hozzáfűzzük még azt is, hogy magának a protonspinnek sem teljesen világos az eredete, ugyanis a kvarkok és a gluonok együttesen okozzák ezt, spinjükkel és protonon belüli pályaperdületükkel (lásd pl. Alexandrou és munkatársai Phys. Rev. Lett. **119** [2017] 142002 cikkét).

²¹ Az adatbázist lásd a <https://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html> címen.

8. A hidrogénatom részletes spektruma

8.1. A hidrogénatom a Schrödinger-egyenlet alapján

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. Összetettebb rendszerekben, nagyobb atomok esetén már a magfizika is szerepet játszhat, ahol a kölcsönhatás sokkal bonyolultabban számolható, és nehezen vizsgálható kísérletileg. Ha a mag szerkezete esetleg nem is befolyásolja az állapotokat érdemben, a nagyobb atomok esetében akkor is több részecske-rendszerekkel kell számolni, ami analitikusan lehetetlen. Ezért ezek állapotait a hidrogénatom alapján lehet általánosítani. Ezen rövid bevezető után lássuk, mit mond a kvantummechanika a hidrogénatomról.

A kvantumelméleti leíráshoz próbáljuk meg a hidrogénatom elektronjának hullámfüggvényét megadni. Ennek érdekében induljunk ki abból, hogy az elektron a mag (a proton) által keltett

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r} = -\frac{\alpha \hbar c}{r} \quad (8.1)$$

potenciálban mozog, ahol a negatív előjel a különböző előjelű töltések, avagy a vonzó kölcsönhatás miatt jelenik meg. Tulajdonképpen az így felírt potenciál azt is jelenti, hogy a magot rögzítettnek tekintjük, amelynek potenciálja hat az elektronra. Ezt fel nem téve a mag-elektron rendszer tömegközéppontjához képesti mozgást kellene vizsgálnunk. Ebben az esetben ugyanaz a mozgásegyenlet adódna (és az így adódó impulzus- és helyoperátorok is ugyanúgy viselkednek, mint az eredetiek), de az elektron tömege helyett annak $m_e^{(r)} = m_e M_p / (m_e + M_p)$ redukált tömegét kellene vennünk. Ez a redukált tömeg azonban $m_e \ll M_p$ miatt ezrelékes pontossággal megegyezik az elektrontömeggel, így ez kis korrekciót jelent. Ennek ellenére pontosabb számolásnál m_e helyett $m_e^{(r)}$ értékét kell használnunk. Összességében tehát kétrészecskes egyenlet helyett elég egyetlen, potenciálban mozgó részecskével számolunk. Ezzel az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a hidrogénatom e töltésű, m_e tömegű elektronjára a következő alakot ölti:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(x) - \frac{\alpha \hbar c}{r} \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (8.2)$$

Ezt kell tehát megoldanunk. Mivel a potenciál csak a radiális koordinátától függ, érdemes átírnunk a Laplace-operátort gömbi koordinátákba, a (7.11) perdületoperátornak megfelelően:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Psi(r, \phi, \theta) - \frac{\alpha \hbar c}{r} \Psi(r, \phi, \theta) = E \Psi(r, \phi, \theta). \quad (8.3)$$

Ezt próbáljuk a

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi) \quad (8.4)$$

szétválaszthatósági feltétellel megoldani. Ekkor a fenti egyenlet a következő alakot ölti:

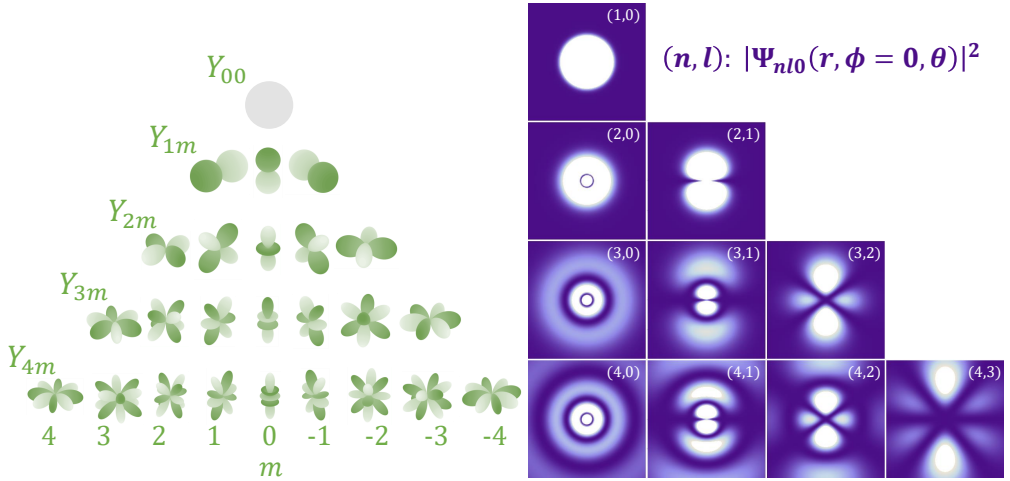
$$\begin{aligned}
 -R(r) \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y(\phi, \theta) - \\
 -Y(\theta, \phi) \left[\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\alpha \hbar c}{r} \right] R(r) = ER(r)Y(\theta, \phi),
 \end{aligned} \tag{8.5}$$

amely teljesül, ha a szögfüggő és a sugárfüggő rész is külön-külön a rá ható operátor sajátállapota. Mivel a szögfüggő részre csak a perdületoperátor (a fenti egyenletben a szögek szerinti deriválás) hat, így ennek megoldásai a (7.11) egyenletben már felírt Y_{lm} gömbfüggvények lesznek, l és $m = -l \dots l$ indexekkel (ahol m nem tévesztendő össze az elektron m_e tömegével), a potenciáltól függetlenül. A radiális rész ezzel szemben a potenciálon múlik, és kiderül, hogy az L_i^j általánosított Laguerre-polinomokkal fejezhető ki a megoldás (az R -re vonatkozó sajátérték-egyenlet átalakítható egy általánosított Laguerre-egyenletté). Végeredményben az $n > 0$, $l = 0, 1, \dots, n - 1$ és $m = -l, \dots, l$ egész számok (kvantumszámok) indexelik a megoldást:

$$\begin{aligned}
 \Psi_{nlm}(r, \phi, \theta) = \sqrt{\left(\frac{2}{nr_{\text{Bohr}}} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \cdot Y_l^m(\theta, \phi), \\
 \text{ahol } \rho = \frac{2r}{nr_{\text{Bohr}}} \text{ és } r_{\text{Bohr}} = \frac{\hbar c}{m_e c^2 \alpha}.
 \end{aligned} \tag{8.6}$$

Érdemes tisztázni, hogy kvantumszám alatt itt a sajátérték-egyenlet megoldásait indexelő n, m, l számokat értjük (míg például a Sommerfeld–Wilson-kvantálás esetében a kvantumfeltétel jobb oldalán lévő szorzót jelentették). Ezekkel leírható tehát az összes lehetséges sajátállapot; úgy is mondhatjuk, hogy a fenti egyenletben szereplő hullámfüggvények megadják a hidrogénatom elektronjának energia-sajátállapotait. Ezeket néha betűkkel is jelöljük, pontosabban az $l = 0, 1, 2, 3$ értékeket sorrendben az s, p, d és f betűk jelölik (illetve néha még a g és h betűk is megjelennek, az $l = 4$ és $l = 5$ állapotokat kódolandó). Ez azt jelenti, hogy például 1s az $n = 1$, $l = 0$ állapotot jelöli, míg 3p az $n = 3$, $l = 1$ állapotot, és hasonlóan egyéb n és l értékekre. Az első néhány lehetséges állapot (m értékével most nem foglalkozva) n és l növekvő sorrendjében: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, ... Ezeket az állapotokat a 36. ábra is illusztrálja. Az m kvantumszám különböző értékei többnyire az eloszlások különböző 3D elforgatásainak felelnek meg, de $l > 1$ esetén $m = 0$, $l > 2$ esetén pedig $m = 0$ és $m = 2$ is különbözik egy kicsit a kisebb l -ekre felírt azonos m értékű gömbfüggvényektől, ahogy az a 36. ábra bal oldalán is látható. Az állapotban a térbeli valószínűsűrsűrűséget a hullámfüggvény abszolútérték-négyzete adja meg. Ebben megjelennek nulla valószínűségű, kizárt felületek (ezekre néha a „csomósík” kifejezést használják, noha némelyik közülük gömb). Ahogy a 36. ábra jobb oldala is mutatja, $l = 0$ esetén a kizárt felületek az első oszlopban $n - 1$ darab koncentrikus gömböt jelentenek, amelyeket a Laguerre-polinomok nullhelyei okoznak. Ezek közül $l > 0$ esetén l darab gömb cserélődik sík felületre, ilyenkor ugyanis egyre csökkenő alsó indexű Laguerre-polinomok jelennek meg. Összességében $l = n - 1$ esetén l darab sík jelenik meg – ennek oka pedig a gömbfüggvények nullává válása bizonyos θ értékek mellett.

A hullámfüggvény alapján kiszámolhatóak az energiaszintek (energia-sajátértékek)



36. ábra. A bal oldali ábrán az $l = 0, \dots, 4$ állapotokban szereplő gömbfüggvények láthatóak, a 35. ábrához hasonlóan. A jobb oldali ábrán az egyes sajátállapotok abszolútérték-négyzetének kétdimenziós metszetei láthatóak, $\phi = 0$ mellett. Az egyes (n, l) párokhoz tartozó „dobozok” 20 fm méretűek mindkét irányban. Adott l értékhez különféle m -ek tartozhatnak, az $m \neq 0$ esetek hullámfüggvényének térbeli elképzelését segíti a bal oldali ábra.

is, és a Bohr-modellel azonosan

$$E_{n,l,m} = E_n = -E_0 \frac{1}{n^2} = -\frac{m_e k^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{m_e c^2 \alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \quad (8.7)$$

adódik, ahol $E_0 \approx 13,6$ eV. Mindez azt is jelenti, hogy az energia l és m szerint degenerált: adott n -hez $\sum_l (2l + 1) = n^2$ különböző állapot tartozik. Az l szerinti degeneráció konkrétan a Coulomb-kölcsönhatás alakjából adódik, mivel a szögfüggő részre vonatkozó energia-sajátérték még elvileg függhetne l -től is. Vegyük észre azt is, hogy a fenti állapotok nemcsak a Hamilton-operátor sajátállapotai (azaz energia-sajátállapotok e_n sajátértékekkel), de az \hat{L}^2 perdületnégyzet-operátornak is, $l(l+1)\hbar^2$ sajátértékkel, illetve az \hat{L}_z operátornak is, $m\hbar$ sajátértékkel.

Fontos a fentiekhez hozzáfűzni, hogy mindez két elektronra sem működik, mert nem tudjuk zárt alakban felírni a hullámfüggvényt, azaz megoldani a Schrödinger-egyenlet háromrészecskes verzióját. Ugyanakkor sokszor nagyobb atomokra is mégis azt a közelítést vesszük, hogy az atom Coulomb-potenciálja $Z\alpha/r$, és akkor a fentieknek megfelelő, $\alpha \rightarrow Z\alpha$ csere utáni állapotok és energiák jelennek meg. Ha az atomnak több elektronja van, akkor a betöltési sorrend is érdekes, azaz hogy mely pályákra kerülnek ezek az elektronok. Ilyenkor a Madelung-szabályt használjuk, amely szerint az $n + 1$ érték növekvő sorrendjében kerülnek pályákra az elektronok.

A későbbiekben fontos lesz, ezért nézzük meg, mennyi $|\Psi_{nlm}|^2$ értéke a nullában! Először is, vegyük észre, hogy a (8.6) egyenletben megjelenő ρ^l faktor miatt $l \neq 0$ esetén ez a valószínűsűrség nulla, tehát $l > 0$ esetén az elektron biztosan nincs az origóban. Az $l = 0$ esethez az általánosított Laguerre-polinomokra vonatkozó $L_n^i(0) = \text{binom}(n+i, n)$ összefüggést és az $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ összefüggést kell felhasználni, és kiderül,

hogy a keresett érték

$$|\Psi_{nlm}|^2(0) = \frac{1}{\pi n^3 r_{\text{Bohr}}^3}, \quad (8.8)$$

ennyi tehát annak valószínűsége, hogy az $l = 0$ pályán lévő elektron éppen az origóban, azaz az atommag középpontjával azonos helyen van. Érdekes még megemlíteni, hogy a fenti állapotok energiája nem függ az m kvantumszámtól, tehát az energia-sajátérték szempontjából degenerációról van szó (a degenerált sajátérték itt azt jelenti, hogy több különböző sajátállapot tartozik hozzá).

A spint is figyelembe véve az m kvantumszám helyett a teljes perdületet használjuk. Az adott állapotot így az n és l kvantumszámok mellett a teljes perdülethez tartozó j kvantumszámmal jellemezzük. Ahogy korábban is említettük, $|l - s| \leq j \leq l + s$, így s pályák ($l = 0$) esetén $j = 1/2$, minden más esetben $j = l \pm 1/2$, ami éppen az $s_z = \pm 1/2$ eseteknek felel meg. Úgy is mondhatjuk, hogy $l > 0$ esetben az elektron spinjének pályaperdület irányában vett vetülete $s_z = +1/2$ vagy $s_z = -1/2$ lehet. Előbbi esetben $j = l + 1/2$, utóbbiban $j = l - 1/2$ lesz. Így tehát minden p ($l = 1$) pályából kétféle van: $p_{1/2}$ és $p_{3/2}$, d pályából $d_{3/2}$ és $d_{5/2}$, és így tovább. A teljes állapotot pedig nl_j módon jellemezzük, azaz például

$$3d_{5/2} \quad \Leftrightarrow \quad n = 3, \quad l = 2, \quad j = 5/2, \quad s_z = +1/2. \quad (8.9)$$

A pályaperdület adott (tetszőleges) irányú vetületének kvantumszáma (m) ebben a $3d_{5/2}$ állapotban -2 és 2 között egy egész szám lesz, míg a teljes perdület j értéke $-5/2$ és $5/2$ között egy „feles” szám.

Végezetül érdemes megvizsgálni a hely- és impulzusoperátorok komponenseinek várható értékeit a Schrödinger-egyenletnek megfelelő energia-sajátállapotokban. Szimmetriaokokból $\langle \hat{r}_i \rangle = 0$ mindegyik állapotban (még ha $|\Psi(0)|^2 = 0$ is $l > 0$ esetén), és természetesen ugyanez igaz az impulzusra is: $\langle \hat{p}_i \rangle = 0$. Meglepő is lenne ennek ellenkezője, hiszen ekkor az elektron „elszökne” az atomból.

Gyakorlófeladat

Láthattuk, hogy $l > 0$ esetén az elektron helyének origóbeli valószínűsége $1/(\pi n^3 r_{\text{Bohr}}^3)$. Élünk azzal a közelítéssel, hogy ez a valószínűsége alig változik a proton sugarának megfelelő méretskálán, és számítsuk ki, hogy adott n esetén ténylegesen mekkora az elektron protonon belül tartózkodásának valószínűsége. Ehhez használjuk fel, hogy a proton töltéseloszlásának sugara kb. 0,84 fm.

8.2. A hidrogénatom perturbációi, a Zeeman-hatás

A 6.9. fejezetben említett perturbációszámítás alkalmazásakor fontos egyes operátorok várható értékének ismerete, hiszen ez adja meg az energiaszintek eltolódását. Értelemszerűen az energia-, perdület- és spinoperátoroknak a fenti állapotok sajátállapotai, így ezek szórásmentesek, várható értékük pedig az adott (kvantumszámmal jellemzett) sajátérték. Egyéb operátorok várható értéke viszont korántsem triviális, így ezeket itt

megadjuk. Vegyük először az r^{-n} típusú operátorokat:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{an^2} \quad (8.10)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a^2 n^3 (l + 1/2)} \quad (8.11)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{1}{a^3 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}, \text{ ha } l > 0, \quad (8.12)$$

ahol a tömörség kedvéért bevezettük az $a = r_{\text{Bohr}}$ jelölést.

Szükség lesz továbbá a Dirac-delta mint potenciál (azaz nem mint állapot!) operátorának várható értékére is, ugyanis a Coulomb-potenciál Laplace-operátor általi képében éppen a háromdimenziós Dirac-delta -4π -szerese jelenik meg:

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta. \quad (8.13)$$

Ezen összefüggés belátásához először is vegyük észre, hogy $r \neq 0$ esetén

$$\Delta \frac{1}{r} = 0, \quad (8.14)$$

ugyanakkor az is tény, hogy $\Delta(1/r)$ térfogati integrálja -4π . Ezek után alkalmazhatjuk a Gauss-tételt: veszünk egy origóra centrált gömböt, és erre $\Delta(1/r)$ integrálja megegyezik $\nabla(1/r) = -1/r^2$ felületi integráljával. Bármely más (a nullát magában foglaló, véges méretű) térfogatra is igaz lesz ez, hiszen a függvény minden máshol nulla értéket vesz fel (így a térfogati integrálja csak a nullában felvett értéktől függ).²² Ezek rögzítsük, hogy a tárgyalt Dirac-delta operátor tulajdonképpen a Dirac-deltával való szorzás. Ennek várható értéke pedig a várható érték definíciója alapján a következő módon számolható ki:

$$\langle \delta \rangle_{\Psi} = \int |\Psi|^2 \delta = |\Psi(0)|^2. \quad (8.15)$$

A fentieket összesítve azt látjuk, hogy a $\Delta(1/r)$ operátor várható értéke az adott állapot nullában vett értékének abszolútérték-négyzetének -4π -szeresét adja:

$$\left\langle \Delta \frac{1}{r} \right\rangle_{\Psi} = -4\pi |\Psi(0)|^2. \quad (8.16)$$

Ez $l > 0$ esetén nulla (a hullámfüggvényben megjelenő r^l tényező miatt), $l = 0$ esetén pedig (8.8) alapján

$$\langle \delta^3 \rangle_{nl} = \frac{m_e^3 c^6 \alpha^4}{\pi \hbar^2 c^2 n^3} \delta_{l0} = \frac{1}{\pi n^3 a^3} \delta_{l0} \quad (8.17)$$

adódik, ahol az utolsó δ_{l0} tag egy Kronecker-delta: ez jelzi, hogy $l > 0$ esetén a várható érték nulla.

²² Mindennek matematikailag korrektebb formába öntött tárgyalásához disztribúcióelméleti alapok szükségesek.

Vizsgáljunk meg most egy konkrét fizikai jelenséget, amely módosítja a hidrogénatom energiaszintjeit. Ahogy fentebb láttuk, a perdület adott irányú vetülete, azaz az m szerinti energiadegeneráció (azaz az energiaszintek m -től való függetlensége) a perdületoperátorba és a gömbfüggvényekbe van „kódolva”. Ugyanakkor mágneses tér jelenlétében m szerint **felhasadás figyelhető meg** a mágneses momentum és a mágneses tér kölcsönhatásának köszönhetően, amelyet **Zeeman-hatásnak** nevezünk. Mivel ilyenkor egy $\hat{V} = \hat{\mu}_z B_z$ perturbáció jelenik meg a Hamilton-operátorban, a 6.9. fejezetben említetteknek megfelelően ennek várható értékét kell kiszámolnunk az n, l, m állapotban, hogy megkapjuk az energiaszint eltolódását. Legyen gyenge²³ homogén mágneses térünk, amely kizárólag z irányú (azaz válasszuk így a koordináta-rendszert). Ekkor

$$\hat{V} = \hat{\mu}_z B_z \quad (8.18)$$

perturbáció jelentkezik, és innen az energiaeltolódás $\Delta E = \langle \hat{\mu}_z B_z \rangle$ lesz. Mivel

$$\hat{\mu}_z = \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L}_z \quad (8.19)$$

(kizárólag a pályaperdületet vizsgálva most), így a várható értékben az \hat{L}_z operátor sajátértéke, azaz az $m \equiv l_z$ mágneses kvantumszám jelenik meg. Így végül az energiaeltolódás nagysága

$$\Delta E_{\text{Zeeman}, m} = \mu_B B_z m. \quad (8.20)$$

Mivel a Bohr-magneton értéke $5,7888 \cdot 10^{-5}$ eV/T, ezért 1 T mágneses térben a felhasadás százvezred elektronvolt nagyságrendű. Érdeemes megemlíteni, hogy a spin hatását is figyelembe véve J , a teljes perdület számít, illetve az ebből származó mágneses momentum. Emiatt az energiaperturbáció

$$\Delta E_{\text{Zeeman}, m_j} = \mu_B B_z g_j m_j \quad (8.21)$$

lesz, ahol $m_j \equiv j_z$; a $g_j \equiv g$ faktor értékét pedig a (7.46) egyenletben adott módon kaphatjuk meg. Érdekes még megemlíteni, hogy amennyiben az elektron valószínűségi-sűrűségéhez nem nulla elektromos dipólmomentum tartozik, akkor elektromos tér is okoz hasonló felhasadást: ennek neve Stark-hatás.

8.3. A finomfelhasadás

A Schrödinger-egyenletből kapott energiasajátértékek jól egyeznek a kísérleti tapasztalatokkal, de nagy felbontású spektrométerrel kiderül, hogy a spektrumvonalak eltolódnak és felhasadnak, azaz egyfajta **finomszerkezet** jelenik meg. Ennek első rendben közelítve három oka van: a spin és a pálya kölcsönhatása, a relativisztikus hatások megjelenése, illetve az úgynevezett Darwin-hatás. Ezeket mind úgy tudjuk megadni, hogy a korrekciót a Hamilton-operátor δV perturbációjának tekintjük²⁴, és a 6.9. fejezetben említetteknek megfelelően ilyenkor

$$\Delta E_{nl} = \langle \delta V \rangle_{nl} \quad (8.22)$$

²³ Erős mágneses tér esetében az úgynevezett Paschen–Back-hatás lép fel, amelynek során a perdület és a spin is a mágneses térhez csatolódik. Emiatt a spin és a pályaperdület csatolásáról árulkodó j kvantumszám nem jelenik meg, és kicsit más lesz az energiaeltolódás mértéke.

²⁴ Itt természetesen δV egy operátor, de az egyszerűség kedvéért „kalap” nélkül írjuk.

energiaeltolódást kapunk, ahol tehát a perturbáló operátor adott alapállapot szerinti várható értékét kell vennünk. Lássuk ezek után a finomfelhasadást okozó egyes hatásokat.

8.3.1. A relativisztikus hatás

A relativisztikus hatást úgy foglalhatjuk össze, hogy az energia valójában nem $p^2/2m$ formában írható²⁵, hanem $\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2$ (ami kis korrekció, ha $p \ll mc$), és ennek p/mc szerinti sorfejtése

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{p^6}{16m^5c^4} - \frac{5p^8}{128m^7c^6} + \dots, \quad (8.23)$$

ahol az utolsó tag (...) azt jelöli, hogy a p/mc változóban tizedrendű és nagyobb tagokat már elhagytuk. Ebből az első korrekció a p^4 -es tagnak felel meg, így az ennek megfelelő operátort kell vennünk a perturbációs számítás során. Az energiaeltolódás ezen operátor n, l állapotbeli várható értékének felel meg. Vegyük észre, hogy

$$\hat{p}^2 = 2m\hat{E}_{\text{kin}} = 2m(\hat{E} - \hat{V}), \quad (8.24)$$

ahol \hat{E} a teljes energia operátora. Ezért a

$$-\frac{\langle \hat{p}^4 \rangle}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2} \langle \hat{E}_{\text{kin}}^2 \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle (\hat{E} - \hat{V})^2 \rangle \quad (8.25)$$

várható értékre van szükségünk. Használjuk fel, hogy vizsgálandó állapotok (ahol a várható értéket vesszük) mind az \hat{E} energiaoperátor sajátállapotai, és ilyenkor az operátor négyzetének várható értéke megegyezik a várható érték négyzetével: $\langle E \rangle = E_n$. Emiatt valójában a fenti kifejezés helyett vehetjük a

$$-\frac{1}{2mc^2} \left\langle \left(\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha\hbar c}{r} \right)^2 \right\rangle \quad (8.26)$$

várható értéket. A zárójelet felbontva és az $1/r$ és $1/r^2$ operátorok (8.10)–(8.12) egyenletekben említett várható értékét véve

$$\Delta E_{n,l}^{\text{rel.korr.}} = -\frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{n} \right) \quad (8.27)$$

adódik, ahol $\alpha = ke^2/\hbar c$ a finomszerkezeti állandó. Ez az l -függő felhasadás az 1s alapállapotban (ahol $n=1$ és $l=0$) 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.

8.3.2. A spin-pálya csatolás

A spin-pálya csatolás abból adódik, hogy ha az elektron mozgó rendszeréből vizsgáljuk, a mának \vec{B} mágneses tere van, és ezzel kölcsönhat az elektron sajátperidületéhez tartozó $\vec{\mu}$ mágneses momentum. Ez végeredményben egy $\vec{\mu}\vec{B}$ mértékű perturbációt okoz a

²⁵ Innentől az egyszerűség kedvéért m -mel jelöljük az elektron tömegét: a „mágneses kvantumszám” ugyanis ezután már nem jelenik meg az egyenleteinkben.

Hamilton-operátorban (és itt most eltekintettünk az operátort jelző „kalap” megjelenítésétől, inkább a vektorjellegét hangsúlyozzuk). Ismert, hogy \vec{E} elektromos mező egy \vec{v} sebességű rendszerből nézve $\vec{B} = \vec{v} \times \vec{E}/c^2$ mágneses mezőt okoz; egy ponttöltés elektromos tere pedig $\vec{E} = -ke\vec{r}/r^3$, ezért végül a mag mágneses tere az impulzus $\vec{p} = \vec{v}/m$ kifejezését felhasználva

$$\vec{B} = \vec{v} \times \frac{\vec{E}}{c^2} = -\frac{ke}{c^2 r^3} \vec{v} \times \vec{r} = -\frac{ke}{mc^2 r^3} \vec{p} \times \vec{r} = \frac{ke\vec{L}}{mc^2 r^3}. \quad (8.28)$$

A mag fentiek szerinti mágneses terét és az elektron (klasszikus értelemben vett) saját rendszerében is érvényes

$$\vec{\mu} = g_s \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} = \frac{g_s e}{2m} \vec{S} \quad (8.29)$$

mágneses momentumát skalárisan szorozva kapjuk meg a perturbáló operátort, azaz a Hamilton-operátorhoz hozzáadott tagot. Ez az igen naiv számolás majdnem helyes eredményt ad, ugyanis valójában a perturbáló operátor alakjában egy feles faktor is megjelenik:

$$\hat{V}^{\text{spin-pálya}} = \frac{1}{2} \frac{ke^2 g_s}{2m^2 c^2 r^3} \vec{L} \vec{S} = \frac{ke^2}{2m^2 c^2 r^3} \vec{L} \vec{S} = \frac{\alpha \hbar}{2m^2 c r^3} \vec{L} \vec{S}, \quad (8.30)$$

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

A fenti (8.30) egyenletben megjelenő $1/2$ faktor tulajdonképpen a koordináta-rendszer váltása következtében jelenik meg, ahogy az Llewellyn Thomas Nature **117** page 514 (1926) cikkében bemutatja (amely valójában egyfajta olvasói levél volt). 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 asszociatív volta miatt). Valójában a Schrödinger-egyenlet relativisztikus verziója, a Dirac-egyenlet adja meg a fentiek konzisztens magyarázatát. A végeredményben mindenesetre az LS szorzat szerepel (ahol most elhagytuk a vektorjelölést, de azért észben tartjuk, hogy itt vektorokról, sőt, vektoroperátorokról van szó).

A pályaperdület és a spin vektorait tartalmazó LS skalárszorzat sajátértékét a 7.5. fejezetben tárgyaltakhoz hasonlóan a $J = L + S$ vektoros összefüggés négyzetéből számíthatjuk ki, $LS = (J^2 - L^2 - S^2)/2$ módon. Itt a sajátértékek $j(j+1)$, $l(l+1)$ és $s(s+1)$, így $s = 1/2$ és $j = |l \pm s|$ miatt, $l > 0$ esetén

$$\langle LS \rangle = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \Rightarrow \begin{cases} j=l+1/2 \rightarrow 2 \langle LS \rangle = \hbar^2 l \\ j=l-1/2 \rightarrow 2 \langle LS \rangle = -\hbar^2 (l+1) \end{cases}. \quad (8.31)$$

Ugyanakkor $l = 0$ esetén $j = 1/2$ mindig, és így ekkor $\langle \vec{L} \vec{S} \rangle = 0$. Az r^{-3} operátor (8.12) egyenletben megadott várható értékéből így már meghatározható a tényleges felhasadás. Minden állandót csoportosítva $l > 0$ esetén a következő adódik:

$$\Delta E_{n,l,+1/2}^{\text{spin-pálya}} = l \gamma_{n,l}, \quad (8.32)$$

$$\Delta E_{n,l,-1/2}^{\text{spin-pálya}} = -(l+1) \gamma_{n,l}, \text{ ahol} \quad (8.33)$$

$$\gamma_{n,l} = \frac{mc^2 \alpha^4}{2n^3} \frac{1}{2l(l+1)(l+1/2)}, \quad (8.34)$$

és $l = 0$ esetén $\Delta E = 0$. Például $n = 2$ és $l = 1$ mellett az energiaeltolódásra $mc^2\alpha^4/96 \approx 1,5 \cdot 10^{-5}$ eV jön ki, amely tehát $n = 2$ esetén az s és a p pálya energiájának spin-pálya csatolás miatti különbsége.

8.3.3. A Darwin-hatás

Egy további korrekciót ad az úgynevezett Darwin-tag, amelyet Charles Darwin unokája, Sir Charles Galton Darwin írt le Proc. R. Soc. Lond. **A 118** (1928) 654 publikációjában, a Dirac-egyenlet nemrelativisztikus közelítésének vizsgálatával. Ez szemléletesen (heurisztikusan) az elektron relativisztikus „rezgéséből”, a Breit 1928-as PNAS 14 (7) 553 publikációjában először körülírt, majd Schrödinger által Zitterbewegungnak nevezett jelenségből származik. Ezen jelenség során 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 $\lambda_{\text{Compton}} = \hbar/mc$ amplitúdóval. Ez elkeni a mag által kifejtett potenciált, amely λ_{Compton} nagyságrendű elektronelmozdulást eredményez. Könnyen kiszámítható, hogy ennyi elmozdulás után a potenciál átlagos perturbációja ennek négyzetével és az eredeti potenciál Laplace-ával lesz arányos. A potenciál fluktuációja felírható így:

$$\delta V = V(\vec{r} + \vec{\delta r}) - V(\vec{r}) = \vec{\delta r} \vec{\nabla} V(\vec{r}) + \frac{1}{2} (\vec{\delta r} \vec{\nabla})^2 V(\vec{r}) + \dots \quad (8.35)$$

Itt kihasználhatjuk, hogy

$$\langle (\vec{\delta r} \vec{\nabla})^2 V \rangle = \frac{1}{3} \langle \delta r^2 \rangle \langle \vec{\nabla}^2 V \rangle, \quad (8.36)$$

illetve izotróp fluktuációk esetén $\langle \vec{\delta r} \rangle = 0$, és ekkor

$$\langle \delta V \rangle = \frac{1}{6} \langle \delta r^2 \rangle \langle \vec{\nabla}^2 V \rangle = \frac{1}{6} \langle \delta r^2 \rangle \langle \Delta V \rangle. \quad (8.37)$$

Így tehát $\langle \delta r^2 \rangle = \lambda_{\text{Compton}}^2$, a Hamilton-operátor ebből adódó perturbációja pedig

$$\hat{V}_{\text{Darwin}} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V, \quad (8.38)$$

azaz az $1/r$ potenciál Laplace-a szerepel benne, illetve egy $1/8$ -os szorzófaktor, amely a fenti heurisztikus gondolatmenetben levezetésben nem teljesen helyesen adódik. Ahogy már a (8.13) egyenletben is láttuk, az $1/r$ potenciál Laplace-a a $\delta^3(\vec{r})$ operátorral lesz arányos, a konstansokkal együtt:

$$\Delta V = \Delta \left(-\frac{\alpha \hbar c}{r} \right) = 4\pi \alpha \hbar c \delta^3(\vec{r}). \quad (8.39)$$

Erre az adott n állapotban $l = 0$ esetén a (8.16) és (8.17) egyenletekben megadtuk a várható értéket, ezt figyelembe véve pedig az energiaeltolódás:

$$\Delta E^{\text{Darwin}} = \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \delta_{l0}. \quad (8.40)$$

Érdemes megemlíteni, hogy a fenti „Darwin-potenciál” a Dirac-egyenletből közvetlenül is adódik.

8.3.4. Összesítés

A relativisztikus korrekció és a spin-pálya csatolás alapján az s és p állapotok energiája különböző lenne, de a Darwin-tag miatt az energiaszintek végül l és s helyett csak j -től függenek. A teljes Hamilton-operátor ekkor így írható le:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2mc}}_{\hat{H}^{(0)}} + \hat{V} - \underbrace{\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}}_{\text{rel. hatás}} + \underbrace{\frac{\alpha\hbar}{2m^2cr^3}\vec{L}\vec{S}}_{\text{spin-pálya csat.}} + \underbrace{\frac{\pi\alpha\hbar^3}{2m^2c}\delta^3(\vec{r})}_{\text{Darwin-tag}}. \quad (8.41)$$

A fenti három perturbáció miatti energiaeltolódást a (8.27), (8.32), (8.33) és (8.40) egyenletekben adtuk meg. Ezek összeadásakor elég sok speciális esetre kell figyelniük: például észrevehetjük, hogy a Darwin-tag és a spin-pálya csatolás egymás komplementere abban az értelemben, hogy az egyik csak $l = 0$, a másik csak $l > 0$ esetben játszik szerepet. Mivel azonban $l = 0$ esetén $j = l + 1/2$ mindig, így érdekes módon (8.32) formailag éppen a (8.40) kifejezéssel azonos eredményt ad $l \rightarrow 0$ esetben. Ez azt jelenti, hogy valójában elegendő a (8.32) kifejezést vennünk tetszőleges l értékére. További egybeesés, hogy valójában $j = l + 1/2$ és $j = l - 1/2$ esetében ugyanaz a kifejezés adódik, amely immár l -től nem függ majd (ennek ellenőrzését az olvasóra bizzuk). Végül a **finomszerkezetet is figyelembe vevő energiaszintek** összességében a következők lesznek:

$$\Delta E_{n,l} = -\frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \text{ azaz} \quad (8.42)$$

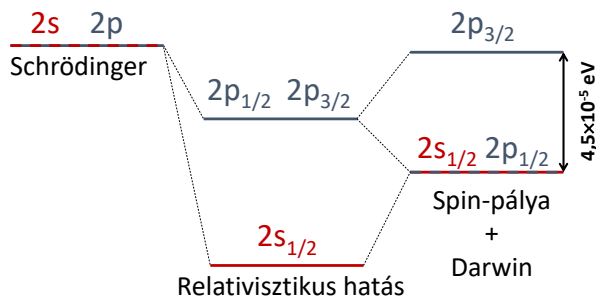
$$E_{n,j} = E_n \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n} \right)^2 \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (8.43)$$

ahol az első kifejezés az n, l állapot energiájának eltolódását adja meg, míg a második a kialakuló energiaszinteket – és itt már indexben j -t írtunk, ezzel is jelezve, hogy valójában ettől függ az állapot energiája.

Elsőként vegyük észre, hogy $n = 1$ állapot energiája eltolódik, de nem hasad fel: itt $j = 1/2$ mindenképpen, amit úgy is mondhatunk, hogy $n = 1$ esetén csak az $1s_{1/2}$ pálya lehetséges. Mi a helyzet az $n = 2$ állapotokban? 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 $n = 2$ állapotok két részre szakadnak, a $2s_{1/2}$ és a $2p_{1/2}$ azonos energiájú, a $2p_{3/2}$ ezzel szemben egy másik energiaszintet ad, ahogy azt a 37. ábra is mutatja.

Gyakorlófeladat

Ahogy fentebb láttuk, az n, l, j pálya energiaszintje a finomfelhasadással együtt $E_{n,l,j} = E_0 [n^2 + \alpha^2 \cdot (n/(j+1/2) - 3/4)]$ módon írható. Számítsuk ki ez alapján a hidrogénatom $3d_{1/2}$ és $3d_{3/2}$ pályáinak energiját, illetve ezek abszolút és relatív különbségét. (Az említett pályákon $n = 3$, $l = 1$, $j = 1/2$, illetve $3/2$. Emlékeztetőül megadjuk továbbá, hogy $E_0 = 13,7$ eV, $m_e c^2 = 511$ keV/ c^2 és $\alpha = 1/137$.)



37. ábra. A hidrogénatom energiaszintjeinek finomszerkezete, először csak a relativisztikus hatást figyelembe véve, majd a spin-pálya csatolást és a Darwin-féle korrekciót is

8.4. A hiperfinom felhasadás

A **proton mágneses momentuma** a (7.83)–(7.85) egyenletekben szereplő $g_p \approx 5,58$ giromágneses faktoriall és a mag-magneton $\mu_N = e\hbar/2m_p$ definíciójával kifejezve

$$\vec{\mu}_p = \frac{eg_p}{2m_p} \vec{S}_p = g_p \mu_N \frac{\vec{S}_p}{\hbar}, \quad (8.44)$$

ahol \vec{S}_p a proton spinje. Ez a $\vec{\mu}_p$ mágneses momentum \vec{B}_p mágneses teret kelt, ami hat az elektron $\vec{\mu}_e$ mágneses momentumára, az energiaeltolódás pedig a

$$\Delta E^{\text{hiperfinom}} = \langle \vec{\mu}_e \vec{B}_p \rangle \quad (8.45)$$

várható érték lesz (figyeljünk rá, hogy itt viszont már nem a proton, hanem az elektron mágneses momentuma szerepel).²⁶ A $\vec{\mu}_p$ mágneses momentum vektorpotenciálja

$$\vec{A}_p = -kc^2 \frac{\vec{\mu}_p \times \vec{r}}{r^3}, \quad (8.46)$$

és ebből a mágneses tér:

$$\vec{B}_p = \vec{\nabla} \times \vec{A}_p = kc^2 \left(\frac{3(\vec{\mu}_p \vec{r})\vec{r} - \vec{\mu}_p r^2}{r^5} \right) + \frac{8\pi kc^2}{3} \vec{\mu}_p \delta^3(\vec{r}), \quad (8.47)$$

ahol az utolsó, Dirac-deltás tag a mágneses momentum „belső” mágneses mezejét jellemzi, ahogy azt a szokásos elektrodinamikai tárgyalásból megkaphatjuk. Vegyük észre, hogy a fenti összeg mindegyik tagjában szerepel $\vec{\mu}_p$. A (8.45) egyenlet értelmében ezt kell a $\vec{\mu}_e$ vektorral skalárisan szoroznunk, majd ezen szorzat várható értékét vennünk. Ebben szerepelni fog a δ^3 Dirac-delta operátor (amely a korábbiakhoz hasonlóan itt is a Dirac-deltával való szorzás formájában jelent operátort) várható értéke. Ezt a (8.16) és (8.17) egyenletekben már megadtuk: az eredmény $l = 0$ pályákra $1/(\pi a^3 n^3)$, $l > 0$ esetén pedig nulla.

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 le. Itt g_j a Landé-féle g-faktor, ami $g_s \approx 2$ és $g_l = 1$ értékéből az s, l, j kvantumszámok

²⁶ Érdekeség, hogy mindezt megfordítva is ekvivalens eredményt kapnánk, tehát úgy is mondhatnánk, hogy a proton mágneses momentumára hat az elektron által keltett mágneses tér.

függvényében adódik a (7.46) egyenletnek megfelelően, és $l = 0$ esetén $g_j = g_s \approx 2$. Ezzel felírható az energiaeltolódás, amelyben a mágneses tér és a momentum szorzata miatt J és S_p skalárszorzata szerepel. Ennek kiszámításához vezessük be az

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{S}_p \quad (8.48)$$

operátort, amelynek sajátértékeit az f kvantumszám jellemzi majd – és ebben az esetben is igaz lesz, hogy F^2 sajátértékei $\hbar f(f+1)$ módon írhatóak fel –, amely az operátor definíciójából adódóan $f = j \pm s_p$ értékeket vehet fel (attól függően, hogy S_p -nek J irányában vett vetülete pozitív vagy negatív-e). A JS_p skaláris szorzat várható értékét a 7.5. szakaszban írottakhoz hasonlóan kaphatjuk meg:

$$2 \left\langle \vec{J} \vec{S}_p \right\rangle = \hbar^2 (f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)). \quad (8.49)$$

Ezek után a (8.47) egyenletben az egyes, r különféle hatványait és δ -t tartalmazó tagok várható értékét a 8.2. szakasznak megfelelően ki kell számolnunk. Ezt itt nem csináljuk végig, csak a végeredményt közöljük:

$$\Delta E^{\text{hiperfinom}} = \frac{4 m_e}{3 m_p} \alpha^4 m_e c^2 g_p \frac{1}{n^3} \left\langle \frac{\vec{J} \vec{S}_p}{\hbar^2} \right\rangle = \frac{A}{2} (f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)), \quad (8.50)$$

$$\text{ahol } A = \frac{4 m_e}{3 m_p} \alpha^4 m_e c^2, \quad (8.51)$$

továbbá $s_p = 1/2$ a proton spinje. Általában minden energiaszint megkettőződik emiatt: attól függ az energia, hogy a proton spinjének J irányú vetülete $+1/2$ vagy $-1/2$; előbbi esetben $f = j + s_p$, utóbbiban $f = j - s_p$ lesz. Az 1s pálya (ahol $j = 1/2$) esetén az $f = 1$ vagy $f = 0$ állapotok fordulnak elő, ekkor az egyik energia $A/4$, a másik pedig $-3A/4$. Ebben az esetben tehát a két pálya közötti felhasadás

$$\Delta E^{f=0 \text{ vs. } f=1} = A = \frac{4 m_e}{3 m_p} \alpha^4 m_e c^2 g_p \approx 5,88 \cdot 10^{-6} \text{ eV}. \quad (8.52)$$

Ezen energiának egy 1418,9 MHz frekvenciájú sugárzás felel meg, amelynek hullámhossza 21 cm, és a rádiócsillagászatban sokszor látszódik, ugyanis ez áthatol a csillagközi poron. Annyira fontos, hogy a Pioneer-táblára is rákerült mint univerzálisan (civilizációfüggetlenül) értelmezhető hosszúságegység. 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 csak ennyire pontos. A kvantum-elektrodinamika elmélete adja meg a kísérleti eredményeket a legpontosabban.

8.5. A Lamb-eltolódás

Még egy további korrekciót megemlítünk, amelynek fizikai háttere ugyan bonyolult, de jelentősége igen nagy. Ezen korrekció a $2s_{1/2}$ és $2p_{1/2}$ pályák között körülbelül 1,06 GHz-es frekvenciának (vagy 30 cm hullámhossznak) megfelelő energiakülönbséget létrehozó **Lamb-eltolódás**. Oka pedig a **kvantumtérelmélet**, amely szerint az elektron bármikor kibocsáthat egy fotont magából, ha azt el is nyeli (ez adja az úgynevezett

egyhurok-korrekciót). Ezek a **virtuális fotonok** „körbelengik” az atom elektronjait, és lecsökkentik az elektron „effektív” tömegét és töltését (és ezt később **renormálás** néven ismerjük majd). Az elektron elektromos tere egy kicsit kisebb lesz, de igazán csak kis távolságon lesz ennek hatása, ezért csak az s állapotot befolyásolja, amely a mag körül nagy sűrűségű. Ezen kölcsönhatás miatt lesz különbség a $2s_{1/2}$ és $2p_{1/2}$ pályák amúgy a hiperfinom felhasadásig bezárólag azonos energiái között, illetve egyébként a $g_s = 2$ összefüggés is emiatt nem teljesül. Eggyel részletesebben vizsgálva kiderül, hogy ezt az eltolódást első közelítésben a 38. ábrán látható három effektus okozza, a „vákuumpolarizáció” (mikor a foton elektron-pozitron 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, lásd az elektron anomális mágneses momentumáról szóló 7.8. szakaszt).

A Lamb-eltolódást úgy lehet egyébként „félklasszikusan” kiszámítani, ha észrevesszük, hogy ugyanúgy a potenciál fluktuációjáról van szó, mint a Darwin-hatásnál, tehát a (8.37) egyenlethez hasonlóan itt is egy

$$\langle \delta V \rangle = \frac{1}{6} \langle \delta r^2 \rangle \langle \Delta V \rangle \quad (8.53)$$

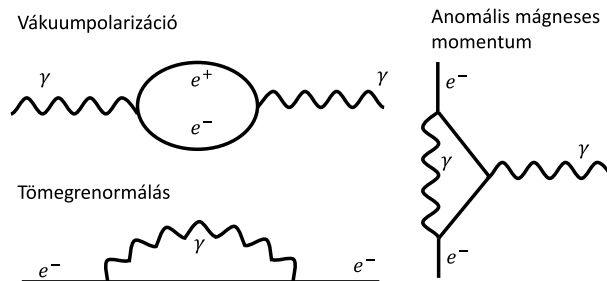
jellegű tag jelenik meg, ahol ΔV a potenciál Laplace-a. Ugyanakkor itt δr átlaga nem a Compton-hullámhossznak felel meg, hanem kicsit bonyolultabban adódik. Mindezt nem részletezzük jobban, csak Welton Phys. Rev. 74 (1948) 1157 cikke alapján megadjuk, hogy az energiaeltolódás a $2s$ állapotban

$$\langle \delta V \rangle = \alpha^5 m c^2 \frac{1}{6\pi} \ln \frac{1}{\pi\alpha}, \quad (8.54)$$

amely 10%-os nagyságrendű eltérést ad a kvantumtérelméleti számoláshoz képest. Ez utóbbi például Weinberg „The Quantum Theory of Fields I.” című könyvének 14.3. szakaszában szerepel, és az azonos j értékkel rendelkező p és s pályák közötti teljes eltérésre

$$\Delta E^{\text{Lamb}} = \alpha^5 m c^2 \frac{\xi_n}{4n^3} \quad (8.55)$$

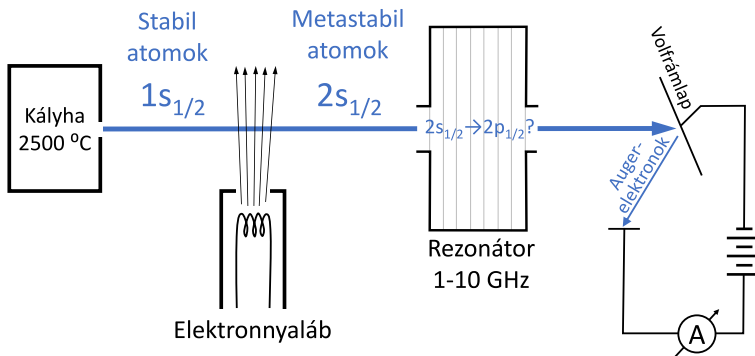
jön ki, ahol $\xi_2 \approx 13$, és n -től gyengén függ. Ebből $n = 2$ esetre körülbelül $4,3 \cdot 10^{-6}$ eV energiaeltolódás adódik, amely 1040 MHz-es sugárzásnak felel meg. Igen részletes,



38. ábra. A Lamb-eltolódáshoz hozzájáruló folyamatok Feynman-diagrammjai

a fentiekén túl például a magszerkezet és a gyenge kölcsönhatás (lásd később a 11.5.2. szakaszban) hatását is figyelembe vevő számolást, illetve a Lamb-shift különféle méréseinek és számításainak összegzését például Eides és munkatársai *Physics Reports* **342** (2001) 63 cikkében találhatjuk meg.

Lamb és Retherford 1947-es kísérlete mutatta ki ezt az igen kicsi eltolódást. Valójában az eltolódás következtében létrejövő spektrumvonalat vizsgálták a 39. ábrán látható, és a *Phys. Rev.* **72** (1947) 241 cikkben leírt módon. Mint fentebb részleteztük, az átmenet a rádiófrekvenciás tartományban van, $4,3 \cdot 10^{-6}$ eV az értéke. Ezt optikai úton nem lehet elérni, csak nagyfrekvenciás rezonanciával. Ez viszont azért szerencsés, mert így a Doppler-kiszélesedés nem jelent problémát (mert az a frekvenciával arányos). A fő kísérleti kérdés, hogy a sok átmenet között hogyan különböztették meg éppen a $2s_{1/2}$ és $2p_{1/2}$ közöttit? A 39. ábrán bemutatott kísérlet lényege, hogy egy 2500 fokok kályhából bocsátották ki a hidrogénatomokat, 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, a még mindig $2s_{1/2}$ állapotban lévő atomok elbomlanak, és a fóliából úgynevezett Auger-elektronokat bocsátanak ki. 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 energiáfelszabadulás egy további elektront lökhet ki az atomból. Ez utóbbit hívjuk Auger-elektronnak. A $2s_{1/2}$ és az $2p_{1/2}$ állapot közötti energiát a nagyfrekvenciás generátorral eltalálva lényegesen kevesebb ilyen Auger-elektronot 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 1057,843(4) MHz, mért értéke pedig 1057,845(3) MHz (mindkét érték szintén a fentebb is hivatkozott *Physics Reports* **342** [2001] 63 publikációban szerepel). A hidrogénatom spektrumát ezzel a lehető legnagyobb pontossáig értjük, az ebben és a korábbi szakaszokban említett egyes felhasadásokat pedig a 40.



39. ábra. A Lamb–Retherford-kísérlet elrendezésének vázlata

ábra illusztrálja.

Érdeemes hozzáfűzni, hogy nagy rendszámú, de csak egyetlen elektront tartalmazó atomokkal igen nagy pontossáig lehet ellenőrizni a fentiek nagy rendszámra általánosított verzióját. Például U^{91+} esetén (azaz a 92-szeresen pozitív mag mellett egyetlen elektronra) az első energiaszint (a Z^2 -tel való skálázás miatt) 132 keV, és ehhez a tömegrenormálás 355 eV korrekciót ad, a vákuumpolarizáció -89 eV korrekciót, a mag véges méretéből adódó korrekció 199 eV, és még a kvantumtérelmélet másodrendű korrekciói is 1 eV nagyságrendűek – ennek oka az, hogy ezen korrekciók Z^4 szerint skáláznak.

8.6. A többelektronos atomok szerkezete

Több elektront tartalmazó atomok esetén többelektronos hullámfüggvényt kell felírunk. Például adott n és l kvantumszámokkal jellemzett pályán lévő két elektronra ez a következő alakot ölti:

$$\Psi(x_1, x_2)_{p_1, s_1; p_2, s_2}, \quad (8.56)$$

ahol x_i az egyes elektronok helye, p_i az impulzusa és s_i a spin perdület irányában vett vetülete (lehetne másik vetületet is venni, de ez a választás praktikus, mert ez a vetület határozza meg a j kvantumszámot is). Ezek a függvények nem a szokásos Hilbert-terünkben vannak, hanem a kétrészecske-állapotok terének elemei, amely tulajdonképpen a Hilbert-tér önmagával tenzorszorozva. Csak a spint tekintve \mathbb{C}^2 az egyrészecske Hilbert-tér, és itt a z irányú spin sajátállapotai a $|\uparrow\rangle = (1, 0)^T$, $|\downarrow\rangle = (0, 1)^T$ bázist alkotják. A kétrészecske-állapotokat a \mathbb{C}^4 vektorok jelenítik meg, pontosabban a $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ tér elemei. Ebben a térben a $|\uparrow\uparrow\rangle$ állapot $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ módon értelmezhető, és az alábbi bázist adhatjuk meg:

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = (1, 0, 0, 0)^T, \quad (8.57)$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = (0, 1, 0, 0)^T, \quad (8.58)$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = (0, 0, 1, 0)^T, \quad (8.59)$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = (0, 0, 0, 1)^T. \quad (8.60)$$

Ezek a spinállapotokon a kétrészecske-spinoperátorok hatnak, amelyek

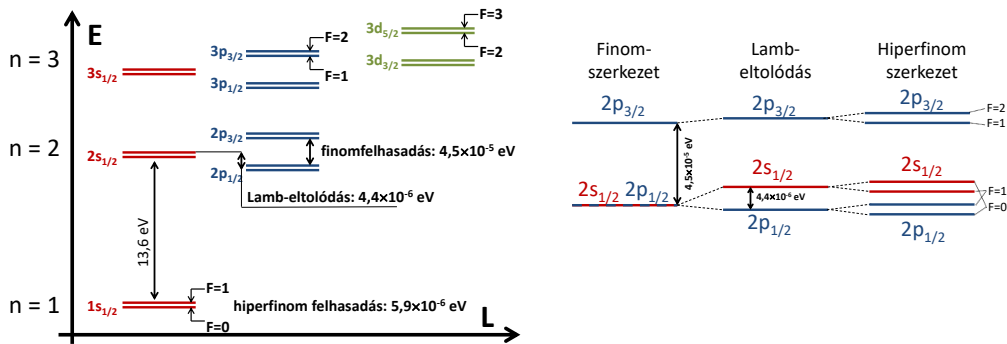
$$\vec{\sigma}_2 = \vec{\sigma} \otimes \text{id} + \text{id} \otimes \vec{\sigma} \quad (8.61)$$

módon adhatóak meg, ahol az operátorok tenzorszorzata úgy értelmezendő, hogy az első operátor az első részecske állapotára hat, a második a másodikra, tehát például

$$A \otimes B |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = A |\uparrow\rangle \otimes B |\uparrow\rangle. \quad (8.62)$$

Ekkor a teljes spinnégyszet operátora így fejthető ki:

$$\begin{aligned} \sigma_2^2 &= \sigma^2 \otimes \text{id} + \text{id} \otimes \sigma^2 + (\vec{\sigma} \otimes \text{id}) \cdot (\text{id} \otimes \vec{\sigma}) + (\text{id} \otimes \vec{\sigma}) \cdot (\vec{\sigma} \otimes \text{id}) = \\ &= \sigma^2 \otimes \text{id} + \text{id} \otimes \sigma^2 + 2\sigma_x \otimes \sigma_x + 2\sigma_y \otimes \sigma_y + 2\sigma_z \otimes \sigma_z, \end{aligned} \quad (8.63)$$



40. ábra. A hidrogénatom energiaszintjeinek részletes szerkezete. A főkvantumszám szerinti felhasadás a Coulomb-kölcsönhatásból adódik, a perdületek 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 kvantum-elektrodinamikában keresendő, míg a hiperfinom felhasadás az elektron mágneses terének és a mag spinjének kölcsönhatásából adódik. A jobb oldali ábrán a finomszerkezet, a hiperfinom szerkezet és a Lamb-féle eltolódás látható „kinagyítva”.

ahol ‘.’ az operátorok „pontenkénti” skaláris szorzását jelöli. Vegyük figyelembe a 7.6. szakasz alapján, hogy $\sigma^2 |\uparrow\rangle = 3/4 \hbar^2 |\uparrow\rangle$, illetve

$$\sigma_x |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle, \quad \sigma_y |\uparrow\rangle = i \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle, \quad \sigma_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad (8.64)$$

$$\sigma_x |\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad \sigma_y |\downarrow\rangle = -i \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad \sigma_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle. \quad (8.65)$$

Innen pedig a $|\uparrow\uparrow\rangle$ állapotra a következő összefüggések adódnak:

$$\sigma_x \otimes \sigma_x |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4} |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (8.66)$$

$$\sigma_y \otimes \sigma_y |\uparrow\uparrow\rangle = -\frac{\hbar^2}{4} |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (8.67)$$

$$\sigma_z \otimes \sigma_z |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4} |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (8.68)$$

és hasonlóan megkapható ezek hatása a többi kétrészecske-spinállapotra is. Innen pedig

$$\sigma_2^2 |\uparrow\uparrow\rangle = 2\hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle, \quad \text{és hasonlóan} \quad (8.69)$$

$$\sigma_2^2 |\downarrow\downarrow\rangle = 2\hbar^2 |\downarrow\downarrow\rangle, \quad \text{illetve} \quad (8.70)$$

$$\sigma_2^2 |\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (3 |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (8.71)$$

$$\sigma_2^2 |\downarrow\uparrow\rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (3 |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle). \quad (8.72)$$

A teljes spin ezen operátorának sajátállapotai pedig a

$$|\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle, \quad \text{és} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (8.73)$$

állapotok lesznek (ahol a $\sqrt{2}$ a normálás miatt szükséges). A hozzájuk tartozó sajátértékek $2\hbar^2$, illetve 0 (utóbbi a különbséget tartalmazó, ún. „szinglet” állapot esetében, míg előbbi a három másik „triplet” állapot esetében), ami az $\hbar^2 s(s+1)$ sajátértékformula miatt $s=1$, illetve $s=0$ állapotokat jelöl. A spin adott irányú vetületét a

$$\sigma_z = \sigma_z \otimes \text{id} + \text{id} \otimes \sigma_z \quad (8.74)$$

operátor határozza meg, ennek sajátértékei az $s=1$ állapotban $s_z = -1, 0, 1$ lehetnek, míg $s=0$ esetén $s_z = 0$ – tehát az operátorok matematikája szépen visszaadja a várakozásunkat. A következőkre nézve fontos megjegyezni, hogy két feles spinű részecske együttes állapotának spinje lehet 1 vagy 0, előbbi háromszorosan degenerált (azaz ezen állapotok egy tripletet alkotnak), utóbbi pedig szinglet (azaz egyetlen sajátállapot tartozik hozzá).

Két- vagy több részecske-állapotok esetén definiálhatjuk a kicserélés operátorát. Két-részecske-állapotokra ez így hat:

$$P_{12} \Psi_{p_1, s_1; p_2, s_2} = \Psi_{p_2, s_2; p_1, s_1}, \quad (8.75)$$

ahol most a spin- és az impulzusfüggés jelzi, hogy melyik részecskéhez melyik értékek tartoznak. Mivel $P_{12}^2 = \text{id}$ (azaz P_{12} önmaga inverze), ezért a sajátértékei csak ± 1 lehetnek. A $+1$ sajátértékhez tartozó sajátállapotot szimmetrikus, a -1 -hez tartozót antiszimmetrikus hullámfüggvénynek nevezzük, és értelemszerűen ezek ilyen alakot vesznek fel:

$$\Psi_{p_1, s_1; p_2, s_2}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{p_1, s_1; p_2, s_2} \pm \Psi_{p_2, s_2; p_1, s_1}). \quad (8.76)$$

Kiderül, hogy a fermion típusú (azonos) részecskepárok mindig antiszimmetrikus, míg a bozonok szimmetrikus hullámfüggvénybe írhatóak. Ez valahol mélyen azt jelenti, hogy az azonos típusú (és azonos állapotú) kvantumos részecskék **teljesen azonosak**: kicserélésük nem megfigyelhető, hiszen ilyenkor csak egy ± 1 faktor adódik a hullámfüggvényben. Kiderül ugyanakkor, hogy bár egyetlen részecskepár esetén a kicserélés nem fizikai hatás, de interferenciát okozhat: az ebből adódó hatást nevezzük kvantumstatisztikus korrelációnak.

Visszatérve az atomfizikára, fontos látni, hogy a többatomos elektronok hullámfüggvénye (az elektron feles spinje, azaz fermiontermészete miatt) minden elektron cseréjére antiszimmetrikus kell hogy legyen. Ezt hívják Pauli-elvnek. Így tehát az 1s pályán két elektron lehet: ilyenkor a két elektron n, l, m kvantumszámjai azonosak (így az ezekkel kapcsolatban álló térbeli hullámfüggvény is), a spintérbeli kétrészecske-állapot pedig antiszimmetrikus:

$$\Psi_{p_2, s_2; p_1, s_1} = \Psi(x_1) \Psi(x_2) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (8.77)$$

Ahogy fentebb láttuk, ezen kételektronos állapotban a teljes spin értéke nulla, a részecskecserére pedig antiszimmetrikus.

Ezen túl a többelektronos atomokat a **soktestprobléma** bonyolultsága miatt analitikusan sem tudjuk jól kezelni. Ugyanakkor többnyire úgy tekinthetünk a többelektronos atomokra, amelyeknek olyan állapotaik vannak, mint a hidrogénatomnak: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d és így tovább. Ezen belül a perdületvetületek (azaz az m kvantumszámok) is

külön állapotok, tehát minden adott l értékhez $2l + 1$ lehetséges állapot tartozik: az s pályákhoz 1, a p pályákhoz 3, a d pályákhoz 5 és így tovább. Ezeket az elektronok egyével be tudják tölteni, illetve a Pauli-elv miatt minden egyedi állapotba két elektron kerülhet (a két lehetséges spinvetület avagy $j = |l \pm s|$ teljes perdület miatt). Ennek megfelelően az s pályákra 2 elektron kerülhet, a p pályákra 6, a d pályákra 10 és így tovább. Egy adott n kvantumszámnak megfelelő energiaszint („héj”) akkor teljes, ha minden elektronpálya be van töltve. Ha az atom összes „héja” betöltött, akkor 2, 8, 18, 32 stb. elektronja lehet, ezekből adódnak a periódusos rendszer „mágikus számai”, azaz a nemesgázok rendszáma (bár bizonyos energiák fölött annyira erős az energiaszintek felhasadása, hogy például a 3s pályák „megelőzik” a 2d pályákat). Mivel az állapot átlagos méretét és kötési energiáját is alapvetően n befolyásolja, ezért a nemesgázok után nagyot változik az atomi méret és a kötési energia is, ahogy az 1.6. és 3.2. szakaszokban tárgyaltuk.

Végezetük felsoroljuk, hogy az atomi elektronszerkezetet alakító legfontosabb tényezők a következők:

1. Coulomb-vonzás a mag és az elektronok között
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. Pályaperdület-magspin kölcsönhatása
8. Relativisztikus korrekciók
9. A fermion-hullámfüggvény antiszimmetriájából adódó energiaeltolódás

Ezek közül a legfontosabbak az 1., 2., 3. és 9. sorszámú hatások. Mindezeket általában perturbatívén próbáljuk kezelni, centrális potenciált feltételezve, és valamilyen maradék kölcsönhatást számolva.

Gyakorlófeladat

Egy kétrészecske-rendszer teljes spinjét a $\vec{\sigma}_2 = \vec{\sigma} \otimes \text{id} + \text{id} \otimes \vec{\sigma}$ vektoroperátor adja meg. Ennek négyzetének, a σ_2^2 operátornak (amely már skalár) a sajátértékeit és sajátvektorait keresve állapíthatjuk meg a kétrészecske-rendszer lehetséges spinsajátállapotait. Bizonyítsuk be, hogy a sajátértékek 0 és $2\hbar^2$, amiből a teljes spinre $s = 0$ és $s = 1$ adódik!

9. Atommagmodellek

9.1. A neutron felfedezése, a magerő

Ahogy az 1.5. szakaszban láttuk, a Rutherford által felügyelt, Geiger és Marsden által elvégzett aranyfóliás szórás kísérletek után világossá vált: az atomok egy parányi, pozitívan töltött atommagból és a körülötte lévő, a magnál 4-5 nagyságrenddel nagyobb, negatívan töltött „elektronfelhőből” állnak – ez utóbbi energiaszintjeinek kvantummechanika által adott szerkezetét vizsgáltuk részletesen az előző fejezetben. Az atommag méretéről tudjuk, hogy

$$R = R_0 A^{1/3} \quad (9.1)$$

módon függ az A tömegszámtól, ahol $R_0 \approx 1,2$ fm egy globális illesztésből származó konstans. Például az aranyatommag sugara 7 fm körül van; az aranyatomé pedig becsléstől függően körülbelül 150 pm – a két méretskála között négy nagyságrendnél is nagyobb eltérés van. Ebben és a következő fejezetben az atommag szerkezetével foglalkozunk; támaszkodva Csanád Máté „Bevezetés a klasszikus és a modern fizikába” című (Eötvös Kiadó, Budapest, 2018) jegyzetében írottakra is.

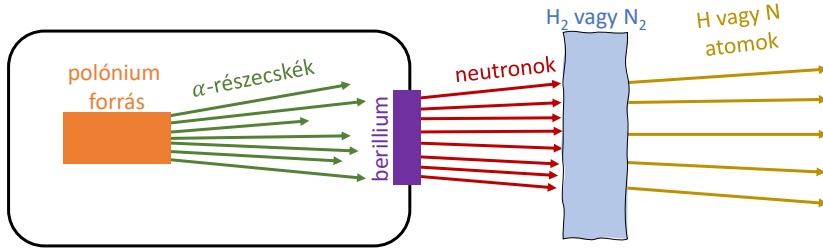
Elsőként vizsgáljunk meg két, az atomok szerkezetének ismeretében felmerülő kérdést:

- Mi tartja egyben a pozitív töltésű atommagot, illetve van-e belső szerkezete?
- Mi a kapcsolat az atomok tömege (a tömegszám) és az elektronok száma (a rendszám) között?

A könnyű elemek esetében a tömegszám általában kb. a rendszám kétszerese, nehéz elemek esetében a tömegszám tipikusan a rendszám kétszeresénél valamivel nagyobb. Ez annak fényében meglepő, hogy az elektronok és protonok számának meg kell egyeznie, mivel az atomok semlegesek. A Rutherford-kísérlet nyomán kialakult atommag-képpel kapcsolatban pedig nem világos, hogy mi tartja össze az atommagot, ha azt csak a pozitív töltésű protonok alkotják: a gravitáció vonzóereje ehhez extrém kevés lenne.

Rutherford 1920-ban felvetette, hogy az atomok rendszáma és tömegszáma közötti különbséget egy, az atommagokban lévő **semleges részecske** okozhatja. Ő ekkor még azt tette fel, hogy ez egy proton és egy elektron kötött állapota. Erről a lehetőségről azonban a kvantummechanika megalkotása után már világos lett, hogy (ha csak az elektromágneses kölcsönhatást tesszük fel) nem lehetséges; lényegében azért, mert a határozatlansági reláció túl nagy energiát igényelne ilyen kis térfogatba zárt elektron számára: az R méretű helyre bezártság (azaz: legfeljebb ennyi helybizonytalanság) \hbar/R méretű impulzusbizonytalanságot eredményez. Ez egy femtométeres méretnél kb. 100 MeV/c körüli impulzust (és ennek megfelelő mozgási energiát) jelent: ekkora impulzusú elektron nem maradhatna elektromosan kötve a proton körül, kiszakadna ebből a kötött állapotból.

1930-ban Bothe és Becker felfedezett egy **áthatoló sugárzást**, amely könnyű elemek (Be, B, Li) α -részecskékkel való bombázása során keletkezett. Mivel a sugárzást nem térítette el az elektromágneses tér, azaz semleges volt, először azt gondolták, hogy egy γ -sugárzást (azaz fotonokból álló sugárzást) találtak. Két évre rá Frederic Joliot és Irène Joliot-Curie azt találta, hogy ez a sugárzás paraffinra (vagy más hidrogéntartalmú



nitrogén: $v_N \approx 4,4 \cdot 10^5$ m/sh
 hidrogén: $v_H \approx 3,3 \cdot 10^6$ m/s

$$\frac{v_N}{v_H} = \frac{1 + \frac{m}{M_H}}{14 + \frac{m}{M_H}} \approx 0,13 \Rightarrow m \approx M_H$$

41. ábra. Chadwick kísérlete, amely alapján a neutron felfedezését kijelenthetjük.

vegyületre) esik, akkor nagyenergiás protonok lépnek ki belőle²⁷. Ez kinematikai számítások alapján valószínűtlenné tette, hogy a megfigyelt sugárzás tényleg γ -sugárzás. Szintén 1932-ben Chadwick a Nature **129**, 312 (1932) cikkében felvetette, hogy a sugárzást egy új részecske, a neutron alkotná. Kísérleteket is végzett, amelyeket a Proc. R. Soc. Lond. **A136** (1932) 692 cikkben részletezett: Po-210 radioaktív forrásból kilépő α -részecskékkal Be-9 céltárgyat bombázott. Az így keletkező áthatoló (elektromosan semleges) sugárzás hidrogéngázzal és nitrogéngázzal való kölcsönhatását vizsgálta – a sugárzás részecskéi meglökték a gáz atommagjait, és ezen meglökött atommagok előrehaladását mérte abban az esetben, mikor nem volt oldalirányú kölcsönhatás, azaz a sugárzás részecskéi „visszafordultak”. A kísérletet a 41. ábra illusztrálja. Ha a bejövő sugárzás részecskéinek impulzusa p , az ütközés utáni impulzusa $-p'$ (ahol a negatív előjel az irány ellentétességét jelzi), tömege m , a meglökött atommag impulzusa p_A , tömege M_A , akkor az energia és az impulzus megmaradása ezt a két egyenletet adja:

$$p = p_A - p', \quad p^2 = p_A^2 \frac{m}{M_A} + p'^2. \quad (9.2)$$

Ebből pedig, bevezetve az A atommagra vonatkozó $x_A = m/M_A$ tömegarányt, a

$$p_A = \frac{2p}{1 + x_A} \quad (9.3)$$

egyenlet adódik. A nitrogén és a hidrogén esetében kapott meglöködést összehasonlítva,

²⁷ Érdekeség, hogy a Joliot–Curie házaspár Nobel-díjat kapott, hasonlóan a Skłodowska–Curie házaspárhoz: így ők öt Nobel-díjjal (Marie Skłodowska-Curie kettőt is kapott) az ebben a tekintetben legsikeresebb családot alkották.

az x_N és x_H arányok segítségével a következő adódik:

$$\frac{p_N}{p_H} = \frac{1 + x_H}{1 + x_N}, \text{ illetve a sebességekre} \quad (9.4)$$

$$\frac{v_N}{v_H} = \frac{1 + x_H}{14 + 14x_N} = \frac{1 + x_H}{14 + x_H}, \quad (9.5)$$

hiszen $M_N = 14M_H$ és így $x_H = 14x_N$. A sebességek v_N/v_H arányát mérve Chadwick meghatározta, hogy $x_H \approx 1$, azaz a sugárzás részecskéinek tömege kb. a proton tömegének felel meg. (Mindezekért Chadwick 1935-ben Nobel-díjat kapott). A sugárzás semlegességét az is mutatta, hogy 10-20 cm ólmon is át tud hatolni, míg az ilyen energiájú protonokat már 1 mm ólom is megállítja. Végül az így felfedezett új, semleges részecskéket elnevezték **neutronnak**.

Ezután a tudományos közvélemény gyorsan elfogadta, hogy az atommagok protonokból és neutronokból állnak; ennek ismeretében mind a proton, mind a neutron tömegét pontosabban is meg lehetett határozni. A tömegek (XXI. századi pontossággal, a korábban is említett CODATA adatbázis adatai alapján):

$$M_p = 938,27208816(29)\text{MeV}/c^2, \quad (9.6)$$

$$M_n = 939,56542052(54)\text{MeV}/c^2, \quad (9.7)$$

$$M_n - M_p = 1,29333236(46)\text{MeV}/c^2 \quad (9.8)$$

$$\frac{M_n}{M_p} - 1 = 0,00137841931(49), \quad (9.9)$$

azaz mindkét tömeg 10 nagyságrend pontossággal ismert, a hányadosuk egytől való eltérése és a különbségük is hét értékes jegy pontossággal. A protonokat és neutronokat összefoglaló néven **nukleonoknak** hívjuk. Általában hasonló mennyiségű proton és neutron van egy adott magban, illetve nehéz elemek esetén valamivel több neutron: ez felel meg a rendszám és a tömegszám említett összefüggésének; ennek okait jelen fejezet későbbi szakaszaiban tárjuk majd fel.

Az elemek kémiai tulajdonságait az elektronszerkezet határozza meg, amit egyértelműen rögzít az elektronok száma, ezt pedig (semleges atom esetén) végső soron a protonok száma dönti el. A neutrons szám ilyen szempontból irreleváns, ezért egy elem kémiai jellemzőit a protonok száma határozza meg, és történetileg is eszerint kategorizálták az elemeket: egy elem rendszáma végső soron tehát az atommagban lévő protonok számát jelenti. Egy adott elem különböző neutrons számú változatait **izotópoknak** hívjuk: ezek kémiailag azonosak (eltekintve a különféle kémiai reakciók sebességének a kis tömegkülönbségből fakadó esetleges különbözőségétől, ami a gyakorlatban ritkán okoz jelentős effektust).

Az atommagok mérete és a neutronok felfedezése kapcsán érdemes megemlíteni, hogy az atommagoknak gyakran van egyfajta „neutronbőre”, azaz a protonok eloszlásának sugara (amely elektromágneses rugalmas szórási kísérletekben mérhető) és a neutronok magbéli eloszlásának sugara (mely pl. neutron- és/vagy protonszórási kísérletekkel mérhető) nem feltétlenül egyezik meg egymással. Például a ^{208}Pb ólomatommag esetén a Atomic Data and Nuclear Data Tables 99 (2013) 69 publikációban 5,5 fm töltéssugár adott (amely a protoneloszlás szélességét jelenti), míg a Phys. Rev. Lett. **126** [2021] 172502 publikációban 5,8 fm gyenge sugár szerepel (amely a későbbi 11.5.2.

szakaszban részletezett gyenge kölcsönhatásra való érzékenységgel kapcsolatos, és tulajdonképpen a neutronok eloszlásának szélességét jelenti). Mindez azt jelenti, hogy a 208-as ólomatommag „neutronbőre” 0,278 fm vastagságú. Az atommagok méretének ilyen értelemben vett vizsgálata ma is fontos kutatási terület. Érdekes tudni továbbá, hogy a proton mérete a müonos hidrogénatom Lamb-eltolódásának mérése alapján (Nature **466** [2010] 213) jelentősen eltér az elektronokkal történő mérés eredményétől.

Visszatérve az atommag szerkezetére, megállapíthatjuk, hogy a protonok elektromos taszításával szemben a neutronok is segítenek összetartani az atommagot. Hiányzik még természetesen az az erő, ami ezt megteszi: ezen összetartó erő a nukleonok között hat, és az elektromos kölcsönhatástól független új kölcsönhatás bevezetését tette szükségessé. A nukleonok között ható (vonzó)erőt magerőnek hívjuk.²⁸ Ez a magerő igen rövid hatótávolságú, szinte csak a szomszédos nukleonok között hat (ezt pl. a lentebbi 9.3. szakaszban részletezett *cseppmodell*, illetve *félempirikus kötésienergia-formula* sikerességéből lehetett leszűrni). A *kvantumtérelmélet* alapján a kölcsönhatásokat *közvetítő részecskék* kicserélésének kell tulajdonítanunk (pl. az elektromágneses kölcsönhatást eszerint a foton közvetíti). A foton tömegének nulla volta, ahogyan azt mindjárt megvilágítjuk, szorosan összefügg azzal, hogy az elektromágneses kölcsönhatás (a potenciál) $1/r$ módjára csökken, azaz nincs jellemző méretskála, ami felett nagyon gyorsan csökkenne: ezt szoktuk úgy mondani, hogy az elektromágneses kölcsönhatás „végtelen hatótávolságú”. A rövid hatótávolságú magerők leírásához viszont tömeggel rendelkező közvetítő részecskére van szükség.

Kvalitatíve ezt úgy fogalmazhatjuk meg, ha figyelembe vesszük, hogy egy m tömegű részecske kicserélése $\Delta E = mc^2$ energiabizonytalansággal jár (hiszen a kicserélt részecske kvázi „a semmiből” jön létre, majd el is tűnik). Ilyen létrejövés a határozatlansági reláció alapján

$$\Delta t = \frac{\hbar}{2\Delta E} \quad (9.10)$$

ideig lehetséges, és innen a hatótávolság nagyságrendje

$$\Delta x = c\Delta t = \frac{\hbar c}{2\Delta E} = \frac{\hbar c}{2mc^2}. \quad (9.11)$$

A magerő jellemző hatótávolsága kb. 1 fm: ehhez a mondottak alapján kb. 100 MeV/ c^2 tömegű részecske tartozhat. Eggyel pontosabb számítást, illetve megértést tesz lehetővé, ha a magerő potenciáljának meghatározását relativisztikusan invariáns hullámegyenlet segítségével kísérjük meg; Hideki Yukawa gondolatmenetét követve az ő Proc. Phys. Math. Soc. Jpn. **17** (1935) 48 cikke alapján némileg egyszerűsítve (tehát pl. az ún. izospin szerepét kihagyva).²⁹ Ismert, hogy a Coulomb-potenciál a

$$\Delta\Phi = 0 \quad (9.12)$$

Laplace-egyenlet megoldásából adódik (ahol Δ a Laplace-operátor). Ez egy nulla tömegű részecske cseréjét írja le: ezt úgy érthetjük meg, ha felidézünk, hogy időfüggő esetben

²⁸ A magerőt végső soron az erős kölcsönhatás, avagy a kvantum-színdinamika magyarázza meg, ahogy arra később röviden kitérünk.

²⁹ Yukawa volt az első japán Nobel-díjas: 1949-ben díjazták, éppen az itt tárgyalt kölcsönhatás mélyebb megértéséért.

az elektromágneses tér egyenlete

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - \Delta \psi = 0$$

hullámegyenlet (ebből adódik időfüggetlen esetben a Laplace-egyenlet), és ez, ha kvantummechanikai egyenletként tekintjük, felidézve, hogy az energiaoperátor $i\hbar\partial_t$ -nek felel meg, az impulzusoperátor pedig $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, akkor arra jutunk, hogy ez olyan részecskét írhat le, amire teljesül, hogy

$$\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{E^2}{c^2} - p^2 \right) = 0,$$

az energia és impulzus közötti ilyen összefüggés pedig valóban nulla tömegű részecskékre áll fenn. Ha egy m tömegű részecske cseréje valósul meg, akkor erre olyan egyenletet szeretnénk felírni, ahol igaz a relativisztikus $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ formula. Alakítsuk ezt tehát úgy a Φ potenciálra vonatkozó egyenletté az energiaoperátor $-i\hbar\partial_t$, illetve az impulzusoperátor $-i\hbar\nabla$ kifejezéseit beírva. Így az úgynevezett Klein–Gordon-egyenletet kapjuk:

$$-\hbar^2 \partial_t^2 \Phi = (m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta) \Phi, \quad (9.13)$$

amelynek időfüggetlen verziója a következő alakú:

$$\Delta \Phi = \frac{m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \Phi. \quad (9.14)$$

(Persze $m = 0$ esetben mindkét verzióban visszakapjuk az elektromágneses térre vonatkozó egyenleteket: a hullámegyenletet, illetve a Laplace-egyenletet.) Keressük ennek az időfüggetlen egyenletnek gömbszimmetrikus megoldásait, azaz keressük a megoldást $\Phi(r)$ alakban! Ekkor (a Laplace-operátor gömbi koordinátás felírását ismerve) az egyváltozós $\Phi(r)$ függvényre a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} = \frac{m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \Phi, \quad (9.15)$$

amiből az $u = r\Phi$ változót bevezetve arra jutunk, hogy

$$\partial_r^2 u = \frac{m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} u, \quad (9.16)$$

ennek pedig exponenciális függvények a megoldásai:

$$u \propto \exp \left(\pm \frac{m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} r \right). \quad (9.17)$$

Ezek közül csak a végtelenben eltűnő (negatív előjeles) megoldás lehet releváns fizikailag (egy erőter potenciáljának menetére gondolva); a potenciál alakja ezzel tehát így adódik:

$$\Psi = \frac{u}{r} = g^2 \frac{e^{-r/b}}{r}, \quad (9.18)$$

ahol bevezettük a $b = \hbar c/mc^2$ jelölést, a g pedig a kölcsönhatás erősségét adja meg. A kölcsönhatás hatótávolságát az exponenciális lecsengés b paramétere határozza meg, amely (egy kettes szorzó erejéig) megfelel a határozatlansági reláción alapuló érvelésből fentebb kapott értéknek.

A magerőt közvetítő részecske, mint később kiderült, a *pion* nevű részecske: a magerőt tehát pioncsere valósítja meg.³⁰ A pion tömege kb. $140 \text{ MeV}/c^2$ értékűnek bizonyul: ebből tehát $1,4 \text{ fm}$ hatótávolság adódik az így leírt magerőre.

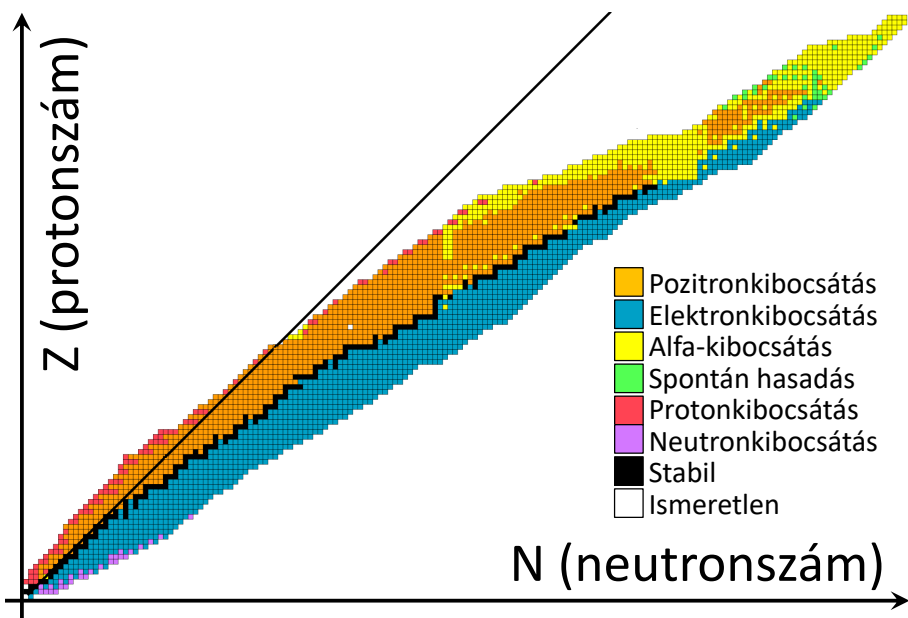
9.2. Atommagbomlások és kötési energia

Az előző szakaszban említettük, hogy az egyes elemek különféle izotópjai lehetségesek, amelyek csak a neutronszámban különböznek. Ezeket általában ${}^A X$ vagy ${}^A_Z X$ módon jelöljük, ahol X az elem típusa (vegyjele), A pedig a tömegszám (és esetleg kiírjuk a Z rendszámot is, amelyet azonban az elem típusa, illetve vegyjele már meghatároz). A tömegszám a protonszám és a neutronsám összege. A legtöbb izotóp energetikailag nem stabil, azaz valamilyen átalakulás nyomán – többnyire valamilyen részecske kibocsátásán keresztül – energiacsökkenés jöhet létre. Ezen átalakulás nyomán keletkező kibocsátott részecskékből álló sugárzást hívjuk radioaktív sugárzásnak, a megfelelő atommag-átalakulásokat pedig (radioaktív) bomlásnak. Minden lehetséges bomlástípushoz valamilyen felezési idő tartozik (ennek kvantummechanikai tárgyalásával kapcsolatban lásd a 6.8. szakaszt). Egy izotóp akkor biztosan stabil, ha a lehetséges átalakulásai nem járnának energia felszabadulásával.³¹ Többnyire egy adott rendszámú elem lehetséges izotópjai közül kevés a stabil: egyes elemek esetén kizárólag egy vagy éppen nulla ilyen van. Például az arany csak a 197-es tömegszámú ${}^{197}\text{Au}$ izotópjja stabil, fluor esetén pedig csak a ${}^{19}\text{F}$ stabil, de például szénből a 12-es és a 13-as tömegszámú is. Érdekes, hogy az ólomnak négy izotópjja is stabil: a 204-es, 206-os, 207-es és 208-as tömegszámú – ennek okára később visszatérünk. Fontos tudni azt is, hogy a tóriumnak és az uránnak (sőt, általában az uránnál nagyobb rendszámú elemeknek) mindegyik izotópjja jól megfigyelhetően radioaktív, de vannak közöttük olyan nagy (több százmillió vagy milliárd éves) felezési idejük is, amelyek emiatt még bőven megtalálhatóak a Földön. Vannak olyan elemek is, amelyeknek legfeljebb millió éves a felezési idejük: ilyenek vagy nem fordulnak elő a Földön (mert ha valaha jelen voltak is, mára elbomlottak), vagy úgy fordulnak elő, hogy valamilyen más elem radioaktív bomlásában keletkeznek (de „egyből” tovább is bomlanak). Például az asztácium leghosszabb élettartamú izotópjának felezési ideje 8 óra. Hogy az elemek és izotópjaik hogyan és mikor keletkeztek, arra a 10.5. szakaszban térünk vissza.

Egy instabil izotóp bomlása során a mag kibocsáthat például γ -fotont (ez a γ -bomlás, ekkor a mag összetétele nem változik, csak a belső elrendezése, azaz: ener-

³⁰ Valójában másfajta mezonok cseréje is szerepet játszik; a mezonokat bővebben a későbbi részecskefizikai szakaszokban tárgyaljuk. Ezen további mezoncserék figyelembevételével a magerők helyfüggése (sőt: a szereplő részecskék spinjétől való függése) is bonyolultabbá válik; ennek valóban vannak magfizikai következményei is.

³¹ Mondhatjuk azt is (kísérleti oldalról közelítve), hogy egy izotóp (azaz egy atommag) akkor stabil, ha nem figyelhető meg bomlása. Sok (ilyen értelemben korábban stabilnak hitt) atommagról derült ki, hogy bizonyos – energiafelszabadulás szempontjából kedvező – bomlásaik tényleg végbemennek, esetleg rendkívül hosszú felezési idővel. Ma óvatosan fogalmazva „kísérletileg (vagy: megfigyelés szerint) stabilnak” mondunk egy atommagot, ha nem figyelték még meg, hogy elbomlana, de tudjuk, hogy lehetne energetikailag kedvező bomlási módja. Ilyen pl. $A = 60$ és $A = 200$ tömegszámok között szinte mindegyik atommag, α -bomlásra nézve.



42. ábra. Az izotópok térképe. A legjellemzőbb bomlást a szín mutatja, középen feketével látszik a „stabilitás völgye”.

giaszintje), elektront vagy pozitront (ez a β^- , illetve β^+ -bomlás, ekkor egy neutron protonná alakul, illetve fordítva), α -részecskét (4-es tömegszámú héliumatommagot, ez az α -bomlás, amely jellemzően a nagy atommagoknál fordul elő), néha egyesével neutron vagy protont is. Ezeket (az A tömegszámú Z rendszámú mag A_ZX jelölésével) az alábbiakban foglalhatjuk össze:

$$\gamma\text{-bomlás : } {}^A_ZX \rightarrow {}^A_ZX + \gamma, \quad (9.19)$$

$$\beta^-\text{-bomlás : } {}^A_ZX \rightarrow {}^A_{Z+1}X + e^- + \bar{\nu}_e, \quad (9.20)$$

$$\beta^+\text{-bomlás : } {}^A_ZX \rightarrow {}^A_{Z-1}X + e^+ + \nu_e, \quad (9.21)$$

$$\alpha\text{-bomlás : } {}^A_ZX \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}X + \alpha, \quad (9.22)$$

$$p\text{-bomlás : } {}^A_ZX \rightarrow {}^{A-1}_{Z-1}X + p, \quad (9.23)$$

$$n\text{-bomlás : } {}^A_ZX \rightarrow {}^{A-1}_ZX + n. \quad (9.24)$$

Feltüntetjük a β -bomlásokban keletkező *neutrínókat* (ν_e , illetve $\bar{\nu}_e$) is, ezekre visszatérünk a későbbi részecskefizikai szakaszokban. A β -bomlásokhoz tartozik az elektronbefogás lehetősége is: ekkor a proton neutronná alakulása nem pozitron kibocsátásával, hanem az atomhéj egy elektronjának befogásával történik; ekkor egyedül a neutrínó repül ki (illetve ha – mint az sok esetben a helyzet – a létrejövő új atommag gerjesztett állapotban keletkezik, az ilyen bomlást legerjesztődés és γ -sugárzás kibocsátása követi; ez nagyon sok α -, illetve β -bomlás esetén is igaz).

Egyes izotópok esetében a fentiekén túl a spontán hasadás is előfordul, ahol a mag tulajdonképpen szétesik, de ez csak igen-igen nagy magokra válik jelentőssé. Bizonyos

rendszám (120-130) fölötti magok pedig egyáltalán nem létezhetnek: ha létre is tudnánk mesterségesen hozni ilyeneket, azok „egyből” maguktól elhasadnának. (Az extrém kis felezési idő és az „egyből” elhasadás lehetősége között nem is igazán húzható éles fogalmi határ: nagyon rövid felezési idejű atommagokat más magok ütköztetésével lehet létrehozni, és hogy létrejön-e ilyen közbülső mag, végső soron azon múlik, hogy mondhatjuk-e, hogy az ütköztetésben megfigyelt hatáskeresztmetszet mutat-e nemmonoton viselkedést a megfelelő tömegnél.)

Elvileg kis izotópok egyesülése is energetikailag kedvező lehetne, de spontán fúzió nem létezik (azaz egymás mellett „álló” atommagok nem egyesülnek): ennek okait a következőkben tárgyaljuk. Az ismert (már létrehozott) izotópokat és legvalószínűbb bomlásaikat a 42. ábra mutatja. Kérdés marad, hogy miért nem egyformán kedvező minden állapot, azaz mi az atommagok energetikájának alapja, ami a lehetséges bomlásokat „vezérli”.

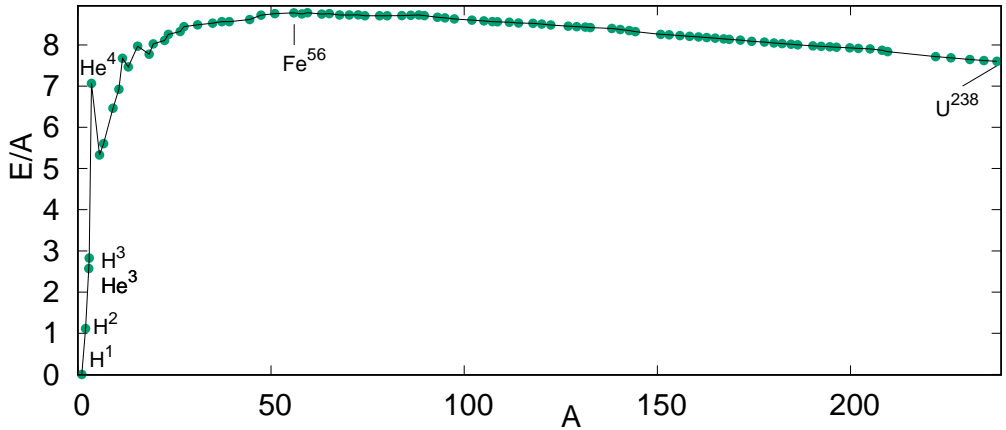
A proton és a neutron tömegének ismeretében kiderült, hogy az atomok észrevehetően **könnyebbek**, mint a megfelelő számú proton és neutron össztömege. Ennek az az oka, hogy az atommagoknak van egyfajta „**kötési energiája**”, így ők ennek az energiának megfelelő tömeggel könnyebbek, mint az alkotórészeik.³² Az atommag kötési energiáját tulajdonképpen az előző szakaszban bevezetett magerő potenciálja okozza; a konkrét értékét pedig így definiálhatjuk:

$$E = ZM_p c^2 + (A - Z)M_n c^2 - M_{\text{mag}}. \quad (9.25)$$

Általában az egy nukleonra jutó kötési energiát, azaz az E/A értéket szoktuk felrajzolni a tömegszám függvényében, ahogy a 43. ábrán is látható. A nukleononkénti kötési energia értéke a legkisebb magoktól eltekintve kb. 7 és 9 MeV között mozog, és 56-60-as tömegszámánál van maximuma. A négy legkötöttebb mag a ^{62}Ni , ^{58}Fe , ^{56}Fe és a ^{60}Ni , ezek adják tehát az energetikailag legkedvezőbb állapotokat. Az abszolút maximális nukleononkénti kötési energiával a ^{62}Ni rendelkezik (8,795 MeV), viszont még a nikkelizotópok között is csak a harmadik leggyakoribb variáns ez, 3,6%-os gyakorisággal: létrejött a 60-as és 62-es izotópokhoz képest kevésbé valószínű. Az egy nukleonra jutó tömeg a ^{56}Fe atommagban a legkisebb (konkrétan $930,412 \text{ MeV}/c^2$, míg a kötési energia itt 8,792 MeV), a két említett „rekordatommag” különbözőségének oka az eltérő relatív protonszám. A mondott izotópoknál nagyobb tömegszámok esetén már a tömegszám növekedésével (nagyon lassan) csökkenni kezd a nukleononkénti kötési energia, alapvetően a protonok taszítása miatt: azaz sok közel lévő proton pozitív elektrosztatikus potenciális energiát jelent, ami csökkenti a kötési energiát.

Nem optimális (de egyébként akár stabil) állapotból hasadással vagy fúzióval lehet kedvezőbb állapotba jutni (stabil izotópok esetén valamilyen katalizáció hatására). A vasnál nehezebb magok hasadni tudnak, a könnyebbek fuzionálni, hiszen ekkor a nukleonokra jutó kötési energia csökken, míg a nukleonok száma nem változik. A hasadás,

³² Az $E = mc^2$ megfeleltetés alapján persze egy kémiai kötésben lévő molekula, pl. egy H_2O vízmolekula is (a molekula kötési energiájának megfelelő tömeggel) könnyebb, mint az őt alkotó szabad atomok (példánkban: két hidrogénatom és egy oxigénatom) tömegeinek összege. Ez azonban – ismerve a kémiai reakciók tipikus energiáit – legtöbbször szempontról elhanyagolható tömegkülönbséget jelent; az atommagok kötési energiái viszont – mint látni fogjuk – a nyugalmi energiájuknak már nem elhanyagolható (egyes esetekben a néhány eV-érték is elérő) részei.



43. ábra. A nukleononkénti kötési energia MeV egységekben kifejezve, a tömegszám függvényében, adott tömegszámnál a legstabilabb elemet ábrázolva (kivéve $A = 3$ esetét, ahol a hidrogén és a hélium is szerepel az ábrán)

illetve a fúzió energiamérlege ugyanis (az $\epsilon(A) = -E(A)/A$ jelölést bevezetve):

$$(A_1 + A_2) \cdot \epsilon(A_1 + A_2) = A_1 \cdot \epsilon(A_1) + A_2 \cdot \epsilon(A_2) + \Delta E \quad (\text{hasadás}), \quad (9.26)$$

$$A_1 \cdot \epsilon(A_1) + A_2 \cdot \epsilon(A_2) = (A_1 + A_2) \cdot \epsilon(A_1 + A_2) + \Delta E \quad (\text{fúzió}), \quad (9.27)$$

ahol $A \rightarrow A_1 + A_2$ hasadás vagy $A_1 + A_2 \rightarrow A$ fúzió következik be, és ΔE energia szabadul fel. Ezek az energiamérlegek tehát akkor mutatnak $\Delta E > 0$ energiazabadozást, ha hasadás esetén

$$\epsilon(A_1 + A_2) > \epsilon(A_{1,2}), \quad (9.28)$$

fúzió esetén pedig

$$\epsilon(A_{1,2}) > \epsilon(A_1 + A_2) \quad (9.29)$$

teljesül. Ezek a feltételek azt jelentik, hogy a reakció után létrejött mag(ok) nukleononkénti kötési energiái nagyobbak, mint az eredeti mag(ok)hoz tartozó érték.

Gyakorlófeladat

Számítsuk ki a ${}^{62}\text{Ni}$ ($Z = 28$, tömege 61,928 u) és az ${}^{56}\text{Fe}$ ($Z = 26$, tömege 55,935 u) egy nukleonra jutó kötési energiáját, illetve az egy nukleonra jutó tömeget is. Itt 'u' az atomi tömegegységet jelöli, amely a megállapodás szerint a ${}^{12}\text{C}$ atom tömegének 1/12-ed része, értéke $931,494 \text{ MeV}/c^2$.

9.3. A cseppmodell és a félempirikus formula

A fentiekben láttuk, hogy a magok kötési energiája nem triviálisan függ a neutronszámtól és a protonszámtól. Mégis létezik egy egyszerű modell, amely relatíve jól működik.

Ezt George Gamow javasolta a Proc. R. Soc. Lond. **A126** (1930) 632 publikációjában, még a neutron felfedezése előtt. Eszerint a mag anyagát egy elektromosan töltött, összenyomhatatlan folyadék alkotja. Ez alapján alkotta meg Zeitschrift für Physik **96** (1935) 431 publikációjában Weizsäcker a kötési energiára vonatkozó **félempirikus kötésienergia-formulát** (mely azóta az ő nevét is viseli). Mivel ez egyúttal a magok tömegét is megadja (ha ezzel korrigáljuk a nukleonokból származó „nyers” tömeget), ezért ezt félempirikus tömegformulának is szokás hívni.

A modell és a formula alapja az, hogy a mag anyaga összenyomhatatlan, ugyanis a nukleonok között nagyon kis távolságokon erősen taszító potenciál lép fel, a távoli nukleonok között viszont alig van kölcsönhatás (a van der Waals-kölcsönhatáshoz hasonlóan). A cseppmodell arra a megfigyelésre támaszkodik tehát, hogy a maganyag sűrűsége nagyjából állandó (mintha a nukleonok egymást érintő tömör golyókból állnának): a megfigyelt magsugárra vonatkozó

$$R = R_0 \cdot A^{1/3} \quad (9.30)$$

formula ugyanis azt mondja, hogy a mag térfogata $V = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi R_0^3 \cdot A$, vagyis arányos a nukleonok számával: tényleg állandó sűrűségről (azaz mintegy összenyomhatatlan maganyagról) beszélhetünk. A sűrűsége ebből a számolásból nagyságrendileg 10^{17} kg/m³ érték adódik.

A teljes kötési energiára vonatkozó (a megfigyelt értékeket igen jól leíró) formula pedig a következőképpen írható le:

$$E(A) = a_V A - a_S A^{2/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_A \frac{(A - 2Z)^2}{A} + \delta a_P \frac{1}{A^{1/2}}. \quad (9.31)$$

Ebben a következő tagok és együtthatók szerepelnek (az együtthatók értékeit alább adjuk meg):

- a_V : ez adja az ún. térfogati tagot. Ez lényegében a magerő kis hatótávolsága miatt csak a szomszédos nukleonok kölcsönhatásából adódik, feltéve, hogy minden nukleonnak minden irányban van szomszédja. Ha a magerő nagyobb hatótávolságú lenne, akkor ez a tag az A -val arányos helyett más módon skálázódna a tömegszámmal: ha pl. a vonzó magerő hatótávolsága áthatná az egész magot, akkor mindegyik nukleon mindegyikkel kölcsönhatna, így a nukleonpárok számából adódóan $A(A - 1)$ szorzó jelenne meg ebben. Az tehát, hogy ez a tag A -val arányos, bizonyítéknak tekinthető arra, hogy minden nukleon csak a szomszédjaival lép kölcsönhatásba.
- a_S : ez az ún. felületi tag szorzója, amelyre azért van szükség, mert a felületen lévő nukleonoknak nincs minden irányba szomszédja. Tulajdonképpen ez a maganyag felületi feszültségét adja meg, és a tag alakjának (A -függésének) oka az, hogy az A -val arányos térfogathoz $A^{2/3}$ -nal arányos felszín tartozik.
- a_C : ez az ún. Coulomb-tagot határozza meg, amely a protonok taszítása miatti potenciális energiát veszi figyelembe. A tag egy egyenletesen töltött gömb elektrosztatikus energiájának (mely $3\hbar c \alpha Q^2 / 5R$ értékű) megfelelően adódik; ha a Q^2 faktornak megfelelően egy $e^2 Z^2$ tényezőt veszünk figyelembe, a sugárra pedig az $R_0 A^{1/3}$ kifejezést, akkor $a_C = 3\hbar c \alpha / 5R_0$ adódik, és $R_0 = 1,25$ fm behelyettesítésével egy 0,7 MeV körüli értéket kapunk az együttható értékére, ami a megfigyeléseket egészen jól leíró érték (lásd alább is, az együtthatók konkrét értékeinél).

Megemlítendő továbbá, hogy alapvetően ez a tag felel számos magfizikai folyamatért és jelenségért: ezért lesz a nehezebb atommagok kötési energiája kisebb, vagyis innen származtatható a maghasadás és az α -bomlás lehetősége is.

- a_A : ez adja az ún. aszimmetriatagot, amely a protonszám és a neutronszám eltéréseiből adódik. Ennek oka lényegében a Pauli-elv, illetve az, hogy az alapján azonos mennyiségű protont és neutronot alacsonyabb energiaszinteken lehet elhelyezni, mint ha az egyikből sok lenne, ugyanis (feles spinű, fermion) részecskék tökéletesen azonos állapotban nem lehetnek egynél többen. Sok azonos típusú nukleonból (azaz protonból vagy neutronból) az „utolsó” mind nagyobb energiaszintre kellene hogy kerüljenek: adott A esetén „megéri” tehát, ha inkább fele-fele arányban protonok és neutronok vannak (amelyek különböznek, így az alsóbb energiaszinteket többen is betölthetik), mintha pl. csak protonok vagy csak neutronok lennének. A konkrét $(A - 2Z)^2/A$ kifejezést az úgynevezett Fermi-energiából lehet levezetni, amely lényegében a legmagasabb betöltött energiaszintet jelenti (pontosabban ennek és a legalacsonyabb energiaszintnek a különbségét). Egy ilyen számolásban konkrétan $Z^{5/3}$ és $(A - Z)^{5/3}$ tagok jelennek meg, amelyet aztán $A - 2Z$ szerint sorba lehet fejteni. Ekkor a nulladrendű tag A -val lesz arányos, és így a térfogati taghoz járul hozzá; a következő pedig a másodrendű tag, ezt adja meg a formula aszimmetriatagját.
- δa_P : ez az ún. párkölcsönhatási tag, amely páros A és páros Z esetén (amikor tehát mind a neutronszám, mind a protonszám páros) $+a_P$, páros A és páratlan Z esetén (amikor tehát mind a protonszám, mind a neutronszám páratlan) $-a_P$, míg páratlan A esetén (azaz amikor egyik nukleon száma páros, másiké páratlan) 0. Ennek a tagnak az eredete az, hogy a nukleonok párokban energetikailag kedvezőbb állapotban vannak, ugyanis ekkor lehetséges a páronként egymást kioltó, összesen nulla spinű állapot. Ez a tag egyfajta fluktuációt hoz létre (illetve megmagyarázza, leírja a megfigyelt fluktuációt) a kötési energia egyébként monoton A - és Z -függésű menetében: a páratlan proton-, illetve neutronszámú izotópoknak kisebb, a páros proton-, illetve neutronszámúaknak nagyobb kötési energiát adva. Hozzáfűzzük itt, hogy ezt a tagok egyes publikációkban $A^{-3/4}$ szorzóval adják meg (a fent szereplő $A^{-1/2}$ helyett), ekkor természetesen az együttható is más értéket vesz fel.

A fenti együtthatókra az 1. táblázatban látható értékek adhatóak meg. Fontos kiegészíteni a fentieket azzal, hogy a (9.31) formula utolsó két tagját az egyszerű cseppmodell nem igazán tudja megmagyarázni: ezeket empirikusan (tapasztalati úton) kellett hozzáadni a formulához, ahogy láttuk, nem a szigorúan vett cseppmodellre támaszkodó, hanem másfajta indoklásokat hozzáfűzve.

Érdemes megfigyelni, hogy rögzített A esetén a (9.31) formula (a párosságokat figyelembe vevő a_P -s tag nélkül) kvadratikusan Z -ben, a maximumhelye pedig az adott tömegszámú izotópok közül a legstabilabbat (vagy a leghosszabb élettartamúakat) je-

lőli ki azáltal, hogy adott A -hoz kiválaszja a legoptimálisabb Z -t:

$$\frac{\partial E}{\partial Z} = 0, \text{ innen} \quad (9.32)$$

$$a_C \frac{2Z}{A^{1/3}} = a_A \frac{4(A - 2Z)}{A}, \text{ azaz} \quad (9.33)$$

$$Z = \frac{A}{2} \frac{1}{1 + \frac{a_C}{4a_A} A^{2/3}}. \quad (9.34)$$

Jellemzően adott A esetén az ezen minimumhelynek megfelelő izotóp (A -t nem változtató, de protonokat neutronokba vagy fordítva átalakító) β -bomlásokkal ki is tudna alakulni; a párkölcsönhatás valamelyest módosíthatja a helyzetet. Látjuk az iménti képletből (figyelembe véve az $a_C/4a_A$ aránynak a lentebbi táblázatból leolvasható $\approx 0,007$ értékét) hogy kis A -kra a legoptimálisabb Z valóban a tömegszám fele (ez lényegében tehát az aszimmetriatag alakjából adódik), nagyobb A -kra pedig ennél valamivel kisebb érték (amikor már megjelenik a Coulomb-tag hatása). Mondhatjuk tehát, hogy a „stabilitási völgy” fentebbi 42. ábrán is látható alakját (az izotóptérképen a legstabilabb magok elhelyezkedését, azaz az így összetartozó proton- és neutrons szám összefüggését) a Pauli-elvnek (azaz az aszimmetriatagnak) és a protonok taszításának (azaz a Coulomb-tagnak) az összjátéka határozza meg. Coulomb-taszítás nélkül egységesen $Z = A/2$ lenne a legkedvezőbb; a Coulomb-kölcsönhatás valamelyest elgörbíti a stabilitási völgy alakját. Ennek következményei: nehéz atommag hasadásakor a hasadási termékek jellemzően túl neutrondúsak: sorozatos β^- -bomlással (de szinte sosem β^+ -bomlással) bomolva válnak végül stabilá; illetve innen ered az is, hogy maghasadásban jellemzően néhány „fölösleges” neutron kiszabadul, lehetővé téve ezzel a maghasadási láncreakciót.

Mindezeket figyelembe véve összességében a cseppmodell és a félempirikus kötésienergia-formula nagyon sikeres: több száz atommag tömegét leírja lényegében 5 paraméter segítségével. Bizonyos speciális proton- és neutrons számok (20, 28, 50, 82, 126) tartományát kivéve igen pontos a formula: a mért értékektől való eltérése 50 keV-nél is kisebb, de szinte mindenhol kisebb 150 keV-nél, ami a GeV nagyságrendű kötési energiákhoz képest igen kis eltérés.

Formula tagja	rövidítés	1. érték	2. érték
térfogati tag	a_V	14,9297 MeV	14,6433 MeV
felületi tag	a_S	15,058 MeV	14,0788 MeV
Coulomb-tag	a_C	0,6615 MeV	0,6442 MeV
aszimmetriatag	a_A	21,6091 MeV	21,068 MeV
párikölcsönhatási tag	a_P	10,1744 MeV	11,5398 MeV

1. táblázat. A félempirikus kötésienergia-formula paramétereinek értéke a Nucl. Sci. Tech. **31** (2020) 9 publikáció alapján. Az első értékeket 2497 ismert mag adatai alapján határozták meg. Ezekkel jellemzően pár ezreléknél pontosabban megadható az elemek kötési energiája. A második értékek akkor adódnak, ha csak 2166 $A \geq 50$ izotóp adatait vesszük figyelembe, ekkor viszont ezek még az előzőeknél pontosabb eredményt is adnak (ezekre a nagyobb magokra).

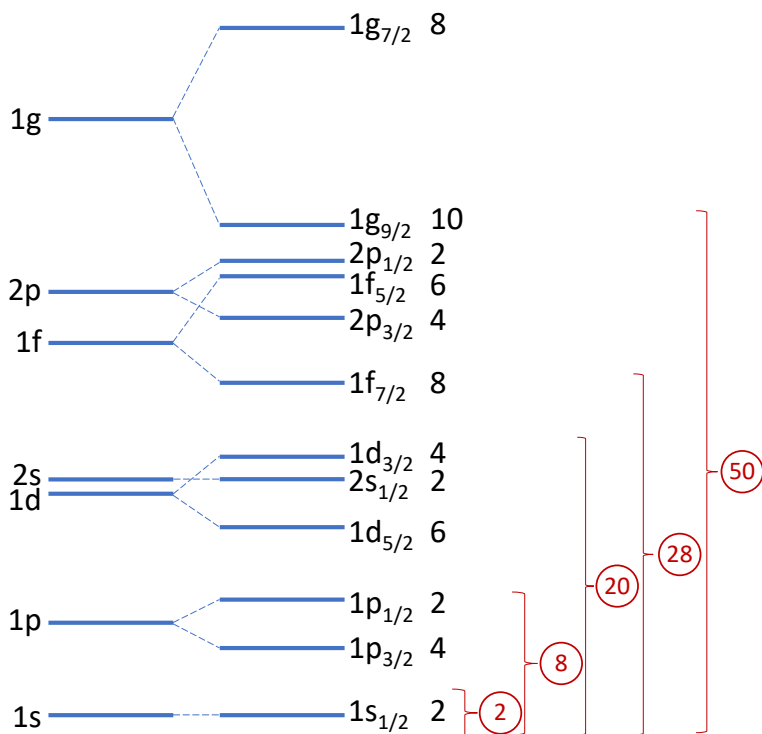
Gyakorlófeladat

A bróm 79-es izotópjának ($N = 44$) tömege 78,918 atomi tömegegység (ez az elektronok tömegét is tartalmazza). Mennyi a kötési energiája eszerint, és hogy viszonyul ez a félempirikus energiaformula alapján adottakhoz? Számítsuk ki ugyanezt a lutécium 175-ös izotópjára is ($N = 104$), amelynek tömege 174,941 atomi tömegegység.

9.4. Az atommagok héjmodellje

Ahogy a fentiekben említettük, bizonyos proton- és neutronszámok esetén a félempirikus kötési formula pontatlansága nagyobb, illetve ugyanezen számok mellett (különösen $Z = 2, 8, 20, 50$ esetén) igen sok stabil izotóp található. Ezeket (a 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 számokat) **mágikus számoknak** nevezzük. Ezeknél azt figyelhetjük meg, hogy a kötési energia kiugróan nagy: mintha lezárt „nukleonhéjak” jeleznének meg itt. Ezek az atommagok gömbszimmetrikusak is jellemzően (kvadrupólmomentumuk közel nulla). Ez alapján alakították ki az atommagok héjmodelljét, Wigner Jenő, Maria Goeppert-Mayer és Hans Jensen munkája nyomán. Goeppert-Mayer és Jensen erről írt Phys. Rev. **75** (1949) 1766 és Phys. Rev. **75** (1949) 1969 publikációi két hét különbséggel jelentek meg – ők ketten kimondottan mindezért kaptak Nobel-díjat 1963-ban (Wigner Jenő inkább a szimmetriaelvekkel kapcsolatos kutatásaiért).

Hasonlóan a 8.6. szakaszban említettekhez, a nukleonok is héjakba rendeződnek: külön a protonok és külön a neutronok. Mivel ők is feles spinűek, ezért ezen héjak az elektronhéjakhoz hasonló betölthetőségűek lesznek. Itt azonban nincs egy központi potenciál, hanem a többi nukleon okozta (első közelítésben gömbszimmetrikus) „átlagtér” hozza létre a potenciált, és ebben alakulnak ki az energiaszintek és a nekik megfelelő héjak. A perdületre itt ugyanolyan kvantumszámok alakulnak ki, mint elektronok esetében, hiszen ezek a perdületoperátor sajátállapotai, továbbá minden nukleon esetében van saját- és pályaperdület is. Ugyanakkor a mágikus számok különböznek az elektronszerkezet esetén adódik telített héjaknak megfelelő számoktól (a 8.6. szakaszban írottak alapján elektronokra 2 és 8 után 18 majd 32 következnek). Ennek oka az, hogy itt a potenciál alakja eltér az atomhéjban szerepet kapó potenciáltól (mely lényegében a mag Coulomb-tere): az atommagban megvalósuló átlagtérben megvalósuló diszkrét energia-sajátállapotokhoz is található egy megfelelő n kvantumszám, de ez itt nem olyan „főkvantumszám”, mint a héjban volt: pl. a perdületet leíró kvantumszámot nem limitálja az energiát leíró kvantumszám. Ezen különbségek oka tehát az eltérő potenciál. Így olyan állapotok is lehetségesek, mint $1p$ vagy $2f$ (ilyenkor a betű előtt álló szám egy olyan kvantumszámot jelent, ami a perdület-kvantumszámmal együtt már meghatározza az energiát, de mint mondtuk, nem ugyanazon a módon, mint a héjbeli elektronállapotok esetében). Ezen energiaszintek sorrendjét a 44. ábra mutatja. Az egyes állapotokat nl_j módon jelöljük, de még egyszer: n itt nem limitálja l értékét, hanem egyszerűen azt jelöli, hogy az állapot hányadik az adott l -lel rendelkező állapotok közül (energia szerinti sorrendben). A j kvantumszám itt is $l \pm 1/2$ lehet, és ehhez is tartozik „mágneses” kvantumszám, amely $+j$ és $-j$ között fut. Emiatt adott j -hez $2j+1$ lehetséges állapot tartozik (és mivel itt j félegész, ez páros szám lesz). A teljes héjakat a 44. ábrán a függőleges irányban (energia szerint) megjelenő nagyobb szünetek jelölik.



44. ábra. A nukleonok energiaszintjei a héjmodell szerint. A második oszlop a j szerinti felhasadást mutatja, a harmadik az adott j mellett lehetséges állapotok számát, míg pirossal az adott állapotig összesen adódó állapotok számát adja meg.

Egy atommag perdületét leginkább a külső, nyitott héjon megjelenő nukleonok okozzák. Adott j esetében teljes héjakon a teljes perdület nulla, hiszen itt $+j$ és $-j$ között minden lehetséges eset előfordul. Ezenkívül a páros nukleont tartalmazó héjak perdülete is nulla, ez a legkedvezőbb állapot. Vegyük például a szén-13 izotópot. Ebben 6 proton és 7 neutron van. A 44. ábra alapján ekkor az $1s$ pálya és az $1p_{3/2}$ is „tele van”, és van egy neutron az $1p_{1/2}$ pályán. A mag spinje tehát $1/2$ -nek adódik; valóban ez a kísérleti megfigyelés is.

A magfizikában fontos továbbá a mag paritása is. Ez a P paritásoperátoron alapul, amely tulajdonképpen a tértükrözés operátora: $P\Psi(x) = \Psi(-x)$. Mivel $P^2 = id$, ezért ± 1 lehetnek a sajátértékei. A perdületoperátor sajátállapotai mind paritás-sajátállapotok, és páros l esetén a paritás $+1$, míg páratlan l esetén a paritás -1 . (Ez az impulzusmomentum-sajátállapotokat leíró hullámfüggvényeknek, azaz az Y_{lm} gömbfüggvényeknek tükrözésekre mutatott szimmetriájából szűrhető le.) Az egyes nukleonok paritása is ezt követi, és az összesített paritás szorzódik, hiszen ez tulajdonképpen egy $(-1)^l$ faktort jelent a hullámfüggvényben. A mag paritását tehát az „utolsó” avagy „páratlan” nukleon határozza meg. Amennyiben ez a nukleon s, d, g pályán van, akkor a paritás $+1$, míg p, f pályákon -1 . (Érdeemes megemlíteni, hogy spinorok paritása kicsit bonyolultabb kérdéskör, de ezt itt most nem tárgyaljuk.)

A magok mágneses (dipól-)momentumát is számíthatjuk úgy, hogy az utolsó, pá-

ratlan nukleont vesszük csak figyelembe. Ezt magfizikában Schmidt-modellnek nevezik. Ekkor a 7.5. szakaszban tárgyaltakhoz hasonlóan a mágneses momentum

$$\mu = \mu_N \cdot (g_s s + g_l l), \quad (9.35)$$

ahol s a spin, l pedig a perdület kvantumszáma; és a korábban említetteknek megfelelően protonra $g_s \approx 5,59$ és $g_l = 1$, míg neutronra $g_s \approx -3,83$ és $g_l = 0$. (A proton $g_l = 1$ értéke a töltés pályamomentumának és mágneses momentumának kapcsolata, a neutron $g_l = 0$ értéke megfelel annak, hogy ő semleges részecske.) A magok mágneses (dipól)momentumán alapszik a mágneses magrezonancia (NMR) jelensége – bizonyos anyagok jelenlétét észlelhetjük mágneses térben, a (a $hf = \mu B$ egyenletet kielégítő) frekvenciájú elektromágneses tér elnyelésén keresztül.

Megemlítjük még, hogy a cseppmodellel összhangban egyes magok alakja nem tökéletesen gömb alakú: vannak szivar-, illetve diszkoszformájú magok is (előbbi esetben a forgásszimmetria tengelye mentén hosszabb a mag, utóbbi esetben pedig a szimmetria-tengely mentén rövidebb). Ekkor a magoknak mágneses kvadrupólmomentuma is lesz (ez egy szimmetrikus és nulla nyomú 3×3 -as mátrix, amelynek független elemei a töltésselosztás Y_{m2} gömfüggvényekkel vett integráljának felelnek meg). Ezt használja ki a kvadrupólus magrezonancián alapuló magspektroszkópia (NQR).

A nagy magoknak a fentiekén túl kollektív gerjesztései is vannak, amelyekben a teljes atommag „anyaga” gerjesztődik, forgás vagy rezgés formájában. A rezgések közül igen fontos az óriás dipólrezonancia (GDR). Forgási gerjesztések is léteznek, ezek energiáját az $E = L^2/2\Theta$ formula alapján lehet meghatározni, ahol L a mag perdülete és Θ a mag tehetetlenségi nyomatéka. Ha a perdületet és a hozzá tartozó gerjesztési energiát is ismerjük, akkor meghatározható a mag tehetetlenségi nyomatéka, illetve ebből a deformációja. Ilyen gerjesztések során igen nagy perdületek is elérhetőek, és ezen gerjesztett magok alakja igen deformált is lehet. A szuperdeformált magállapotok tengelyeinek aránya 2:1, a hiperdeformáltaké 3:1 körül van, ezeknek igen nagy perdülete is lehetséges. Ezeket a cseppmodell és a héjmodell egyfajta kombinációjával lehet leírni, és jelenleg is kutatások tárgyát képezik.

Gyakorlófeladat

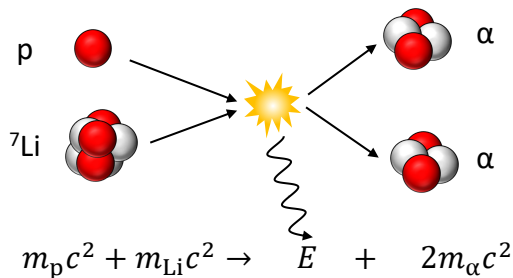
A szövegben írtakhoz hasonlóan határozzuk meg a ^{31}P és a ^{67}Zn magok spinjét és paritását is. Előbbiben 15 proton és 16 neutron van, tehát egyedül a 2s pályán lévő proton számít. Utóbbiban 30 proton és 37 neutron van, tehát a $1f_{5/2}$ pályán maradt egy neutron, a mag spinje tehát $5/2$, paritása $+1$ (hiszen az f pálya $l = 4$ -et jelent). Ugyanígy adjuk meg a ^{43}Sc és a ^{33}S magok spinjét és paritását is, illetve ezek mágneses momentumát is (a $g_{s,p} \approx 5,59$, $g_{l,p} = 1$, $g_{s,n} \approx -3,83$ és $g_{l,n} = 0$ giromágneses együtthatókat felhasználva).

10. A magfizika alkalmazásai

10.1. A maghasadás felfedezése

Ahogy a 9.2. szakaszban említettük, a nehezebb atommagok széteshetnek két kisebbre, mivel ez energianyereséggel járna a kötési energia tömegszámfüggése alapján. Ugyanakkor **spontán maghasadás** csak **nagyon ritkán** következik be (lásd a 42. ábrát), mivel az atom először jelentősen aszimmetrikussá kell hogy váljon – ehhez (az atommagot a 9.3. szakaszban leírt cseppmodell alapján elképzelve, azaz mintegy folyadék-cseppként gondolva rá) a magnak először meg kell nyúlnia, két csepre kell szétesnie. Ez a felülettel arányos felületi energia miatt ideiglenesen nagy energiabefektetést igényel. Ez magától tehát nehezen történik meg, de az ehhez szükséges energiát valamilyen bombázórészecskével „kölcson lehet adni” a magnak. Protonokat könnyű gyorsítani, de nem ideális hasítók, mert az elektromos taszítás megnehezíti a magba jutásukat. Neutronyalábot nehezebb létrehozni, de neutronokkal könnyebb a hasadás indukálása, hiszen a neutron tulajdonképpen akadálytalanul bejuthat a magba – később azt is látjuk majd, hogy minél lassabb, annál nagyobb esélye van a magban hatást kifejteni. A következőkben (részben a „*Bevezetés a klasszikus és a modern fizikába*” [Csanád Máté, Eötvös Kiadó, Budapest, 2018] című jegyzetre támaszkodva) a **neutron-indukált maghasadás** kísérleti vizsgálatának történetét mutatjuk be.

1932-ben Cockroftnak és Waltonnak sikerült felgyorsított protonokat lítiumnak ütköztetni, a reakcióban így két α -részecske keletkezett (lásd a 45. ábrát). Tulajdonképpen ez volt a maghasadás lehetőségének első kísérleti bizonyítéka. **Fermi** később, 1934-ben **uránt** bombázott **neutronokkal**. Először azt hitte, hogy egy új, nehezebb izotópot állított elő, de az adatok későbbi vizsgálata során kiderült, hogy az uránatommag valójában két részre esett – akkoriban azonban mindez még nem volt világos. 1938-ban **Otto Hahn** és **Fritz Strassmann** végzett hasonló kísérleteket Berlinben. Itt a végtermékek között kémiai úton **báriumot azonosítottak**, de akkor még nem értették a jelenség fizikai okát. **Lise Meitner** és **Otto Frisch** interpretálta úgy az eredményt, hogy az **uránmag kettéhasadt**: ők nevezték el a jelenséget **maghasadásnak** („nuclear fission”), a biológiából vett akkori kifejezést másolva („binary fission”, sejtosztódás). 1939-ben megerősítették a kísérleti felfedezést, ezzel a **neutronindukált maghasadás ténye kísérletileg bizonyítottá vált** – és Hahn 1944-ben ezért megkapta a kémiai Nobel-díjat. Még abban az évben Amerikában Fermi és társai szintén sikeresen hasí-



45. ábra. Cockroft és Walton kísérleti eredménye, a $p + {}^7\text{Li} \rightarrow \alpha + \alpha$ reakció, illetve a felszabaduló energia kiszámítása

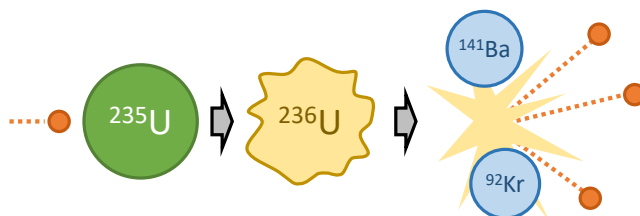
tottak el uránatommagokat. Szilárd Leó, aki (a Cockroft-Walton-féle kísérlet nyomán) már 1933-ban rájött, hogy neutronok **láncreakciót** tarthatnak fenn, azonnal felismerte, hogy építhető maghasadáson alapuló bomba, mivel óriási energia szabadul fel, és neutronok is keletkeznek, azaz láncreakció következhet be. Fermi és Szilárd javasolták, hogy építsenek kísérleti nukleáris reaktort, amely ezen az elven működik, és a keletkező hőt folyamatosan elvonják, ezzel energiát termelve.

Szilárd, Teller és Wigner, három Amerikába emigrált magyar, rávették Einsteint, hogy közösen írjanak levelet Roosevelt elnöknek, amelyben sürgetik az első atombomba megépítését, mielőtt a németek teszik meg ugyanezt. Roosevelt a levelet 1939. október 11-én kapta meg, egy hónappal a második világháború kitörése után (Amerika csak két év múlva lépett be a háborúba). Valóban, angol és német tudósok (Chadwick, Heisenberg) is rájöttek ekkorra, hogy bizonyos „kritikus tömeg” felett az urán kevés neutron hatására is felrobbanhat. Amerika 1942-ben beindította a „Manhattan-terv” fedőnevű kutatási programot, és 1942. december 2-án sikerült beindítani az első „atommáglyát” (azaz: kontrollált hasadási láncreakciót) természetes uránnal mint üzemanyaggal, java-részt Szilárd Leó ötlete nyomán (grafitot használva a neutronok lassítására).

Most lássuk az urán neutronindukált maghasadásának részleteit.

10.2. Az uránizotópok hasadási tulajdonságai

Az uránmag hasadása nagyon sokféle módon végbemehet, amelyek közül egy példa látható a 46. ábrán. A keletkezett két, uránnál kisebb mag rendszámainak összege az urán (92-es) rendszáma lesz, hiszen a protonok megmaradnak a hasadási reakcióban. A hasadványmagok egyike többnyire 80 és 110 közötti tömegszámmal rendelkezik, a másik pedig 130 és 150 közötti tömegszámmal, ahogy azt a 47. ábra mutatja. A hasadványok tömegszámának összege viszont általában nem teszi ki az eredeti uránmag tömegszámát, mert néhány neutron kiszabadul a magokból, és szabadon repül tovább. Például a **235-ös tömegszámú izotóp** egyik ilyen neutronindukált hasadási reakciója az, amikor az uránmag mag szétesik 92-es tömegszámú kriptonra ($Z = 36$) és 141-es tömegszámú báriumra ($Z = 56$), és három neutron keletkezik, lásd a 46. ábrát. Közben sok (körülbelül 200 MeV) energia is keletkezik: ennek legnagyobb része a hasadástermék-magok kinetikus energiájaként jelentkezik, és végső soron hővé alakul az urántömbben. Sokféle egyéb konkrét fajta hasadási reakció is bekövetkezhet, a hasadványok lehetséges méretét az imént említettük; a keletkezett neutronok száma átlagosan 2,5 körül van, izotóparánytól és ütközési energiától függően. Az esetek néhány százalékában azonban az is előfordul, hogy egyetlen neutron sem keletkezik, a legvalószínűbb 2-3 neutron keletkezése, de akár

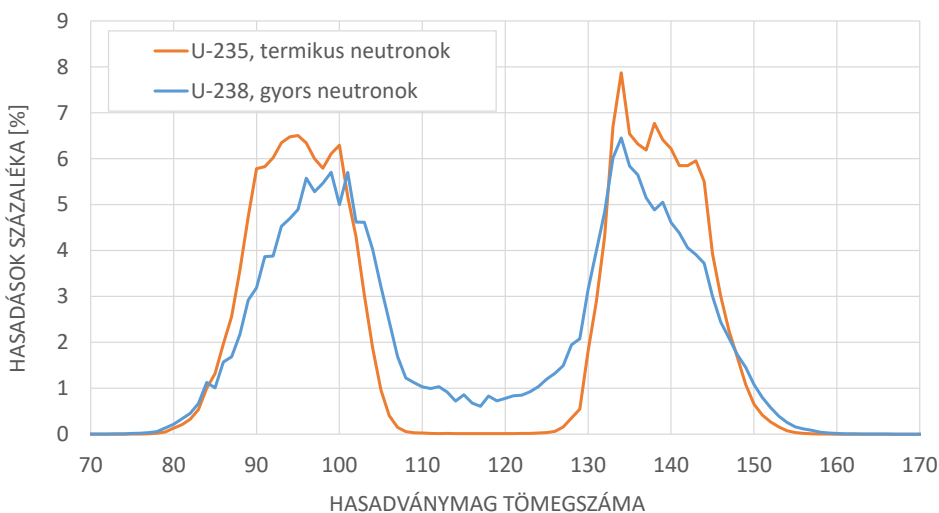


46. ábra. Illusztráció az ^{235}U uránmag neutronindukált hasadásának folyamatáról (az egyik konkrét lehetőség a nagyon sok közül)

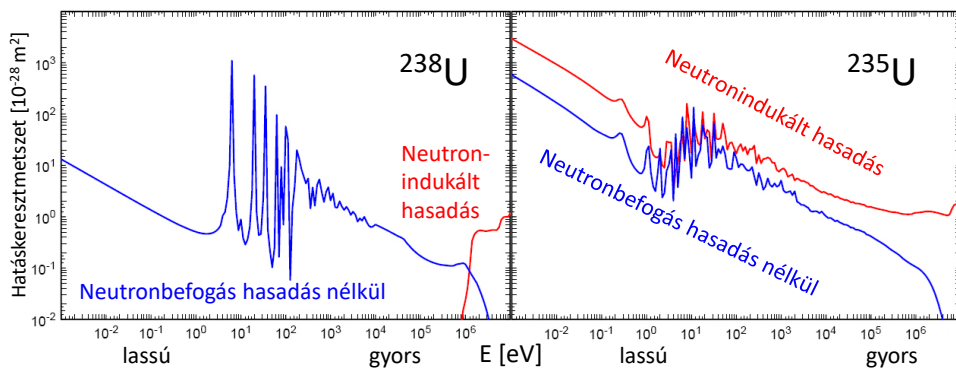
6-7 neutron is keletkezhet – a konkrét eloszlás a hasadó magtól és a hasítást indukáló neutron energiájától is függ. A keletkező neutronok energiaeloszlását is érdemes felidéz-nünk. Ere az úgynevezett Watt-spektrumot használják, amely $\exp(-E/a) \cdot \text{sh}(\sqrt{bE})$ alakú, a benne szereplő a és b paraméterek pedig a bemenő neutronenergiától enyhén függenek, de az $a \approx 1$ MeV és $b \approx 2$ MeV értékek jó közelítéssel igazak néhány MeV-es vagy kisebb energiájú ütközés esetén. A keletkező neutronok energiaeloszlásának maxima ennek megfelelően 0,5 és 1 MeV között van, de néhány keV vagy néhány MeV energia sem elhanyagolható valószínűségű. Mindez azért fontos, mert ebből adódik, hogy a keletkező neutronok többnyire gyorsak, azaz lényegesen gyorsabbak, mint a pár száz fokos közegben termalizált, eV körüli mozgási energiájú termikus neutronok.

A hasadás valószínűségének és az ezzel kapcsolatos különféle lehetőségek megérté-séhez a hatáskeresztmetszeteket kell megvizsgálnunk. Ez függ attól, hogy mely urán-izotópról beszélünk. Természetes uránban az uránatommagoknak csupán 0,7%-a a ^{235}U izotóp. Ez lassú (1 eV körüli mozgási energiájú, termikus) neutronok hatására nagy valószínűséggel hasad, gyors (néhány MeV energiájú) neutronokkal kisebb a reakció ha-táskeresztmetszete (körülbelül századakkora, lásd a 48. ábrán). Egy lassú neutronnal kiváltott ^{235}U -hasadásban átlagosan 2,43 neutron keletkezik. A **238-as tömegszámú izotóp** (a természetes urán maradék 99,3%-a) viszont lényegében csak gyors neutro-nok hatására hasadhat, akkor sem túl nagy eséllyel: a ^{235}U esélyének ötödével. Lassú neutronok a ^{238}U -ban még az előzőnél is sok nagyságrenddel kisebb (lényegében nulla) eséllyel hoznak létre hasadást; itt a neutronbefogás a legvalószínűbb reakció. Összes-ségében azt is leszűrhetjük a 48. ábráról, hogy a ^{235}U teljes hatáskeresztmetszete kis (termikus) energiájú neutronokra a ^{238}U -énál jóval nagyobb (és ennek is jelentős részét a hasadáshoz tartozó hatáskeresztmetszet teszi ki).

A legtöbb alkalmazáshoz meg kell növelni a ^{235}U -os izotóp részarányát, ez a folyamat az **urándúsítás**. Erre tehát azért van szükség, mert az ^{238}U hasadási valószínűségé alacsony, és elnyelné a neutronokat. Atombombában 85% fölötti ^{235}U -részarányra van szükség. Atomreaktor működtetése ugyan lehetséges természetes uránnal is, de a leg-több fajta reaktor működéséhez is kicsit (tipikusan 3-4% körülire) megnövelik a ^{235}U arányát (ez egyrészt segíti a hasadási láncreakció fennmaradását, másrészt technikai-gazdasági szempontból is kedvező: egységnyi tömegű uránüzemanyagból több energiát lehet kinyerni). A dúsítási folyamat még ma is kihívásokkal teli: a két uránizotóp kémi-aileg egyforma uránfém, semmilyen vegyi reakcióval nem lehet őket megkülönböztetni. Csak olyan módszerek jönnek szóba, amelyek valamilyen fizikai elv alapján kihasznál-ják a kétféle izotóp magja közötti kicsiny relatív (1% körüli) tömegkülönbséget. Ehhez az urán valamilyen gáz halmazállapotú vegyületére van szükség, ahol ráadásul a többi alkotóelemnek csak egyféle izotópja lehet (különbön nem tudhatnánk, hogy az uránizo-tóp miatt nehezebb-e a molekula). Az urán-oxidból, hidrogén-fluoridból és fluorgázból készíthető urán-hexafluorid (UF_6 , szilárd állapotában a kősóra emlékeztető anyag) gya-korlatilag az egyetlen lehetőség. Ez az anyag igen nehézkesen kezelhető, víz vagy vízgőz hatására könnyen átalakul uranil-fluoriddá (UO_2F_2). Urán-hexafluoriddal dolgozva a dúsítás következő lépésének egyik módszere lehet a gázdifúzió. Ez arra épít, hogy egy membránon a kétféle tömegű gázmolekula kicsit különböző mértékben diffundál át. Ez a módszer igen nagy mennyiségű befektetett energiát igényel. Szóba jön még a centrifugálás (ahol szintén a kis tömegkülönbség miatt kicsit szétválik a két izotóp): ez nagyon nagy fordulatszámot, emiatt extra minőségű acélt és fejlett irányítástechnikát igényel. Ezt a módszert is igen nagy kihívás alkalmazni. Uránt dúsítani tehát lehetséges, de



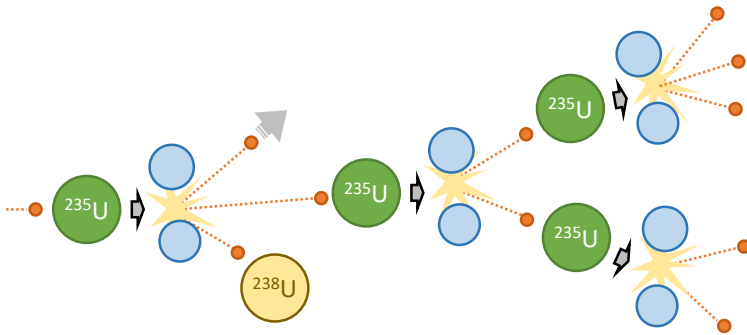
47. ábra. ^{235}U lassú (termikus) neutronokkal, illetve ^{238}U gyors neutronokkal történő hasadása során keletkező magok tömegszámeloszlása. Az egyes izotópokhoz tartozó adatpontok összege 200%, ugyanis egy hasadásban két mag keletkezik. Az adatok forrása a Los Alamosi Nemzeti Laboratórium LA-UR-94-3106 (1994) összegző publikációja.



48. ábra. Hasadás és a neutronbefogás hatáskeresztmetszete két uránizotópra. ^{235}U esetén a lassú neutronokkal való hasadás a legvalószínűbb, de gyors neutronokkal is lehetséges. A ^{238}U a lassú neutronokat mindig befogja, de gyors neutronokkal itt sem kizárt a hasadás (noha valószínűtlenebb). A középső energiatartományban látható oszcilláció annak köszönhető, hogy sok metastabil állapot található ezeken a gerjesztési energiákon.

komoly technikai felkészültséget igénylő feladat.

Ha adott a ^{235}U izotóp aránya tekintetében dúsított urán, akkor a maghasadás kiaknázásnak legfőbb feltétele, hogy hasadási **láncreakció** alakuljon ki. Ez azért lehetséges, mert minden hasítás során, mint láttuk, átlagosan 2-3 újabb neutron keletkezik. Ha ezek (majdnem) mind hasítanak, akkor a következő hasadási generációban már 8-10 neutron is jelen lehet, azaz a neutronok (és ezzel a hasadások) száma generációnként 2-3-szorosa lesz az előzőnek, ahogy azt a 49. ábra illusztrálja. Ebben az esetben tehát, mivel egy hasadásgeneráció a másodperc törtrésze alatt lezajlik, szinte azonnal elhasad majdnem az összes rendelkezésre álló uránmag. Figyelembe kell venni, hogy a keletkező neutronok jelentős része elszökik vagy befogódik, a 48. ábrán megadott hatáskeresztmetszeteknek megfelelően. Az egy neutron által okozott hasadástól keletkező, szintén hasadást okozó neutronok számát hívjuk **neutronsokszorozási tényezőnek**, ugyanis generációnként ennyiszerezésre változik a hasadást okozó neutronok száma. Ha ez a sokszorozási tényező 1-nél lényegesen (néhányszorosan) nagyobb, akkor tehát egy hirtelen hasadási láncreakció zajlik le: ilyesmi történik a maghasadásra építő bomba robbanásakor (azzal a kiegészítéssel, hogy többnyire a rendelkezésre álló uránmagoknak csak töredéke hasad el, mert még a teljes hasadási láncreakció befejeződése előtt szétveti az anyagot a közben felszabaduló energia). A maghasadást kiaknázó reaktor esetében viszont arra van szükség, hogy a keletkező 2-3 neutronból átlagosan mindig pontosan egy okozzon további hasadást, azaz a neutronsokszorozási tényező éppen 1 legyen. Ekkor a láncreakció hosszú évekig folyhat egyenletes teljesítményleadás mellett. A maghasadás ezen alkalmazásait tárgyaljuk a következő két szakaszban.



49. ábra. A láncreakció során az egyes lépésekben néhány keletkező neutron elszökhet vagy ^{238}U -as uránban elnyelődhet, de ha átlagosan egynél több okoz hasadást, akkor az egyes „generációkban” exponenciálisan nő a hasadások száma.

Gyakorlófeladat

- Ha az ^{235}U felezési ideje kb. 704 millió év, az ^{238}U felezési ideje pedig kb. 4,47 milliárd év, és a fentebb írt 0,007:0,993 arányban vannak most jelen, akkor mikor lehetett az arányuk azonos?
- Egy 1 MeV energiájú (gyors) neutron általi hasadás hatáskeresztmetszete ^{238}U esetén 0,024 barn, a befogási hatáskeresztmetszet ugyanerre a neutronra 0,25 barn. Ugyanezek az adatok ^{235}U esetén 1,28 barn (hasadás) és 0,4 barn (befogás). Vegyünk egy kellően nagy gömböt, ahol már elhanyagolható az elszökés valószínűsége (azaz mindenképpen történik kölcsönhatás). Ekkor a hasadás valószínűségét a $\sigma_{\text{hasadás}}/\sigma_{\text{teljes}}$ arány határozza meg, és mind a számlálót, mind a nevezőt az izotóparánnyal súlyozottan kell venni. A természetes izotóparány (99,3% és 0,7%) mellett mekkora lesz a hasadás valószínűsége? Mekkora dúsítási aránynál éri el a hasadási valószínűség az 50%-ot?

10.3. Az atombomba

Az **atombombában** a 235-ös urán hasadásából gyors neutronok keletkeznek, melyek (rövid idő alatt) újra hasíthatnak. A tervszerű működéshez arra van szükség, hogy a lehető legtöbb, hasadásban keletkezett neutron újra hasadást okozhasson. Egy urántömb felületen ugyanakkor **kiszökhetnek a neutronok**, vagy esetleg más miatt (pl. neutronbefogás esetén, ahogy az előző szakaszban említettük) nem okoznak hasadást. Így ugyan 2-3 neutron keletkezik, de **nem mind okoz hasadást**. A kiszökés elsősorban geometriai okból következik be, a **felület/térfogat arányától** függ, azaz kis gömb esetén arányosan több a szökés, mint nagy gömb esetén. Ha a további hasadást okozó neutronok száma egynél nagyobb, láncreakció következhet be. Létezik egy „**kritikus méret**”, illetve „kritikus tömeg”: az ennél nagyobb gömb felületén már nem szökik ki túl sok neutron, azaz a neutronsokszorozási tényező egynél nagyobb. Az urán 235-ös izotópjából álló gömb esetén a kritikus tömeg körülbelül 52 kg, ez – az urán 19 g/cm^3 sűrűségét figyelembe véve – 17 centiméteres átmérőnek (8,5 cm-es sugárnak) felel meg.

Ezen kritikus méret vagy tömeg közelítő meghatározásához vizsgáljuk a szabad neutronok (hely- és időfüggő) N számsűrűségét a közegben. Erre egy közönséges diffúziós egyenlet vonatkozik (amennyiben a szabad úthossz lényegesen kisebb a rendszer méreténél; ez azonban itt nem igazán teljesül, emiatt az alábbi levezetés nem egészen konzisztens). A felírandó diffúzióegyenletben a forrástagot a hasadásokban keletkező neutronok jelentik. Ha egy hasadásban átlagosan ν neutron keletkezik, és két hasadás között átlagosan τ idő telik el, a diffúziós együttható pedig D , akkor a következők írhatjuk:

$$\dot{N} - D\Delta N = \frac{\nu - 1}{\tau}N, \quad (10.1)$$

hiszen τ idő alatt $(\nu - 1)N$ neutrontöbblet keletkezik egy adott helyen (ahol sűrűbben voltak a neutronok, ott több hasadás is történt). Keressük ennek megoldását hely és idő szerint szétválasztott alakban, konkrétan így:

$$N = N_1(r)e^{\nu' t/\tau}. \quad (10.2)$$

Ekkor a ν' jelentése egyfajta effektív neutronsokszorozási tényező; ez határozza meg az időben exponenciális növekedés gyorsaságát. Ez a próbafüggvény azért praktikus, mert így az időfüggés kiesik, és az N_1 eloszlásra kapunk egy egyenletet. Gömbszimmetriát feltéve a Laplace-operátor $\Delta N_1 = \frac{1}{r} \partial_r^2 (r N_1(r))$ módon írható, és az ilyen esetben (gömbi koordinátájú Laplace-egyenletnél) szokásos $u = r N_1$ helyettesítéssel élve a

$$\partial_r^2 u = \frac{\nu' - \nu + 1}{D\tau} u \quad (10.3)$$

egyenletet kapunk, ahonnan végül a megoldás a következő lesz:

$$N(r, t) = N_0 \frac{\sin(\pi r/R)}{\pi r/R} e^{\nu' t/\tau}, \quad (10.4)$$

ahol bevezettük az R mennyiséget a következő módon:

$$\frac{\pi^2}{R^2} = \frac{\nu' - \nu + 1}{D\tau}. \quad (10.5)$$

A megoldásban szerepelő szinuszos kifejezés miatt R tulajdonképpen a gömb méretét jelenti, hiszen itt éri el a sűrűség a nullát, ezen túl negatív lenne. A kritikusság pedig azt jelenti, hogy időben éppen állandó a neutronsűrűség (se nem nő, se nem csökken), azaz $\nu' = 0$. Ebből

$$R = \pi \sqrt{\frac{D\tau}{\nu - 1}} \quad (10.6)$$

adódik. Nagy dústítású urán (highly enriched uranium, HEU) esetében feltehetjük a következő értékeket: $D \approx 2 \cdot 10^5 \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau \approx 10^{-8} \text{ s}$, $\nu = 2,6$. Innen $R = 11 \text{ cm}$ adódik, ami nincs messze a fentebb említett $R = 8,5 \text{ cm}$ eredménytől. Itt ugyanakkor elég sok közelítést tettünk, például nem vettük figyelembe (a diffúziós közelítésben), hogy nemcsak hasadás, de szórás is lehetséges, és ennek hatáskeresztmetszete sokkal nagyobb (gyors neutronokra kb. négyszeres), ebből adódóan két hasadás között valójában több rugalmas szórás is bekövetkezik. Vezessük be a λ szabad úthosszak vagy σ hatáskeresztmetszetek segítségével definiált

$$\eta = \frac{\lambda_{\text{hasadás}}}{\lambda_{\text{szórás}}} = \frac{\sigma_{\text{szórás}}}{\sigma_{\text{hasadás}}} \quad (10.7)$$

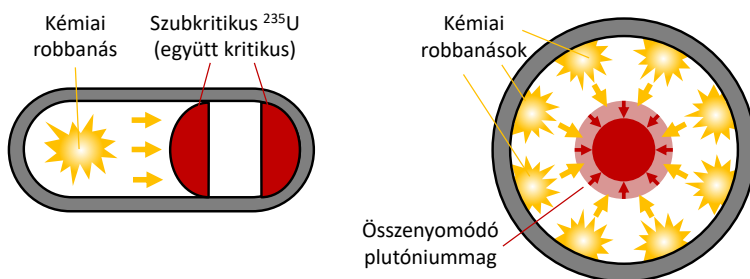
hányadost. Ekkor a véletlen bolyongás szabályai alapján két hasadás között valójában

$$d = \sqrt{\eta} \lambda_{\text{szórás}} = \frac{\lambda_{\text{hasadás}}}{\sqrt{\eta}} \quad (10.8)$$

távolság van; gömbi koordinátákban vett radiális irányban

$$r = \frac{\lambda_{\text{hasadás}}}{\sqrt{3\eta}} \quad (10.9)$$

utat tesz meg egy neutron. Valójában ezt kellene figyelembe venni a diffúzió során. Sok más pontosítást is lehetne tenni, de már a fenti, egyszerűsített számolás – amelynek eredetije R. Serber, „*The Los Alamos Primer: The First Lectures on How to Build an*



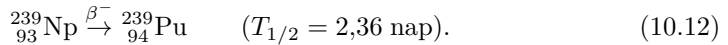
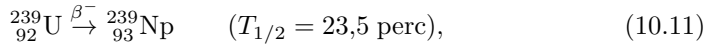
50. ábra. Az atombomba két lehetséges felépítésének sematikus ábrája. A lényeg mindig az, hogy a kezdetben (a szállítás majd ledobás során) még nem kritikus mennyiségű hasadóanyagot valahogy szuperkritikussá tegyünk: vagy két kisebb rész összepréselésével, vagy egy nagyobb gömb kompressziójával. Mindkét esetben csökken a tömegegységre jutó felszín, így kevesebb neutron szökik meg, és meghaladjuk a kritikus mennyiséget.

„Atomic Bomb” című (Univ. Calif. Press, Berkeley, 1992) anyagában található – is elég közelítést ad.

Az atombomba kritikus mennyiségű hasadóanyagból áll, hogy lehet tehát elérni, hogy ne robbanjon fel azonnal? Például úgy, hogy a robbantáshoz két kisebb („szubkritikus”) tömböt egy (hagyományos robbanóanyaggal való robbantással) hirtelen egyesítenek, a két darabot összelöve, ahogy az 50. ábra bal oldala mutatja. (Ilyen módon működött a Hirosimára 1945-ben ledobott, ^{235}U hasadásán alapuló atombomba.) A másik lehetőség, hogy implóziós technikával (gömbszerűen befelé robbantással, lásd az 50. ábra jobb oldalát) egy szubkritikus méretű hasadóanyag-gömböt eredeti sűrűségének többszörösére (jellemzően néhányszorosára) összenyomnak. Utóbbi módon is létrejöhet a láncreakció, azaz kritikusá válhat a hasadóanyag-elrendezés (noha ekkor a hasadóanyag tömege nem változik; ezért azt mondhatjuk, hogy a „kritikus tömeg” fogalma nem egészen helytálló, abban az értelemben, hogy nem lehet így egyetlen számértékkel való összehasonlításba „kódolni” a robbanás feltételeinek teljesülését). A gömbszimmetrikus összenyomás miatti méretcsökkenés ugyanis a sűrűség növekedésével jár, méghozzá köbös módon: egy ξ -szeres lineáris méretcsökkenés ξ^3 -szeres sűrűség-növekedéshez vezet, ami a neutronok szabad úthosszának $1/\xi^3$ -szeres csökkenését eredményezi. Így a szabad úthossznak a gömb méretéhez viszonyított aránya végső soron $1/\xi^2$ -szeresére csökken: ennek a mennyiségnek a kicsisége határozza meg azt, hogy ne szökjenek ki a neutronok a hasadóanyagból; látjuk tehát, hogy ez az arány összenyomással valóban kedvezőbbé tehető. Ilyen (implóziós) módon működött az első kipróbált atombomba és a Nagaszakira ledobott (^{239}Pu plutóniumizotóppal készült, lásd alább) atombomba is. Mindkét említett elrendezésben (ágyúszerű összelövés, illetve implózió) esetén szükség van egy olyan neutronforrásra, ami éppen a (hasadóanyag kritikusá válása során) legmegfelelőbb időpillanatban indítja el a láncreakciót. Fontos az is, hogy a keletkező hő ne vesse szét idejekorán a hasadóanyagot, mielőtt még a lehető legtöbb hasadás lezajlott volna. Ennek elkerülése érdekében valamilyen nehéz (nagy mechanikai tehetetlenségű) burokba helyezik az uránt.

Atombombát a plutónium (Pu) 239-es izotópjából is készítenek. Ez a természetben nem található meg (mivel 24 ezer év a felezési ideje), atomreaktorban keletkezik ^{238}U -ból

a következő neutronbefogásos reakcióval:

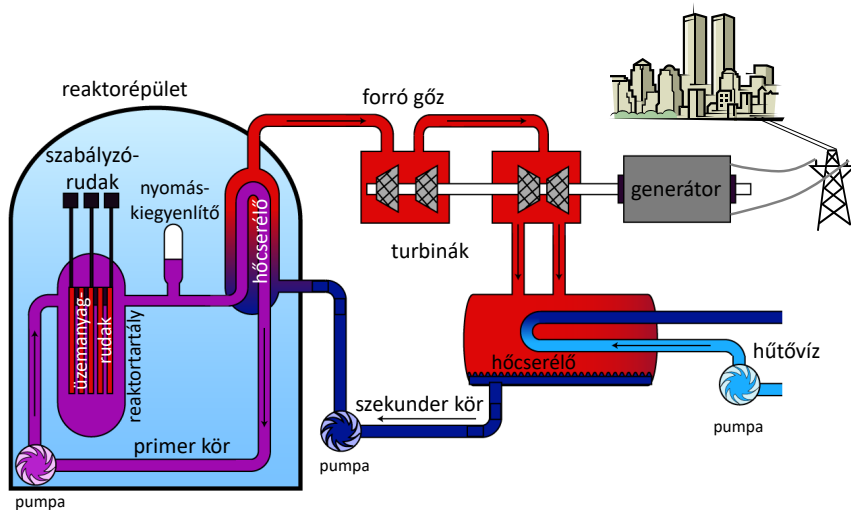


A ${}^{239}\text{Pu}$ hasadása során ugyanúgy körülbelül 200 MeV energia keletkezik, de a neutron-indukált hasadási valószínűsége nagyobb, mint ${}^{235}\text{U}$ magnak, és átlagosan több neutron is keletkezik egy hasadásban. Ezért egy ${}^{239}\text{Pu}$ gömb kritikus tömege csak 10 kg, ami 10 cm-es átmérőnek felel meg. Ezen felül egyszerűbb előállítani (atomreaktor urán-fűtőanyagából a keletkezett plutóniumot kémiaiilag kivonva), mint az uránt dúsítani. Ugyanakkor ebben az esetben problémát jelent egy másik izotóp jelenléte: reaktorban való plutóniumgyártáskor (a keletkezett ${}^{239}\text{Pu}$ neutronbefogásával) ${}^{240}\text{Pu}$ is keletkezik, amit (az üzemanyag gyakori cseréjével és plutóniumkivonással) lehet ugyan egy minimális szinten tartani, de észszerű esetben még így is nem elhanyagolható (néhány %) lesz a ${}^{240}\text{Pu}$ aránya. Ez az izotóp pedig relatíve nagy valószínűséggel spontán hasad. A ${}^{240}\text{Pu}$ jelenléte tehát megakadályozhatja a sikeres robbanást: a spontán hasadásban keletkező neutronok túl hamar beindítják a láncreakciót, mielőtt még a plutóniumtömb (az összelövés során) eléri az ideális geometriai elrendezést, ez pedig túl korán szétveti a bombát, mielőtt még a láncreakció teljesen kifejlődhetne. Bomba készítésére csak a ${}^{240}\text{Pu}$ magokat körülbelül 7%-nál kisebb arányban tartalmazó plutónium alkalmas: nem szabad a bomba céljára való plutóniumtermelésre használt uránrudakat sokáig a reaktorban hagyni, néhány hetente cserélni kell őket. Kereskedelmi atomerőműben termelődött plutónium tehát (ahol éveket tölt a reaktorban az üzemanyag) nem igazán alkalmas bombagyártásra. Plutóniumbomba esetén nem is alkalmazható az egyébként sokkal egyszerűbben megvalósítható ágyú típusú elrendezés: így nem lehet elég gyorsan megfelelő kritikus méretet létrehozni, hogy a ${}^{240}\text{Pu}$ spontán hasadása ne zavarjon idejekorán.

Látható, hogy az atombomba készítéséhez minden esetben nagy technikai fejlettségre van szükség: mind az urándúsítás, mind a plutóniumtermelés (és a precíz implóziós technika kidolgozása) igen nehéz folyamat. Ez az oka annak, hogy kevés országnak van atombombája. A szükséges alapanyagok és eszközök kereskedelmének és szállításának ellenőrzése az **atomsorompó-egyezmény** betartásának egyik fő módszere.

10.4. Az atomreaktor

A maghasadás energiatermelésre alkalmas kontrollált hasznosításának alapfeltétele, hogy ne egyszerre, robbanásszerűen szabaduljon fel a hasadási energia, hanem **időben egyenletesen** elosztva. A hőt elektromos energiává alakítva így állandó energiaforrást hozhatunk létre. Az atomreaktor működésének alapja tehát a hasadások másodpercenkénti számának állandósága. Ha a reaktorban az egy hasadás után keletkező neutronok átlagosan egynél több további hasadást okoznak jelentős időn keresztül, akkor „megszaladás” következik be. Atombombában éppen ezt kell elérni, reaktorüzemi szempontból ez azonban balesetnek minősülne. Ha egynél kevesebbet további hasadás történik, akkor viszont hamar leáll a reaktor, hiszen „elfogynak” a neutronok. Akkor működik stabilan a reaktor, ha minden hasadásból keletkező neutronok közül **pontosan egy** okoz további hasadást. Az egy hasadásból származó és újabb hasadás okozó neutronok számát



51. ábra. A nyomottvízes reaktor működése. A maghasadás a reaktortartályban lévő üzemanyagrudakban zajlik. A keletkező hő a primerkörü víz (ami nagy nyomása miatt nem forr) viszi el, és még a reaktor betonból készült konténmentjében egy hőcserélőben (gőzfejlesztőben) átadja a hőt a szekunderkörü víznek. Ez felforr, a gőz hajtja a turbinákat, azok pedig a generátort, így elektromos energiát termelve. A szekunderkörü víz a hőjét szintén egy hőcserélőn át a hűtővíznek adja át.

sokszorozási tényezőnek nevezzük, és erre a

$$k = \frac{N_{i+1}}{N_i} \quad (10.13)$$

összefüggés érvényes, ahol N_i az adott, i . generációban jelen lévő neutronok száma. Az energiatermelés állandóan tartásához ekkor a $k = 1$ állapotot kell fenntartani. Érdeemes megemlíteni, hogy valódi reaktorok esetén a k_{eff} effektív sokszorozási tényezőt szokás megadni, amely figyelembe veszi a reaktor véges méretét, és az ebből adódó szökési valószínűséget, illetve a neutronbefogás és a termikus energiára lassulás valószínűségét is. A sokszorozási tényezővel definiált

$$\rho = \frac{k - 1}{k} \quad (10.14)$$

hányadost reaktivitásnak nevezzük. Ha $\rho = 0$, akkor hívjuk kritikusnak a reaktort (amiben éppen pont fennmarad a láncreakció), $\rho > 0$ esetén szuperkritikus, $\rho < 0$ esetén szubkritikus elrendezésről (reaktorról) beszélünk.

Ahogy a 48. ábrán láttuk, a hasadás valószínűsége lassú neutronok esetén lényegesen nagyobb. Ugyanakkor a hasadásban keletkező neutronok **gyorsak**, jellemzően néhány MeV energiájúak, ezért **le kell lassítani őket**. A lassítást végző anyag az ún. **moderátor**: ez olyan anyag, amely könnyű atommagokat tartalmaz. A neutronok ugyanis saját tömegüknél nem sokkal nagyobb maggal rugalmasan ütközve mozgási energiájuk nagy részét elveszíthetik, hiszen ilyenkor az ütközés utáni neutronsebességet a tömegkülönbség határozza meg. Moderátornak ezért alkalmas lehet a grafit (szén), berillium, de

legkézenfekvőbb a könnyűhidrogént tartalmazó közönséges víz vagy a deutériumot tartalmazó nehézvíz. Ez utóbbi esetekben a moderátorként szolgáló víz egyúttal a keletkező hőenergiát elszállító hűtőközegnek is alkalmas. A moderátor által lelassított neutronok nagy része hasadást tud okozni (de csak az ^{235}U -ben, a 238-as izotóp elnyelheti őket, vagy nem lép reakcióba). Éppen ezért elég lehet csak mérsékeltén dúsítani az uránt. Grafit (és nehézvíz) alkalmazásával természetes uránból is lehet reaktort készíteni: eleinte ilyenek fejlesztésére koncentráltak. Legelterjedtebb azonban a természetes vízzel moderált atomreaktor lett: ehhez enyhén, 3-4% körülire kell dúsítani az uránban az ^{235}U részarányát. Ennek oka, hogy a természetes vízben lévő könnyűhidrogénmag (azaz proton) kicsi, de éppen „elegendő” mértékben elnyeli a neutronokat, a nehézvízben lévő deutériummag, illetve a szénatommag viszont alig – a könnyűvíz esetében „rá kell kicsit segíteni”, az urán dúsításával. Mivel tehát az atomreaktorban kevésbé dúsított urán is használható, ezért a dúsítási technológia terjedésének korlátozása nem gátolja meg az atomenergia békés célú hasznosítását.

Fentebb említettük, hogy a ^{235}U izotóp gyorsabban bomlik, mint a 238-as tömegszámú: több milliárd éve tehát még nagyobb volt a 235-ös izotóp részaránya. Ezért ezekben a régi földtörténeti korokban talajvízzel mint moderátorral együtt *természetes atomreaktor* indulhatott be. Oklóban, Gabonban (uránbányászat során) erre bizonyítékot is találtak: a körülbelül 2 milliárd éve „üzemelt” természetes reaktorban keletkezett (és radioaktivitásukat már rég elvesztett) hasadási termékek javarészt a közelben maradtak; ezek vizsgálatával sok információ volt kapható a reaktor hajdani működéséről. Ez alapján az derült ki, hogy ezen természetes atomreaktor legfeljebb 100 kW teljesítménnyel üzemelt, és a keletkező hő kb. 30 perc után elpárologtatta a vizet. Az emiatt kihűlő anyagba visszatérő víz okozta moderálás két és fél óra után újra beindította a reaktort, a reaktor pedig ezt a körülbelül háromórás ciklust követte sok-sok évezreden át.

Normál üzemű reaktorban a neutronsokszorozási tényezőnek egyhez minél közelebb kell lennie. Ennek részletei túlmutatnak jelen jegyzet keretein, de megemlítjük, hogy többféle természetes **visszacsatolás** létezik, amely egyenletes reaktorüzemet biztosít. Legfontosabb, hogy ha valamilyen ok miatt a neutronsokszorozás hirtelen kicsit megnő – és ezzel együtt a láncreakció sebessége is –, akkor ez melegíti az üzemanyagot, és kiderül, hogy a nagyobb hőmozgás miatt az üzemanyagban lévő ^{238}U több neutronot fog elnyelni. Ez a hatás tehát azonnali visszacsatolásként csökkenti a láncreakció „kilengését”.

A teljesítmény vezérléséhez **szabályzórudakat** alkalmaznak, amelyek neutronelnyelő anyagból (kadmium, bór) készülnek. Ha betoljuk őket az üzemanyagot tartalmazó régióba, akkor sok neutronot elnyelnek, és így egyre kevesebb hasadás következik be: a reakció intenzitása csökken, végül a reaktor leáll. Ha kihúzzuk a rudakat, akkor viszont egyre több hasadás történik, a reaktor teljesítménye növekedni kezd. A szabályzórudakat pontosan olyan magasságban kell tartani, hogy $k = 1$ legyen. Ehhez segítséget ad az, hogy a láncreakciót továbbvivő neutronok egy kicsi, de elegendő része nem rögtön a hasadásban, hanem sok másodperccel, akár több perccel később szabadul ki. Ennek oka a hasadásban keletkezett magok egy részének neutronkibocsátó (ilyen, jellemzően másodperces vagy perces felezési idejű) bomlása: az ez által termelt neutronok megjelenésének időskálája tehát lényegesen hosszabb, mint a reaktorban egymást követő neutrongenerációk (tipikusan 10-100 μs értékű) követési ideje. Ezen „késő” neutronok arányát jelölje β_{eff} , az azonnal (a hasadásban) keletkező neutronokat pedig „prompt” neutronoknak hívjuk. Ha $\rho = \beta_{\text{eff}}$, akkor a reaktor „prompt kritikus”, azaz az azonna-

li neutronok önmagukban is kritikussá teszik a rendszert. Ekkor a reaktorteljesítmény időben sokkal gyorsabban kezd el növekedni, a szabályozórudak mozgathatóságának időskálájánál is gyorsabban. Végeredményben az derül ki, hogy a reaktor a reaktivitásának $0 < \rho < \beta_{\text{eff}}$ értéke között szabályozható könnyen (illetve persze $\rho < 0$ esetén is, ha a szabályozó rudakat még kijebb lehet mozgatni). Mindezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a késő neutronok miatt megjelenő megnövekedett időskála egy természetes „haladékat” ad, ami a szabályozórudakkal követhetővé teszi a neutronsokszorozás kis változásait, kilengéseit.

A reaktorban keletkező hő elszállításának első fokozatát nevezzük **primer körnek**, amely az üzemanyag körül kering, majd felmelegíti a **szekunder körben** keringő közeget (szintén vizet), amely gőzzé forrva hajtja a **turbinákat**, amelyek meghajtják a **generátort**, ahol áram termelődik (feszültség indukálódik). A szekunderkörü vizet a turbina után természetes vízzel is lehűtik (hogy a turbinákon átmenő gőz lecsapódjon, és újra felforrhasson; ez azonban már pontosan ugyanígy történik bármilyen gőzturbinás hőerőműben is). Az ezen az elven működő, ún. nyomottvízes reaktor (PWR) vázlatát lásd az 51. ábrán. Ezek egyik fő **természetes biztonsága** (a már említett üzemanyag-hőmérsékleti visszacsatoláson túl) az, hogy ha megszalad a reaktor, a moderátor (víz) elforr, a neutronok kevésbé lassulnak le, ezért kevésbé okoznak hasadást, így a teljesítmény visszacsökken. Érdemes megemlíteni, hogy a grafitmoderátoros, de vízű reaktorokban ez a „biztonsági fokozat” hiányzik (mivel a grafit ott marad forrósodás esetén is), sőt, fordított hatás van: a víz elforrása (a víz neutronelnyelésének kiesése miatt) csak rásegít a teljesítménynövekedésre. Ezt normál üzemben bőven kompenzálja az üzemanyag-hőmérsékletre vonatkozó mindig meglévő (fent említett) negatív visszacsatolás; alacsony teljesítményű üzem viszont veszélyes lehet. Ez a körülmény hozzájárult a csernobili atomerőmű (ilyen típusú) 4. reaktorának 1986-os balesetéhez. Napjainkban az atomerőművi blokkok nagy többsége vízmoderátoros reaktor, a különbség többnyire csak a moderátor és primerkörü víz természetében van: a reaktorok egy része nehézvizet (D_2O) használ. A vízforráló (vagy: forralóvízes) reaktorok (BWR) is hasonló elven működnek; ezekben nincsen primer- és szekunderkör, hanem a turbinát hajtó gőz közvetlenül a reaktorban termelődik (a víz elforrásával).

A maghasadással működő atomreaktorok üzeme során elenyésző mértékben keletkeznek káros anyagok, és a környezetkárosító vagy emberre is veszélyes balesetek esélye is elenyésző (összevetve például a szénbányászat vagy gázkitermelés során történő balesetekével). Ugyanakkor az üzemanyagban történő maghasadások után visszamaradó hasadványanyagok radioaktívak, és bár az aktivitásuk többnyire kicsi (azaz kevés bomlás történik időegység alatt), a felezési idejük magas is lehet, akár évmilliókban mérhető (például a keletkező ^{129}I , ^{107}Pd , ^{135}Cs hasadványoké, illetve az uránból keletkező transzurán magoké). Az így keletkező **radioaktív hulladék** aktivitásának jelentős részét az első évtizedekben elbomló anyagok adják, de a sugárzás még több száz év múltán is mérhető. A hulladékot így mélyen a föld alá, vízzáró rétegek közé telepített betonkoporsókban lehet elzárni.

A fent említettektől eltérő típusú reaktorok is léteznek. Ilyenek pl. az ún. **gyorsreaktorok**, ahol nincs moderátor, a neutronok nem lassulnak le. Emiatt több (dúsabb) hasadóanyagra van szükség (és speciális hűtőközegre, pl. folyékony nátriumra), de elérhető, hogy hasadásonként (az ^{238}U neutronbefogásából, két β -bomlással) egynél több ^{239}Pu mag keletkezzen, ami (ahogy említettük) szintén hasadóanyag. Ezáltal tehát az eddig használhatatlannak tűnő ^{238}U izotóp (mely szinte korlátlanul rendelkezésre áll) is

hasznosítható lesz, és a transzurán magok is újrahasznosulnak (és a radioaktív hulladék is mentes lesz ezektől). Urán helyett tóriumot (Th) használó reaktorokkal is végeznek kísérleteket: az uránál körülbelül négyszer gyakoribb tórium természetes izotópjából, a ^{232}Th -ból egy neutron befogásával (két β -bomlás után) hasadó ^{233}U mag keletkezik, ami tehát üzemanyagként elhasználható. A ^{233}U hasadásából jóval kevésbé keletkeznek transzurán magok, ugyanakkor itt nehezebb megvalósítani a neutronok elég hatékony megtartását (hogy az egy hasadásból keletkezett neutronokból az egy további hasítás mellett „jusson” átlagosan legalább még egy további neutron arra is, hogy újabb hasadó magot termeljen).

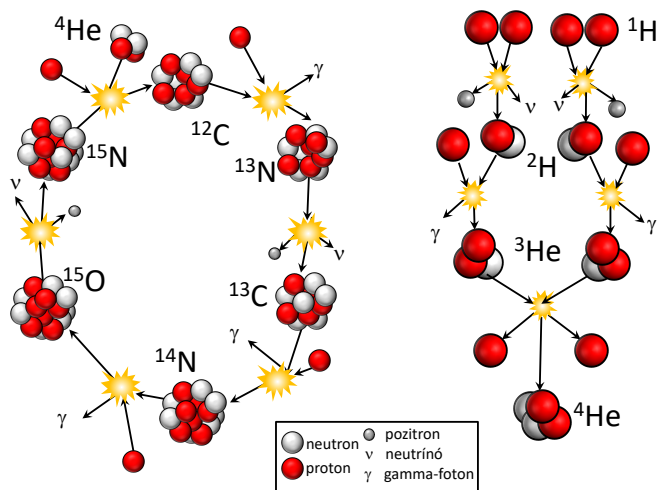
Ezek a reaktortípusok mindenesetre kedvezőbb tulajdonságokkal rendelkeznek a ma jellemző reaktoroknál. A reaktortípusok osztályozásához érdemes tudni, hogy az 1960-as évek közepéig épült reaktorokat sorolják az első generációba, az 1990-es évek végéig épültek a másodikba, míg ezek továbbfejlesztett változatai, a manapság épülő reaktorok a harmadik generációba tartoznak. Az előző bekezdésben említett, többnyire kísérleti fázisban járó, negyedik generációs reaktortípusok előnyei tehát a következők:

- Akár millió évekig sugárzó izotópok helyett 100-1000 éves felezési idejűek maradnak hátra a radioaktív hulladékban.
- Hatékonyabb az üzemanyag-hasznosításuk, és emiatt gazdaságosabb lehet az üzemeltetésük.
- A korábbi generációs elvek szerint épült és üzemelő reaktorok radioaktív hulladékát újra tudják hasznosítani.
- Magasabb fokú beépített, passzív biztonsággal rendelkeznek.

Sokak szerint a következőkben tárgyalandó fúziós erőművek helyett ezek jelentik az emberiség energiatermelésének jövőjét – jelenleg azonban a „hagyományos” atomreaktorok uránüzemanyaga még annyira olcsó, hogy nem feltétlenül éri meg az ilyen fejlettebb (és technológiailag kicsit igényesebb) reaktorokat üzembe állítani. Mindenesetre prototípusként már évtizedek óta, nem régóta pedig kereskedelmi üzemben is működnek már ilyen, negyedik generációs tekinthető atomreaktorok (pl. Oroszországban és Kínában). Elterjedésük 2030-2040 körülől várható, néhány kisebb léptékű technológiai fejlesztéssel egybekötve.

10.5. A Nap és a csillagok működése, a magfúzió és a nukleoszintézis

A Nap által kisugárzott fény és hő még a Földön, százötvenmillió kilométeres távolságban (!) is roppant intenzív, ahogy azt nap mint nap tapasztaljuk. Felmerült a kérdés, hogy **miből származik a Nap energiája**. Sokáig az volt a feltételezés, hogy a Nap valamilyen kémiai folyamatból nyeri ezt az energiát. A napsugárzás energiájának mérésével (a Nap 23. ábrán is bemutatott spektrumának, illetve a Planck-eloszlásnak ismeretében, a Stefan–Boltzmann-törvényt és a Nap Földtől vett távolságát, ezzel összhangban a méretét is tudva) kiszámolható, hogy a Nap által kisugárzott hőteljesítmény nagysága kb. $P_{\text{Nap}} = 3,8 \cdot 10^{26}$ watt. Figyelembe véve, hogy a kémiai reakciókban össz-tömegegységként felszabaduló energia felső korlátja néhányszor tíz MJ/kg érték lehet (vegyünk pl. engedékenyen $\epsilon = 100$ MJ/kg értéket), és ismerve a Nap kb. $M_{\text{Nap}} = 2 \cdot 10^{30}$ kg tömegét, kiderül, hogy ilyen hőtermelés esetén legfeljebb $t = \epsilon \cdot M_{\text{Nap}} / P_{\text{Nap}} \approx 17000$ év alatt fogyna el a Nap energiája. Ennél optimistább eredményt ad, ha figyelembe



52. ábra. A csillagok belsejében zajló fúziós folyamatok. A bal oldali folyamat a proton-proton lánc, amely a Napban és könnyebb csillagokban zajlik le. A jobb oldalit CNO-ciklusnak hívjuk, ez a Napnál nehezebb csillagok fő energiatermelő mechanizmusa. Ezek mellett több folyamat is lehetséges, például a tripla- α -folyamatban héliummagok egyesülnek szénné, további α -folyamatokban oxigénné és más nehezebb elemekké.

vesszük, hogy ahogy egy gravitáló tömeg a saját gravitációs mezőjében összehúzódik, energia szabadul fel: M tömegű egyenletes sűrűségű R sugarú gömb esetén ez $3GM^2/5R$ felszabadult energiát jelent. Ez alapján a Nap a mostani méretére összehúzódása során felszabadult gravitációs helyzeti energiából kb. 20 millió év óta biztosíthatott ma megfigyelt teljesítményt. Ismerve azonban a Föld korát (vagy akár csak az élővilágét is) ez is kevésnek bizonyul.

1919-ben Russel írta le először, hogy a Nap talán a **hidrogénatomok héliummá egyesülése** során nyeri az energiáját; ezt (a hidrogén jelenlétét) alátámasztani látszott a Napból jövő fény vonalas színképe is. Sokkal később sikerült ennek a magfúzióknak az elméletét is leírni. 1939-ben **Bethe** dolgozta ki az egyik változatot. A probléma az, hogy bár a folyamat energetikailag kedvező, a magok az **elektromos taszítás** miatt nem tudnak közel kerülni egymáshoz, és így egyesülni sem. Ezt a **Coulomb-gátat** kell először legyőzni, amihez hatalmas energiára van szükség: két proton „összeérintéséhez” az $\alpha\hbar c/r$ potenciál alapján kb. 5,3 MeV energiára van szükség (figyelembe véve a proton kb. 1,7 fm átmérőjét). Ez az energia akkor győzhető le, ha a magok **hőmozgása annyira nagy**, hogy az ilyenkor bekövetkező ütközésekkor legyőzhető a Coulomb-gát. A Boltzmann-állandó $8,62 \cdot 10^{-5}$ eV/K értékének ismeretében ehhez tízmilliárd kelvin feletti hőmérsékletre van szükség. Valójában magfizikai számítások alapján tudható, hogy két hidrogén már ≈ 1 MeV energiájú ütközésben is bőven fuzionálni tud, adott hőmérsékletű közegben pedig nem fix a részecskék energiája, hanem Maxwell-Boltzmann-eloszlást követ. Sőt: a kvantummechanikai alagúteffektus miatt még jóval kisebb energiájú ütközésekben is lehetséges a fúzió. Mindezeket figyelembe véve kiderül, hogy az előbb mondottnál jóval alacsonyabb, százmillió kelvin körüli hőmérséklet is elegendő lehet. A Nap felszíni hőmérséklete persze még ennél is sokkal alacsonyabb, csak körülbelül 6000 fok – a belsejében tehát ennél sokkal melegebbnek kell lennie.

A **csillagokban** ténylegesen ilyen fúziós jellegű folyamatok zajlanak le, amelynek a mérége az, hogy négy protonból (hidrogénatommagból) egy ${}^4\text{He}$ atommag keletkezik. Ilyen négyes találkozás igen ritkán következhet be, ezért ezen hidrogénfúzióhoz összetett reakciósorozatra van szükség. További fontos körülmény, hogy a folyamat során két protonnak neutronná kell alakulnia: ez a későbbiekben részletezett gyenge kölcsönhatás által vezérelt folyamat; jellemzően sokkal lassabb, mint a reakciósorozat többi (magerőkön alapuló) részfolyamata; mai tudásunk szerint ez a lépés működik mintegy „szabályozócsapként” a Nap és hasonló csillagok energiatermelésében: enélkül a „lassítás” nélkül sokkal gyorsabban elhasználnák (illetve kisugároznák) a csillagok az összes energiájukat, sokkal rövidebb életűek lennének.

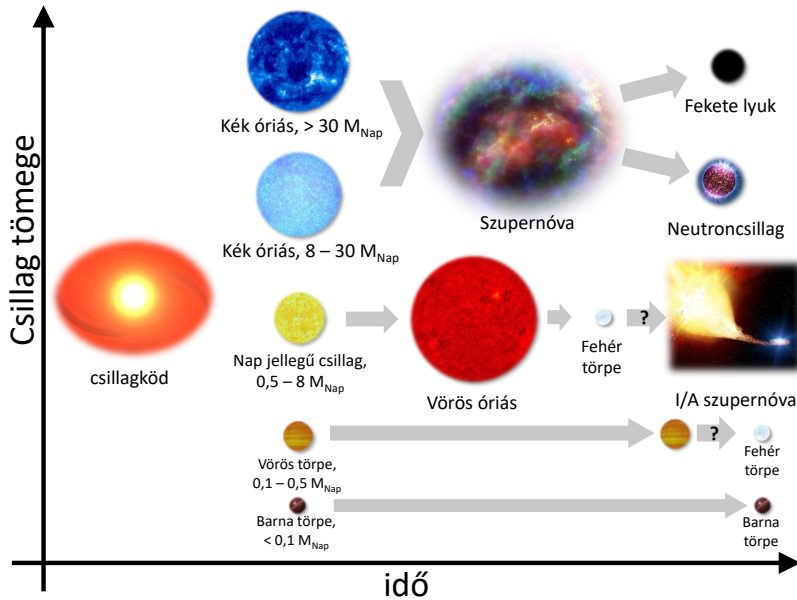
A csillagokban lehetséges fúziós reakciósorozatok közül két lehetőséget mutat az 52. ábra. A Napban a **proton-proton lánc** a fő energiatermelő mechanizmus (10-15 millió kelvin körül, ez alatt drasztikusan lecsökken a reakció bekövetkezési valószínűsége), míg nehezebb csillagokban a **CNO-ciklus** dominál (ezen reakciósorozat intenzitása „meredekebben” függ a hőmérséklettől, nagyobb hőfokon veszi át a „vezetést”). Mindkét folyamatban körülbelül 27 MeV energia keletkezik egy ${}^4\text{He}$ keletkezése során, az ennek megfelelő tömeggel könnyebb ugyanis egy héliummag négy protonnál. Érdekes megemlíteni, hogy mindkét folyamatban keletkezik két neutrínó is. A Nap esetében a



reakció felelős a keletkezett neutrínókért kb. 400 keV neutrínóenergiáig bezárólag, inentől 2 MeV-ig az ${}^{15}\text{O}$ és a ${}^{13}\text{N}$ bomlása, illetve a ${}^3\text{He}$ és a ${}^4\text{He}$ fúziója nyomán keletkező ${}^7\text{Be}$ elektronbefogása (ez utóbbi éles csúcsot eredményez a neutrínóspektrumban, 860 keV körül), efelett a ${}^7\text{Be}$ protonbefogása nyomán keletkező ${}^8\text{B}$ β^- -bomlása (amelyből pedig ${}^8\text{Be}$ keletkezik). A Nap neutrínóspektruma sok mag- és részecskefizikai kutatás szempontjából fontos, ezért is érdemes a fentieket tudni.

A magfúzió vizsgálata azért is fontos, mert ennek segítségével jöttek létre a körülöttünk látható nehezebb atommagok. Történetének első három percében olyan forró volt a Világegyetem kitöltő anyag, hogy az esetlegesen keletkező atommagok egymásba alakultak, illetve szétestek protonokra és neutronokra. A közeg hűlése nyomán ezekből kezdtek el kialakulni az első atommagok (deuteron, triton, hélium stb.), a fúzió adta energiátöbbletet kihasználva. Ezt hívjuk **primordiális nukleosintézisnek**. Ezek az atommagok a Világegyetem pár ezer fokosra hűlése után atomokat és molekulákat hozhattak létre, amelyek gigantikus méretű felhőkbe tömörültek. Ezek a felhők a gravitáció hatására elkezdtek összehúzódni, és az összehúzódástól felszabaduló energia hatására felforrósodtak. A nagyon kicsi, a Nap tizedénél kisebb felhők képtelenek voltak elérni a hidrogénfúzióhoz szükséges hőmérsékletet, és ún. barna törpévé alakultak. Ezek néhány százmillió évig a gravitációs összehúzódás miatt melegek ugyan, de nem eléggé. A nagyobb tömegű csillagoknál már beindulhatott a proton-proton ciklus, hőmérsékletük az összehúzódás során elérte a tízmillió fokot. Ezen a hőmérsékleten a fúzió miatt kiáramló energia hatására kialakul az egyensúly, a gravitáció okozta zsugorodás megszűnik, és a csillag hosszú ideig egyenletesen termeli az energiát.

A legtöbb csillag életének első szakaszában a **hidrogén fúzió** héliummá. Ahogy fogy a hidrogén, néhány milliárd év múltán a hidrogénfúzió csökkenő intenzitása miatt a sugárzás már nem tart ellen a gravitációnak: ez utóbbi összehúzza a csillagot, amittől viszont megnő a hőmérséklet, és az így elért több százmillió fokos hőmérsékleten beindul a **hélium fúziója**, **berilliummá** és **szénné**. Ettől jelentősen megnövekszik a



53. ábra. A csillagok fejlődése. A csillag egyfajta köd gravitációs összehúzódása nyomán jön létre, majd a kezdeti tömegétől függően különböző fejlődési állomásokon megy át. A legkönnyebb és egyúttal leghidegebb csillagokban be sem indul a fúzió, ezeket barna törpének nevezzük. Minél nehezebb és forróbb egy csillag, annál rövidebb ideig él. A könnyű csillagok sokáig élnek, és anyaguk nagy részét levetve fehér törpévé alakulnak (a levetett anyag pedig további csillagok alapanyagául szolgálhat). A nehéz csillagok szupernóva-robbanásban semmisülnek meg, a mag maradványából pedig neutroncsillag vagy fekete lyuk képződik.

belső nyomás, és a csillag felfúvódik, a felszíne pedig kissé lehűl, s ennek következtében vörös színű lesz, ezért **vörös óriásnak** nevezzük. A Nap a számítások szerint mintegy ötmilliárd év múlva ilyen vörös óriás lesz (ekkor a mérete talán a Föld pályájáig is el fog érni, de a Vénuszig biztosan). A csillag ebben az állapotban ismét viszonylag stabil állapotba kerül, egy darabig; amíg el nem fogy a benne lévő hélium. Ekkor újabb gravitációs összehúzódás hatására még nagyobb lesz a hőmérséklet, nagyobb tömegszámú magok egyesülése indul be. A csillag további sorsa a méretétől függ.

A kisebb csillagok az üzemanyaguk elfogyta után lassan **fehér törpévé** zsugorodnak (ezek napnyi tömegű, de Föld méretű objektumok). Ekkor hőmérsékletük már csak pár százezer fok, így energiatermelés nem zajlik bennük, hanem egyszerűen kihűlve fekete törpévé válnak. Ez utóbbi folyamatot azonban nem ismerjük pontosan, mivel az ilyen kicsi (a Nap tömegének felénél kisebb) csillagok olyan lassan fogyasztják el energiájukat, hogy a Világegyetem egyszerűen még nem elég öreg ahhoz, hogy egyetlen ilyen fekete törpe is létrejöhetett volna benne. A fehér törpék létrejötte és fennmaradása azonban jól érthető folyamat. Ezek összehúzódását ugyanis az elektronokra érvényes Pauli-elvből származó hatalmas nyomás, az elektrondegenerációs nyomás gátolja. Ennek oka az, hogy egy adott energiaszinten csak egy (vagy a spint is figyelembe véve kettő) részecske lehet. Ebből adódik az ϵ_F Fermi-energia, az adott részecskeszám mellett betöltött legmagasabb energiaszint, amely termodinamikai (azaz végtelen nagy tekintett térfogatú) határesetben

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \quad (10.16)$$

értéket vesz fel, ha N a részecskeszám és V a rendelkezésre álló térfogat. Ebből itt nem részletezett, de a 4.6. szakaszban tárgyaltakhoz hasonló számítások nyomán megkapható az energiaeloszlás és a teljes energia is, ez utóbbi

$$E = \frac{3}{5} N \epsilon_F \quad (10.17)$$

lesz, és ebből a nulla hőmérsékletre tartozó nyomás is megkapható:

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = \frac{2}{5} \frac{N}{V} \epsilon_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}}{5m} \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3}. \quad (10.18)$$

Hozzáfűzzük a fentiekhez, hogy egyrészt (noha elsőre nem gondolnánk) jogos itt a nulla hőmérsékletű esetet tekinteni: a kritérium ehhez az, hogy a hőmérséklet kicsi legyen az előbb mondott Fermi-energiának (a k Boltzmann-állandó értékét tudva) megfelelő hőmérsékletre képest; ez még a mondott pár százezer fokok esetében is bőven teljesül a fehér törpék sűrűsége esetén. Azt is megjegyezzük, hogy az N/V elektronsűrűségtől való függés $5/3$ helyett $4/3$ kitevőjűre módosul, amennyiben a(z) iméntiekben eleve nem is részletezett) levezetés relativisztikus verzióját vesszük. Ez a nyomás tart ellent a gravitáció összehúzó erejének – de érdekes tudni, hogy ez csak az 1,44 naptömegnek megfelelő ún. Chandrasekhar-határig működik, e fölött az elektronokból származó mondott fajta nyomás, a degenerációs nyomás már nem tudja legyőzni a gravitáció vonzását.

A nagyobb csillagokban a hőmérséklet emelkedése nyomán nehezebb elemek fúziója is lehetségessé válik (lásd a 2. táblázatot). Ezekben a csillagokban az üzemanyag robbanásszerű, hirtelen elfogyása után a csillag **összeroppan**. Egyes speciális csillagok

Fúziós folyamat	szükséges hőmérséklet	időtartam
H → He	70 MK	10 millió év
He → Be, C	200 MK	1 millió év
C → Ne, Na, Mg, Al	800 MK	1000 év
Ne → O, Mg	1600 MK	3 év
O → Si, S, Ar, Ca	1800 MK	3 hónap
Si → Ni, Fe	2500 MK	5 nap

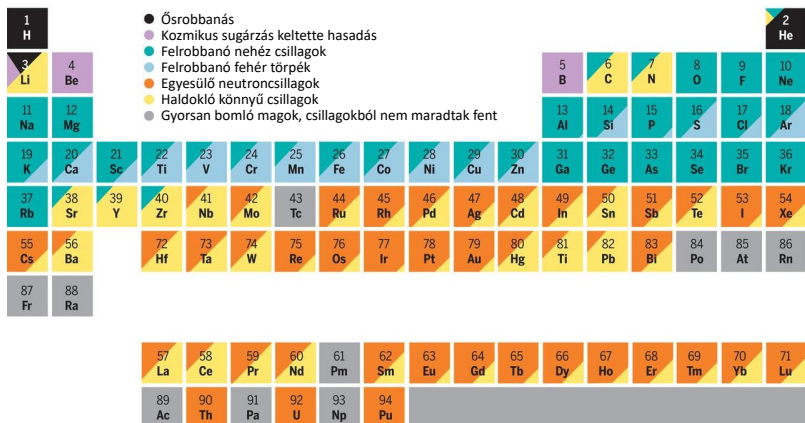
2. táblázat. Egy 25-szörös naptömegű csillag élete, amely a szilíciumégés után szupernóva-robbanással zárul.

életük utolsó szakaszában egy gigantikus méretű termonukleáris bombaként felrobban, és a csillag összes anyaga rendkívül gyorsan vas körüli elemekké alakul át. Ezt a jelenséget **Ia típusú szupernóvának** hívjuk, és kettőscsillag-rendszerekben jönnek létre. Annak köszönhetőek, hogy az egyik (kihunytt) csillag folyamatosan anyagot nyel el a „párjától”, de Chandrasekhar-határ felett nem létezhetnek fehér törpék, és így ezt elérő csillag összezuhan, és az így felszabaduló energia robbanás formájában távozik. Az ilyen típusú eseményeknek nagy jelentősége van a kozmológiában, ugyanis fényességük mindig ugyanakkora, tehát látszólagos fényességük alapján távolságuk kiszámítható – ezért egyik fontos pontját adják a kozmikus távolságok meghatározásában.

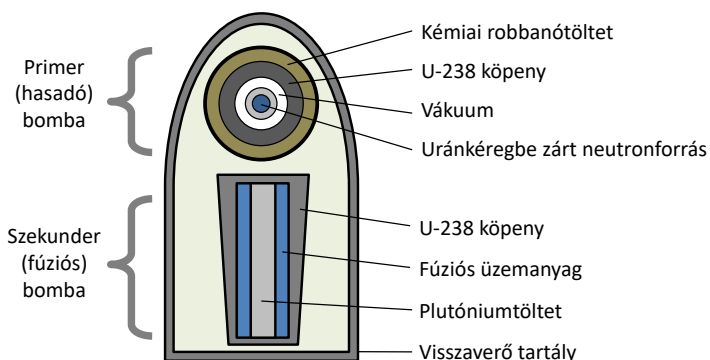
Igazán nagyméretű csillagok nukleáris fűtőanyaguk teljes elhasználása után kompakt objektummá alakulhatnak másfajta szupernóva-robbanások során, ahol a csillag magja roppan össze saját gravitációs súlya alatt. Ezután a maradványokból **neutroncsillag** vagy úgynevezett **fekete lyuk** keletkezhet. A robbanás során (energiabefektetéssel) a **vasnál és nikkelnél nehezebb elemek** is létrejönnek (ami energiabefektetést igényel, ahogy láttuk az előző fejezetben). Ezek aztán szétrepülnek a Világegyetemben, és újabb csillagokba épülnek be, illetve a csillagok körüli bolygórendszerek anyagát fogják alkotni. A Földön lévő szén, oxigén, szilícium, vas is más csillagokban jött létre, a nehezebb elemek pedig ezekben a bizonyos speciális szupernóva-robbanásokban, ahogy azt az 54. ábra mutatja.

10.6. A termonukleáris fúzió

A fentiekben láthattuk, hogy a csillagok hatékonyan szabadítják fel az atommagok egyesítése révén kinyerhető energiát. Az emberiségnek is sikerült ez már részben, békés és háborús céllal is. A **magfúziós energiaszabaduláson** alapuló bombát Neumann János számításai nyomán Teller Ede és Stanislaw Ulam csoportja fejlesztette ki 1951-ben, és 1952-ben végezték az első kísérleti robbantást. 1955-re a Szovjetúnióknak is sikerült kifejleszteni egy hasonló elven működő bombát, később az Egyesült Királyság, Franciaország és Kína is sikerrel járt. A Teller–Ulam-féle „hidrogénbomba” indítója egy hasadáson atombomba, ezzel éri el a megfelelő energiakonzentrációt a fúzió beindulásához, ahogy azt az 55. ábra illusztrálja. A hasadással működő atombomba felszabadult energiája hőenergiaként, javarészt röntgensugarak formájában fénysebességgel terjed (míg az egész szerkezetet végül szétvető lökéshullám ennek töredékével, körülbelül hangsebességgel). A bomba külső köpenye nehézfém (pl. urán) készül, ez a röntgensugárzást visszaveri és a fúziós üzemanyag (szintén nehézfém, leginkább urán) burkolatára „fókuszálja”. Ez utóbbi burkolat eleinte hidegen tartja a benne lévő fúziós üzemanyagot, majd részben



54. ábra. A Naprendszerben előforduló egyes elemek fő forrása az Univerzumban: az ősröb-banás, a kis vagy nagy csillagok fejlődése, szupernóvarobbanások vagy a kozmikus sugárzás. Egyes elemek, noha keletkeznek csillagokban, alacsony felezési idejük miatt csak egyéb forrásból lehetnek jelen a Földön. Az ábra forrása a J. A. Johnson Science **363** 474 (2019) cikke.



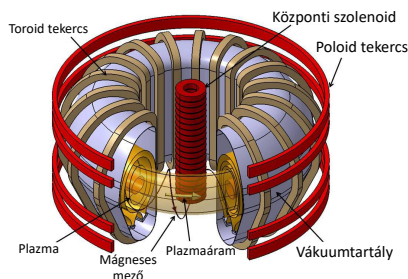
55. ábra. A Teller–Ulam-féle termonukleáris bomba vázlata. A konstrukció működését lásd a szövegben.

elpárologva (mintegy „befelé fordított rakétaként”) kellően összenyomja azt. A fúziós üzemanyag lítium-deutérium keverék (LiD só), ennek közepén egy plutóniumtöltet van, ami ezen a ponton maghasadásos bombaként felrobban, ami a lítiumból neutronokkal tríciumot (T) termel, és az optimális D+T keveréket felfűti a fúzió hőmérsékletére. Az itt lezajló fúzió lényegében az egész rendelkezésre álló D+T üzemanyag-keveréket elfogyasztja, ezzel a bomba által felszabadított energia jelentős részét szolgáltatva. A fúzióban keletkező gyors neutronok végül maghasadásokat indukálnak a fúziós üzemanyag uránköpenyében is: a modern termonukleáris bombák energiájának több mint 50%-át ez utóbbi folyamat adja (ezért kicsit félrevezető a szokásos „hidrogénbomba” elnevezés). Adott nagyságú atomrobbanást a legcélszerűbb és legolcsóbb ilyen termonukleáris fegyverekkel elérni (ha már a technológia ismert): az atomfegyverrel rendelkező országok nagy részének fő csapásmérő ereje ilyen típusú termonukleáris robbanófejekből áll.

A fúziós bombát beindító hasadó bomba előállításához urándúsításra vagy plutóniumtermelésre van szükség, ezért ennek létrehozását könnyű nemzetközi felügyelet alá helyezni. Létezik egy hipotetikus bombafajta, a tisztán fúziós bomba is, amelyben a szükséges millió fokos hőmérsékletet nagy teljesítményű lézerrel vagy más módszerrel hozzák létre. Ebben az esetben radioaktív kihullás sem nagyon keletkezne, csak gigantikus mennyiségű hő. Az ilyen bomba megépítése könnyebben titokban tartható lenne – ugyanakkor szerencsére ennek olyan műszaki akadályai vannak, amelyeket jelenleg még senki sem tudott legyőzni.

A hőmozgáson alapuló fúziós reakciót **termonukleáris fúzió**nak hívjuk. Hogy ez stabilan bekövetkezhessen, az óriási energiasűrűsége, azaz extrém hőmérsékletre van szükség. A Nap belsejében a térfogategységre eső energiafelszabadulás nem túl nagy, köbméterenként kb. 17 watt – ez egy átlagos LED fényforrás jellemző teljesítménye. Ha földi alkalmazásokhoz is jelentős energiafelszabadulást akarunk elérni, akkor még a Nap belsejében lévőnél is nagyobb hőmérsékletet kell létrehozni. Ezt nyilván nehéz megoldani, mert semmilyen tartály nem bír ki ekkora hőmérsékletet, illetve kapcsolódóan nagy nyomást. A csillagokban a gravitáció tartja össze az anyagot, míg a Földön **mágneses térben** lehetséges ezt megoldani, például egy **tóruszban áramló plazma** formájában. Ennek egy megoldását **tokamak**nak hívják (az elnevezés a megfelelő orosz nyelvű kifejezés rövidítéséből állandósult), ilyeneket sikerült már építeni és rövid ideig üzemeltetni (egy tokamak vázlatos rajzát lásd az 56. ábrán). A tokamakban áramló deuteron-triton plazmakeverék kezdeti felhevítését mágnes által indukált árammal végzik. A jelenlegi legnagyobb tokamak a **JET** (Joint European Torus), amely 16 MW teljesítményt tudott leadni egy másodpercig, 24 MW befektetése mellett. Már építik az **ITER** nevű tokamakot is, amely 2027-ben lehet kész, és 1000 másodpercig fog tudni 500 MW energiát termelni, 50 MW befektetése mellett. Ezt követi majd a **DEMO** nevű reaktor, amely 2 GW-ot fog tudni termelni, és a tervek szerint bekapcsolják majd az elektromos hálózatba. Az ITER (és főleg a DEMO) kivitelezése azonban bizonytalan, még számos technikai problémát kell leküzdeni ahhoz, hogy valóban megvalósuljon.

Érdemes megemlíteni, hogy más úton is kutatják a fúzió lehetőségét: például az USA Lawrence Livermore Laboratóriumában kísérleteznek olyan nagy energiájú lézerekkel, amelyek képesek arra, hogy egy D+T golyóra fókuszálva azt befelé összenyomják, annyira, hogy azt a fúzió (ilyenkor rövid) ideje alatt a saját mechanikai tehetetlensége kellően összetartsa. Jelenleg még kérdéses, hogy ezen az elven energiatermelő fúziós reaktor építhető-e. (Az említett amerikai kísérleti eszköz neve National Ignition Facility, „nemzeti begyújtó berendezés”, de más országokban is vannak hasonló kísérletek.



56. ábra. Egy tokamak vázlatja (forrás: Wikimedia Commons). Egy hélikus, spirális mágneses tér alakul ki a tórusz alakú vákuumtartályban, amely fókuszálja és stabilan tartja a százmillió fokos plazmát. Ebben folyamatosan zajlik a fúzió. A tórusz fala elnyeli a fúzióban termelődő hatalmas energiájú neutronokat (ezeket a mágneses tér kiengedi): az itt keletkező hőt lehet(ne) elektromos energiatermelés céljából hasznosítani.

Ezek az ilyen kutatás mellett a hadászati termonukleáris bombák fizikáját is kutatják.) További érdekes megoldás a sztellarátor nevű berendezés, amely bonyolult, egyedi topológiájú mágneses térben áramoltatja a plazmát – erre példa a Wendelstein 7-X nevű eszköz Németországban.

Ha sikerülne bármelyik fent említett megoldással stabilan működő fúziós erőművet létesíteni, igen kedvező feltételekkel (a kinyert energiához képest kevés nyersanyagbefektetés és kevés káros anyag keletkezése mellett) lehetne elektromos energiát termelni. Hasonlítsuk össze a különféle termelési/tárolási módszerekkel egységnyi anyag befektetése mellett kinyerhető energiát:

- Kémiai reakciók: ≤ 150 MJ/kg
- Maghasadás erőműben: 10^6 MJ/kg
- Maghasadás atombombában: 10^8 MJ/kg
- Fúzió: 10^7 – 10^9 MJ/kg
- Anyag + antianyag: $c^2 = 10^{11}$ MJ/kg

Itt természetesen nem mindegy, hogy **milyen anyagot** kell befektetni. A fosszilis tüzelőanyagok **elfogyhatnak** nem túlságosan sokára, az urán lassabban fogy, és helyettesíthető plutóniummal vagy tóriummal, ahogy fent láttuk. Hidrogénből lényegesen több van. Az antianyagot csak az összehasonlítás kedvéért tettük ide – üzemanyagként hasznosítható antianyag mint nyersanyag egyáltalán nem áll rendelkezésre. Fontos szempont még a **hatékonyság** és **károsanyag-termelődés** is – minden szempontból optimális lehetne a fúziós reaktor, azonban egyelőre kétséges, hogy mikorra tudjuk legyőzni a technikai akadályokat. Hangsúlyozzuk tehát, hogy mindenképpen ebben az egyszerű táblázatban mutatott értékeknél alaposabb átgondolást igényel, ha valamilyen energia-termelési mód (egyszer majd talán megvalósuló) hatékony működése mellett érvelünk.

11. A részecskefizika alapjai

Ahogy a korábbi fejezetekben láttuk, az anyag atomokból áll, az atomok pedig protonokból, neutronokból és elektronokból. Felmerül a kérdés, hogy ezek a részek tovább bonthatóak-e – és ahogy kiderült (és ahogy alább valamelyest tovább részletezzük): igen, a protont és a neutront kvarkok és gluonok alkotják, és az erős kölcsönhatás tartja őket össze. A részecskefizika ilyen jellegű kérdéseket tesz fel, azaz hogy mik az anyag alapvető építőkövei, és ezek között milyen kölcsönhatások lépnek fel. Érdemes megemlíteni, hogy az alapvetőnek gondolt építőkövek száma a tudomány eddigi története során mintegy ciklikusan változott: az ókorban négy „elemet” írtak le (föld, víz, levegő, tűz), majd a középkorban rengeteg különböző anyagot ismertek meg. Dalton a sokféle anyagot újfajta módon, vegyületként, kémiai *elemeket* bevezetve írta le: ezekből körülbelül 30-at talált, ahogy a jegyzet elején láttuk. Ilyen elemből egyre többet ismertek meg, a XIX. század végére az elemek periódusos rendszere közel 100 elemű lett. Ezen rendszer szabályosságából jöttek rá, hogy valójában az elemek (atomok) is részekből állnak: elektronok, protonok és neutronok alkotják őket. Ezen három eleminek gondolt rész azonban nem sokáig „maradt egyedül”: a XX. század közepére százas nagyságrendben ismertek meg ezekhez hasonló *hadronokat* és *leptonokat*. Ezeket szintén táblázatokba rendezték, amelyek szabályosságából viszont ezek építőköveire, a kvarkokra következtettek. Eredetileg úgy tűnt, kétféle kvark alkotja az ismert anyagot, mára azonban elemi kvarkból és leptonból is rengeteg fajta ismert – ezeket is táblázatba rendezzük, ez a részecskefizika jelenleg kísérletileg bizonyított részének, az ún. standard modellnek az alapja (ahogy alább kifejtyük). Hogy a történetnek itt vége van-e, avagy az eleminek gondolt részecskék száma nemsokára ismét lecsökken-e (a most „tényleg eleminek” gondolt részecskéink esetleges további belső építőköveinek feltárásával) – ezen kérdés vizsgálata már a részecskefizikusok mai generációinak feladata. Ebben a fejezetben az idáig vezető részecskefizikai felfedezéseket tekintjük át.

11.1. A radioaktivitás felfedezése, sugárzások

A részecskefizika születése tulajdonképpen a különféle sugárzások és a hozzájuk kapcsolódó részecskék felfedezéséhez köthető. Ezek közül elsőként a röntgensugárzást és a radioaktivitást érdemes említeni.

A **röntgensugárzást** a katódsugárzás kapcsán sokan vizsgálták a XIX. században (utóbbit Hittorf és Plücker fedezték fel 1869-ban, és tulajdonságait részletesen tárgyaltuk a jegyzet elején). Tesla a katódsugárzásból **fékezési sugárzást** (szokásos névvel: Bremsstrahlungot) hozott létre. Ez a sugárzásfajta körpályán mozgó és lineárisan gyorsított töltött részecskék esetén is nagyon fontos (részecskegyorsítóknak is, de akár távoli galaxisok „fénye” esetében is). A gyorsuló töltés által kisugárzott teljesítmény ilyen alakban írható lineáris gyorsítás, illetve centripetális gyorsulás (azaz körkörös pályán való egyenesletes mozgás) esetén:³³

$$P_{\text{lineáris}} = \alpha \hbar \frac{2q^2 \dot{\beta}^2 \gamma^6}{3} \quad \text{és} \quad P_{\text{körkörös}} = \alpha \hbar \frac{2q^2 \dot{\beta}^2 \gamma^4}{3}. \quad (11.1)$$

³³ Itt $\gamma = \sqrt{1-\beta^2}$ a Lorentz-faktor, $\beta = v/c$, q pedig a részecske töltése e egységekben; ekkor \hbar és $\dot{\beta}$ egysége miatt a képletek tényleg teljesítmény mértékegységű eredményt adnak. Az elsőben $\dot{\beta}$ ténylegesen a (lineáris) gyorsítás nagysága, a másodikban viszont $c\dot{\beta} = \dot{v}$ a centripetális gyorsulás nagysága, amire tehát $\dot{v} = v^2/r$, ahol r a körpálya sugara.

Röntgen 1895-ben egy fiókban (bőrtokba csomagoltan, azaz fénymentesen) elzárt fotólemezen expozíció nyomait fedezte fel, konkrétan egy kulcs árnyékát. Észrevette, hogy a lemez felett éppen egy ilyen kulcsot tartott, afelett pedig egy (katódsugárzást kibocsátó) Crookes-cső volt. Ez után fluoreszkáló sóval átitatott papírral végzett kísérleteket: katódsugárzás hatására a papír fényleni kezdett, a fény hatására pedig egy elé helyezett vaslemez elfeketedett, sőt, a kezének csontjai is kivehetőek voltak a vaslemezen kialakult képen. Ezzel Röntgen felfedezte a röntgensugárzást (amelyet sok nyelvben x-sugárzásnak hívnak, arra emlékezve, ahogy maga Röntgen elnevezte ezt a sugárzást), és ezért megkapta az első fizikai Nobel-díjat (1901-ben). A felfedezés részleteit lásd Röntgen Nature **53** (1896) 274 cikkében (amely valójában Röntgen eredeti német nyelvű cikkének fordítása). A röntgensugárzásról fontos tudni, hogy – mint nem sokkal később kiderült – elektromágneses sugárzás és az atomok elektronjainak legerjesztése során jön létre (vagy egyéb, elektronok energiaváltozásával kapcsolatos folyamatokban, mint pl. a fékezési röntgensugárzás).

A **radioaktivitást** nem sokkal ez után, 1896-ban fedezte fel Becquerel. Kálium-uranil-szulfátot vizsgált, illetve annak (mint ahogy akkor még hitte) „napfény hatására” kialakuló sugárzását. Egy fotólemezt Becquerel (a borult párizsi idő miatt) napfényes besugárzás nélkül is kidolgozott, és így kiderült, hogy ez az anyag „magától” is sugároz. Ez után mágneses térben vizsgálta az anyag által kibocsátott sugárzást: eltérült, tehát nem lehetett szó röntgensugárzásról. (Így tehát Becquerel tulajdonképpen a β -sugárzást fedezte fel). Ez után többféle sugárzó anyagot is vizsgált, és azt látta, hogy a keletkező sugárzások között többféle fajta van: kétféle irányban is eltérülhetnek mágneses térben, illetve némelyik nem is térül el. Ez alapján háromféle radioaktív sugárzást azonosított (pozitívát, negatívát és semlegest). Azt is észrevette, hogy a sugárzás intenzitása arányos a kibocsátó anyag mennyiségével. Becquerel ezekről felfedezésekről 1896 során hét cikket is írt. Nem sokkal később Marie Skłodowska-Curie (aki Becquerel témavezetésével doktorált) uránszurokércet és a kalkolitot vizsgált (férjével, Pierre Curie-vel is együttműködve), és ezen anyagokat arányosan erőteljesebben sugárzónak találta. Ezekért a felfedezésekért Becquerel és a Skłodowska-Curie házaspár 1903-ban fizikai Nobel-díjat kapott. Marie Skłodowska-Curie további vizsgálatok nyomán fedezte fel a polóniumot és a rádiumot, illetve ez utóbbi elemet izolálnia is sikerült – mindezekért 1911-ben kémiai Nobel-díjat kapott (ahogy az már a 9.1. szakaszban is előkerült).

Az imént említett sugárzásokat 1899-től kezdve Rutherford és Villard is vizsgálta. Villard 1900-ban rádiumot vizsgálva semleges sugárzást talált; ezt, illetve az egyéb sugárzásokat anyagon való áthatolási képességük alapján Rutherford három csoportba osztotta, áthatolóképesség szerint növekvő sorrendben α -, β - és γ -sugárzásnak nevezve el ezeket.³⁴

A γ -sugárzás a röntgensugárzáshoz hasonlóan elektromágneses sugárzás: fotonokból áll, forrása azonban az atommag (és emiatt akár több MeV-es energiájú is lehet, szemben a röntgensugárzásra jellemző néhány vagy néhányszor tíz keV-es energiával). A β -sugárzás részecskéi töltés/tömeg arányuk alapján elektronoknak bizonyultak (amelyeket szintén akkortájt fedeztek fel, amikor a radioaktív sugárzásokat), ahogy az 1.2.

³⁴ Legkevésbé áthatoló tehát az α -sugárzás: a természetes α -sugárzás tipikusan az ember bőrének legfelső, eleve elhalt rétegén sem jut át. A β -sugárzás már áthatolóbb: levegőben néhány tíz cm-t, vagy akár néhány métert is megtehet, nagy mennyiségben az ember bőrén (azt néhány tized mm-ig átjárva) leégéshez hasonló égési sebeket tud okozni. A γ -sugárzás a legáthatolóbb; ólomárnyékolás szükséges az elnyeléséhez, az ember testén pedig a legtöbb γ -sugárzás lényegében átmegy, illetve benne egyenletesen mindenhol adja le az energiáját.

szakaszban részleteztük. 1907-ben pedig Rutherford igazolni tudta, hogy az α -sugárzás héliumionokból áll: a sugárzás részecskéit vékony üvegfalú vákuumcsőben összegyűjtötték, majd szikra segítségével szabad elektronokat keltve semleges atomok alakultak ki, és az így létrejövő gáz (színképvonalai alapján) héliumnak bizonyult. Az α -sugárzás (ahogy a jegyzet elején részleteztük) fontos szerepet játszott az atommag felfedezésében is. Érdekesség, hogy a Relativisztikus Nehézion-ütköztető (RHIC) STAR kísérlete 2011-ben $\bar{\alpha}$ (anti- α) részecskéket is ki tudott mutatni: ezek két antiprotonból és két antineutronból állnak (ahogy az a Nature **473**, 353–356 [2011] cikkben olvasható), és később ezeket a CERN LHC ALICE kísérlete is megfigyelte.

11.2. Részecskegyorsítók és detektorok

Ahogy fentebb (több korábbi fejezetben is) láttuk, az anyag alapvető építőköveinek és az ezek közötti kölcsönhatásoknak feltárásához nagy energiájú részecskékre van szükség. Ilyenek vannak a természetben a **kozmosz sugárzásban**, vagy létrehozhatunk ilyeneket **részecskegyorsítóknak**. Ez utóbbi esetben elektromosan töltött részecskéket (elektronokat, atomokat, ionokat) gyorsítanak fel elektromos tér segítségével extrém energiákra, majd ütköztetik őket (egymással vagy egy álló céltárggyal), és az ütközésekben keletkező részecskéket vizsgálják. Ez a módszer ahhoz hasonló, mint ha az 57. ábrán látható módon két autót ütköztetnénk, majd a kirepülő részeket vizsgálva próbálnánk kitalálni, hogy mi is alkotja az autókat, illetve hogy milyen egyéb tárgyak (például akár biciklik) keletkezhetnek (mintegy véletlenszerűen) a kirepülő roncsokból. Ez utóbbira az ad lehetőséget, hogy ha kellő számú ütközést megvizsgálunk, akkor az igen valószínűtlen folyamatok is egyszer-egyszer bekövetkezhetnek – ezzel kapcsolatban akár például az Eddington „The nature of the physical world” (New York: Macmillan, 1928) című könyvében szereplő „végtelenmajom-tételre” is hivatkozhatunk. Erre alapozva azt mondhatjuk, hogy így noha igen valószínűtlen is lehet akár valamely újfajta részecske létrejötte, néha mégis előfordul.

A részecskegyorsítók lehetnek lineárisak (amelyek egy egyenes pályán gyorsítják fel a részecskéket), illetve körkörösök is. Ez utóbbi esetében a gyorsított részecskéket mágneses térrel tartják körpályán: ekkor az R sugarú körpályán mozgó részecskére az $F = qvB$ Lorentz-erő miatt az egyébként relativisztikusan is érvényes

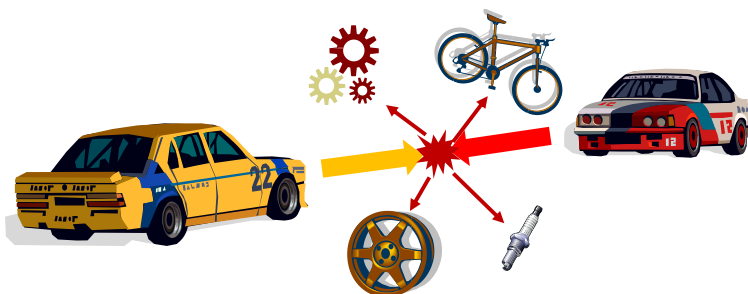
$$p = qBR, \quad \text{avagy} \quad R = \frac{p}{qB} \quad (11.2)$$

formula lesz érvényes. Ennek gyakorlati alkalmazhatóságához érdemes megjegyezni, hogy a mágneses tér mértékegysége (a tesla) elemi töltés egységekben kifejezhető mint

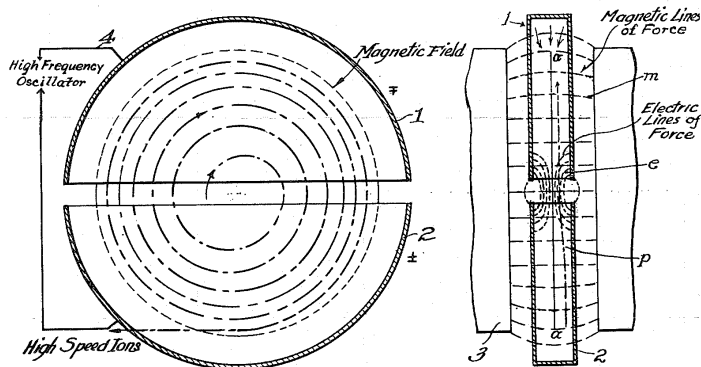
$$1 \text{ T} \approx 0,3 \frac{\text{eV}/c}{\text{nm}} = 0,3 \frac{\text{GeV}/c}{\text{m}}, \quad (11.3)$$

tehát 1 tesla mágneses tér hatására egy 1 GeV/c impulzusú elektron (vagy más, egységnyi töltésű részecske) 3,33 méteres körpályára áll – a mozgás iránya pedig a töltés előjelétől függ. A részecskéket körkörös gyorsítóknak a lineáris gyorsítókhöz hasonlóan elektromos térrel gyorsítják, erre értelemszerűen az $F = eE$ összefüggés érvényes.

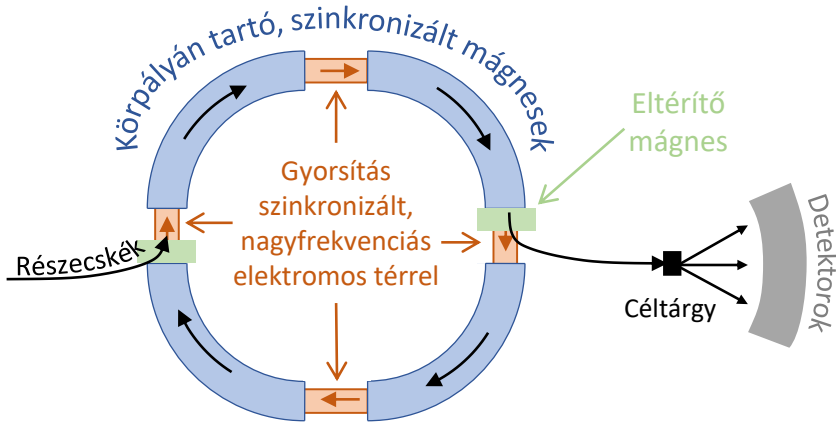
Az első körkörös gyorsítók az úgynevezett **ciklotronok** voltak (lásd 58. ábra), néhány centiméter méretben. Ezekben két félkörben tettek meg egyre nagyobb sugarú köríveket a részecskék, a végén pedig egy céltárgyra vezették a nagyenergiás nyalábot.



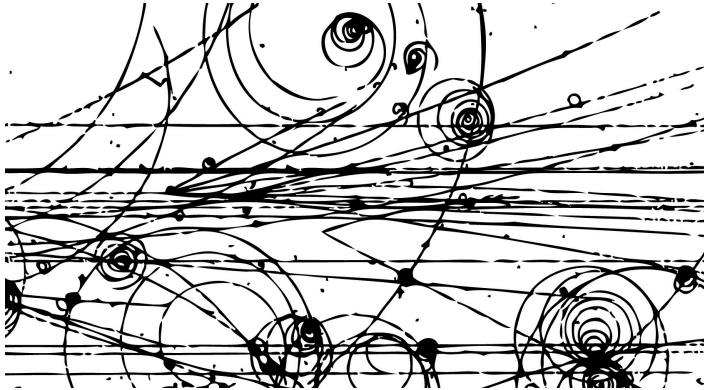
57. ábra. A részecskegyorsítók működési elvének analógiája. Két autót ütköztetve a kirepülő alkatrészekből kitalálhatjuk az autók felépítését, illetve a ritkán keletkező egyéb tárgyak (például az ábrán is látható bicikli) azt is elárulják, hogy egyáltalán milyen tárgyak létezhetnek. Ez persze csak (valaki szerint) mulatságos analógia – de a részecskefizika valóban lényegében ezen az elven működik.



58. ábra. A ciklotron eredeti ábrája, Ernest O. Lawrence 1948384. számú amerikai szabadalma alapján. A bal oldali panelen felülnézetben látható a ciklotron, és a két fele között spirális pályán gyorsuló részecske. A pálya sugara a konstans mágneses tér és a növekvő impulzus miatt nő. A jobb oldali panel az elektromos és mágneses térerővonalakat mutatja. Előbbiek gyorsítják, utóbbiak pályán tartják a részecskéket.



59. ábra. A szinkrotron felépítése. A kék színel jelölt elemek mágneses tér segítségével megvalósítják a körpályát, míg a piros színel jelölt elemek a gyorsításért felelnek. Végül a nyalábot egy eltérítő mágnes segítségével kivezetjük, és egy céltárgynak ütköztetjük.



60. ábra. Egy ködkamra felvétele. Minél jobban görbül egy töltött részecske pályája, annál kisebb volt az impulzusa. A jobbra dőlt „V” alakú alakzatok bomlásoknak felelnek meg: az indulási pontban egy elektromosan semleges (és emiatt nyomot nem hagyó) eredeti részecske bomlott két töltött részecskére (melyek már nyomot hagynak).

A modern körkörös gyorsítók **szinkrotron** technológiával készülnek (lásd 59. ábra), itt állandó sugarú pályán haladnak a gyorsítandó részecskék, végig ugyanabban a csőben, és a pályán tartáshoz szükséges a mágneses teret növelik a gyorsítás során éppen elért energiának megfelelően (azzal szinkronban; innen az elnevezés). Ezekből több kilométeres példányok is készültek; a genfi CERN LHC gyorsítógyűrűje például 26,7 km kerületű, azaz 4,2 km sugarú. A fenti $p = qBR$ formula alapján az ott maximálisan elérhető 7 TeV/c impulzus esetén az ilyen impulzusú protonok mondott sugarú körpályán tartásához kb. 5,5 T mágneses térre lenne szükség; a valóságban az LHC-ben 8,3 T mágneses teret alkalmaznak, ugyanis a pálya nem pontos kör, hanem kisebb (számszerűleg 2,8 km) sugarú rövid körszakaszok váltakoznak rövid egyenes szakaszokkal (melyekben a részecskenyaláb fókuszálására szolgáló mágnesek találhatók). Az LHC-ba nem „álló” protonokat töltenek: több különböző relatíve kisebb szinkrotron gyorsítja fel a protonokat, mielőtt az LHC-be vezetnék őket. Az egyik ilyen előgyorsító a korábban megépített, és önmagában is impresszív SPS (Szuper Protonszinkrotron): ebben 400 GeV/c impulzusra gyorsítanak protonokat. Ezeket részben kivezetik az SPS-ből, és álló céltárgynak (a céltárgy atommagjainak) ütköztetik: az ilyen kísérleti elrendezés neve **fix céltárgyas** elrendezés. Az LHC-ből viszont nem vezetik ki a nyalábot, hogy a céltárgynak ütközzön, hanem két gyorsítógyűrűben egymással szemben keringenek a részecskék (akár sok órán keresztül), és megfelelően irányítva a gyűrűk metszéspontjaiban szembetalálkoznak. Az ilyen elrendezést értelemszerűen **ütközőnyalábos** kísérleti elrendezésnek nevezik.

Igazán nagy (tömegközépponti rendszerből nézve) energiájú ütközéseket ütközőnyalábos kísérletben lehet előállítani: így összeadódik a két nyaláb energiája. A fix céltárgyas elrendezésben az az előnyös, hogy több ütközést tudunk létrehozni: megfelelő (en vastag) céltárgyba ütköztetve lényegében a nyaláb részecskéinek (itt pl. a protonoknak) jó része reakcióba lép a céltárggyal; ütközőnyalábos esetben még nagyon jól fókuszált nyalábok esetén is relatíve igen kicsi a proton-proton ütközés valószínűsége. Fix céltárgyas elrendezésben azonban az ütközőnyalábos esethez képest jóval kisebb lesz a tömegközépponti energia: nemcsak azért, mert eleve csak egy irányból érkezik a gyorsított nyaláb, hanem azért is, mert ilyenkor a tömegközéppont is mozog: rögzített céltárgyas rendszerben hiába ütközik egy E energiájú részecske egy álló céltárgyrészecskének, a tömegközépponti rendszerből nézve az energia itt (a Lorentz-transzformáció szabályainak megfelelően) csak $\sqrt{2ME}$ lesz, ahol M az ütköző részecskék tömege. Ezzel szemben az ütközőnyalábos kísérletekben ilyenkor a teljes energia $2E$ nagyságú – pl. 100 GeV-es protonnyaláb esetén ez 14-szer nagyobb energia, mint amekkorát rögzített céltárgy esetén kaptunk volna.

Érdemes még hozzáfűzni, hogy a részecskegyorsítóknak zajló ütközéseknél fontos mennyiség a tömegközépponti energia négyzete, amelyet az ütköző részecskék p_1 és p_2 négyesimpulzusával

$$s = (p_1 + p_2)^2 \quad (11.4)$$

módon adunk meg. A tömegközépponti energia ekkor $E_{\text{tkp}} = \sqrt{s}$. Atommagok ütközésekor ezen kívül definiáljuk az egy nukleonpárra jutó

$$\sqrt{s_{NN}} = \sqrt{(p_{N1} + p_{N2})^2} \quad (11.5)$$

energiát, ahol p_{N1} és p_{N2} a gyorsított atommagok egy-egy nukleonjának impulzusa.³⁵

³⁵ Mind s , mind s_{NN} relativisztikusan invariáns mennyiségek, hiszen négyesvektorok Lorentz-négyzetei szerepelnek bennük.

Az alapkutatást szolgáló részecskegyorsítók célja nagyenergiás részecskeütközések létrehozása, és ezáltal az anyag építőköveinek tanulmányozása. Az 1950-es és 1960-as évek óta a kutatások egyik fő iránya az, hogy minél több új részecskék találjunk, és ezeket megszerezni tudjuk. Részecskegyorsítókkal azonban a **hétköznapokban** is találkozunk: a régi (katódsugárcsőes) tévék és monitorok elektronokat gyorsítanak (lineárisan), és ezekkel keltenek fényt a képernyőn. A röntgensugárzás **orvosi célú** felhasználásához szintén elektronokat kell gyorsítani. Daganatos betegségek kezelésére használnak gyorsított protonokat is. A PET-vizsgálatokhoz szükséges (pozitronsugárzó) izotópokat manapság szintén orvosi célú gyorsítóknak (ciklotronoknak) állítják elő. A gyorsítóknak ezeken kívül is még sok más orvosi és technológiai alkalmazása van, illetve ezen alkalmazások száma növekszik is.

A részecskefizikai kutatások során az ütközésekben létrejött új (azaz az ütközésben eredetileg jelen nem lévő) részecskéket szükséges tanulmányozni – ehhez azonban először észlelni kell őket, amihez megfelelő **részecskedetektorok** kellenek. Ilyen például a **kőd kamra** (amelyet Wilson alkotott meg, és ezért Nobel-díjat kapott 1927-ben), ahol az áthaladó részecske pályája mentén a túlhűtött (túltelített gőzt tartalmazó) kamrában pára kicsapódás jön létre, így láthatóvá válik a részecske nyoma (lásd 60. ábra). A **buborékkamrákban** (amelynek megalkotásáért Glaser kapott Nobel-díjat 1960-ban) pedig túlfűtött (azaz a felforrás határán egyensúlyozó) folyadékban gőzbuborékok keletkeznek a részecskepálya mentén. Az **ionizációs kamrában** a részecskepálya ionizálja a gázt, a töltött ionokat és keltett elektronokat pedig elektromos katód-, illetve anódvezetékekkel észlelhetjük. Szikrakamrákban nagyfeszültséget feszítenek ki fémek között, és a részecske áthaladása hatására keltett ionizáció miatt szikrakisülés következik be. Emulziós detektorokban az áthaladó részecske (a fény fotolemezre gyakorolt hatásához hasonlóan) látható nyomot hagy. Ma a **sokszálas gáztöltésű detektorok** és a **félvezető** anyagból készült **detektorok** a legelterjedtebbek. Az előbbiért Charpak kapott Nobel-díjat 1992-ben: az ilyen detektor lényegében az ionizációs kamrához hasonlóan működik, de alkalmasabb a gyakori (nagy adatmennyiség automatikus kiolvasását igénylő) vizsgálatokhoz. Utóbbiakban az áthaladó részecske lecsökkenti a detektor félvezető anyagának ellenállását; ezt mérve szintén nyomon követhetjük a részecskék pályáját.

Minden említett detektortípus a részecskék anyaggal való kölcsönhatásán alapszik. A kölcsönhatás során történő energialeadás főbb mechanizmusai a részecske töltésétől, fajtájától és energiájától függenek. Töltött részecskék az atomi elektronokkal való rugalmatlan ütközésekkel és kis részben a magokkal való rugalmas ütközésekkel veszítenek energiát (de az elektronokkal történő kölcsönhatás lényegesebb).³⁶ Fontos továbbá a Cserenkov-sugárzás, amelyet a fény közegbeli fázissebességénél gyorsabban haladó részecskék bocsátanak ki; főleg elektronok esetén a fékezési sugárzás; hadronok esetén pedig a különféle magreakciók, hadronikus reakciók, illetve könnyű (gyors) részecskék esetén az átmeneti sugárzás is (amelyet közegethárón bocsátanak ki a részecskék).

Töltött részecskék közegben való, az elektronokkal való kölcsönhatásra épülő energialeadására (ami nem túl nagy energiájú részecskék esetén a legfontosabb effektus) jó közelítés az ún. Bethe–Bloch-formula, amely a dx távolságegységenkénti dE energiale-

³⁶ Visszaemlékezhetünk (lásd az 1.5. szakaszt), hogy a Rutherford-kísérletben, mely (éppen ahogy azóta tudjuk) az α -részecskék aranyatommagokon való szórásán alapult, vékony aranyfóliára volt szükség. Nem eléggé vékony fólia esetén az α -részecskék lényegében kontrollálatlanul elveszítenék az energiájukat az anyag (az aranyfém) elektronjaival való kölcsönhatással, így lehetetlenné válna annak a kísérlet szempontjából lényeges folyamatnak a vizsgálata, amikor az atommagokon az eredeti, fix energiájú α -részecskék szóródnak.

adást adja meg:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n}{m_e c^2} \left(\frac{q\alpha\hbar c}{\beta} \right)^2 \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 E_{\max}}{I^2 \cdot (1 - \beta^2)} \right) - \beta^2 \right], \quad (11.6)$$

ahol q a részecske töltését, $\beta = v/c$ a sebességét adja meg, n a közeg elektronjainak számsűrűsége, míg I a közeg átlagos gerjesztési potenciálja (ez jó közelítéssel a közeg átlagos rendszáma, Z , szorozva 10 eV energiával), E_{\max} pedig az egy ütközésben átadható maximális energia (ez elektronnál lényegesen nehezebb részecskékre jó közelítéssel $2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2$, ahol $\gamma = \sqrt{1 - \beta^2}$ a Lorentz-faktor.) Sokszor ezt a formulát a közeg sűrűségével elosztva adják meg, és így a tényleges energiavesztéshez még a sűrűséggel is szorozni kell – így ugyanis a különféle közegek jobban összehasonlíthatóak. A legkisebb energiavesztés („minimum ionizáció”) $\gamma\beta \approx 3$ esetén következik be, ennek értéke kb. 2 MeV/g/cm², azaz 1 g/cm² tömegsűrűség esetén a lehető legkisebb energiavesztés (a mondott megfelelő sebesség esetén) kb. 1 MeV/cm.

A semleges részecskék energialeadása ettől eltérő. Fotonok esetében a legfontosabb a fotoeffektus, a Compton-effektus, a párkeltés, a Rayleigh-szórás és egyes magreakciók. Tömeges semleges részecskék esetében a magon történő (rugalmas vagy rugalmatlan) szórás fontos, illetve neutronok esetén a hasadás és befogás, de egyéb magreakciók és hadronikus kölcsönhatások is elképzelhetőek.

A fentebbiekben említett, nyomkövetésre alkalmas detektorok (ködkamra, ionizációs kamra, buborékkamra stb.) működése mindegyik esetben azon alapszik, hogy az elég gyors töltött részecske (a Bethe-formulából látható mértékben) ionokat kelt a pályája mentén az anyagban. Ezen ionok aztán már olyan folyamatokat (ködkicsapódást, forrást, vezetőképesség megnövekedése miatti kisülést stb.) hoznak létre az anyagban, melyek már láthatók vagy „láthatóvá” (érzékelhetővé) tehetőek. Ha a nyomkövetésre alkalmas detektorok **mágneses térben** vannak, akkor a rajtuk keresztülhaladó részecskék pályája elgörbül. Ezért nyomukat követve **a pálya görbületéből** (a fent említett $p = qBR$ összefüggésből) kikövetkeztethető az impulzusuk. A nyomuk „erőssége” többnyire az energiájukkal van kapcsolatban, e kettő (az energia és az impulzus) pedig lehetőséget adhat a különféle részecsketípusok megkülönböztetésére. A sebességüket is mérhetjük, mindezekből pedig a tömegük és a töltésük is meghatározható, azaz a részecskék **beazonosíthatóak**. Végső soron a fenti detektorok – és a velük végzett mérések – minden kísérleti részecskefizikai kutatás alapjai.

Ahogy az atomfizikai fejezetben is olvastuk, az atommag felfedezése úgy történt, hogy nagyenergiás α -részecskékkel bombáztak aranyatommagokat. Az eltérült (szórt) részecskék eloszlása aztán azt mutatta, hogy az atom tömegének java része egy parányi központi régióban, az atommagban koncentrálódik (lásd a 9.2. fejezetben). Azt mondhatjuk tehát, hogy ezen nagyenergiás részecskékkel **beleláttunk** az atom szerkezetébe. Ahogyan azonban **a fény hullámhossza korlátozza** a fényvel megfigyelhető méretskálát (a mikrométernél kisebb skálán már fényinterferencia lép fel; fénymikroszkóppal nem figyelhetőek meg ilyen kicsi objektumok), úgy részecskenyalábokra is érvényes egy hasonló összefüggés: a feltárandó méretskála a bombázó részecske kvantummechanikai hullámhosszánál nem lehet kisebb. A **hullámhossz** és az **impulzus** pedig az ismert $\lambda = h/p$ módon függ össze; a részecske m tömegéhez (illetve mc^2 nyugalmi energiájához) képest nagy energián ez $\lambda = hc/E$ módon egyszerűsödik (ugyanis nagyenergiás részecskék esetén az energia és az impulzus a relativitáselmélet szerint közel megegyezik, pontosabban $E \approx pc$). Ha elektronokra gondolunk, akkor (mivel a hc szorzat értéke

1,24 GeV·fm), így az **1 fm méreetskálához** (az ilyen skálán való vizsgálódáshoz) nagyságrendileg **1 GeV-es elektronnyalábra** van szükség. Az atommag alkotórészeinek szerkezetvizsgálatához tehát ekkora energiára gyorsító berendezések kellenek.

Gyakorlófeladat

Észlelünk egy egységnyi pozitív töltésű részecskét, amely haladására merőleges, 1 tesla nagyságú mágneses tér hatására 2 méter sugarú körpályára áll. Mekkora lehetett az impulzusa? Ha a részecske energiájának mérésekor kb. 1,1 GeV adódik, akkor mekkora a tömege? Mindezek alapján vajon melyik részecske lehetett ez?

11.3. Történelmi jelentőségű részecskefizikai felfedezések

11.3.1. A pozitron

A Schrödinger-egyenlet első körben jól írja le a hidrogénatom elektronjának energiaszintjeit, és rengeteg egyéb atomi jelenségre is helyes magyarázatot ad. Ugyanakkor nemrelativisztikus közelítésben érvényes csak, illetve a spint is csak a Pauli-mátrixok „hozzáadásával” tudja leírni. Ezen problémák megoldásaként alkotta meg Dirac a Proc. R. Soc. Lond. **A117** (1928) 610 cikkében a **Dirac-egyenletet**, amely relativisztikus (azaz a speciális relativitáselmélethez illeszkedő szimmetriájú) egyenlet, és számtalan érdekes megfigyelésre választ adott.

A Schrödinger-egyenlet kézenfekvő relativisztikus általánosítása az ún. Klein–Gordon-egyenlet, amelyet a magerő tárgyalásakor is említettünk: ez azonban másodrendű deriváltakat tartalmaz térben és időben is; kiderül, hogy az utóbbi körülmény vezet problémákhoz, ugyanis ilyen egyenlet esetében az egyenlet által leírt mező és annak időderiváltja is tetszőleges kezdőfeltételként megválasztható. Ezért Dirac más úton keresett relativisztikusan invariáns kvantummechanikai hullámeqyenletet: a Klein–Gordon-egyenletben szereplő energiaoperátornak (mely lényegében $-\hbar^2\Box$, ahol $\Box = \frac{1}{c^2}\partial_t^2 - \Delta$ a d’Alembert-operátor vagy hullámoperátor) a „négyzetgyökét” vette. Az derül ki, hogy ezen négyzetgyök formálisan $\hbar(A_i\partial_i + iA_0\partial_t/c)$ alakban felírható, ha az itt szereplő A_i ($i = 1, 2, 3$) és A_0 mennyiségekre a következő relációk teljesülnek:

$$\{A_i, A_j\} \equiv A_iA_j + A_jA_i = 2\delta_{ij}, \quad A_0^2 = 1, \quad A_0A_i + A_iA_0 = 0; \quad (11.7)$$

ekkor tehát a felírt operátor négyzete tényleg éppen $-\hbar^2\Box$ lesz. Ezen A_0, A_i mennyiségekre tehát ilyen „antikommutációs” relációk kell hogy teljesüljenek: ezeket teljesítő számok vagy számértékű függvények persze nincsenek; az A_0 és az A_i mennyiségek tehát mátrixok kell hogy legyenek. Ezekből születnek a γ^μ Dirac-mátrixok (ahol a relativisztikus μ index 0,1,2,3 lehet, a 0 a t koordinátaéhoz, a többi pedig a térkoordinátákhoz tartozó index), a $\gamma_0 \equiv A_0$, $\gamma^i \equiv -iA_i$ megfeleltetéssel: ezekre az lesz így igaz, hogy

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\text{id}, \quad \text{ahol } g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Itt $g^{\mu\nu}$ a relativitáselmélet Minkowski-féle metrikus tenzora, id pedig a γ^μ mátrixok értelmezési vektorterén ható egységmátrix; ez kell ide, ha már nem számokat, hanem mátrixokat keresünk a fenti antikommutációs relációk megvalósítóiként.

Sokféle módon megadhatók olyan γ^μ mátrixok, amelyek teljesítik ezt a relációt. A legkézenfekvőbb 4×4 -es mátrixokat venni (ekkor $\text{id} \equiv \text{id}_4$ a 4×4 -es egységmátrix lesz); ezen belül is egy lehetőség a sok közül az, ha (2×2 -es blokkmátrix módjára írva, a 2×2 -es id_2 egységmátrixot és a σ_i Pauli-mátrixokat használva) a

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \text{id}_2 & 0 \\ 0 & -\text{id}_2 \end{pmatrix}, \quad \text{illetve} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (11.8)$$

választást tesszük. A Dirac-egyenlet tehát az eddig mondottakat összefoglalva a következő alakban adódik:

$$i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi - mc\psi = 0, \quad (11.9)$$

a ψ hullámfüggvény pedig (a γ^μ mátrixok 4×4 -es voltának megfelelően) már nem egy- vagy két-, hanem négykomponensű mennyiségek (ún. Dirac-spinorok).

Dirac rögtön ezen egyenlet levezetése után belátta, hogy negatív energiájú megoldások is lehetségesek: ezért arra gondolt, hogy a vákuum valójában teljesen betöltött negatív energiájú állapotok tengere, és minden további elektron már pozitív energiájú lesz – a tengerbeli „szigetek” vagy „lyukak” pedig pozitív töltésű állapotok lehetnek, amelyeket a proton valósíthat meg. Weyl, Oppenheimer és Dirac munkája nyomán azonban kiderült (illetve a Proc. R. Soc. A133, 60 cikkben Dirac publikálta), hogy a proton helyett az egyenlet tulajdonképpen megjósolja egy új részecske létezését: ez a pozitron, az elektron antirészecskéje.

Az elméleti és a kísérleti fizika közös diadalaként végül Anderson 1932-ben ténylegesen felfedezte a **pozitront**, ahogy a Phys. Rev. **43** (1933) 491 cikkében leírja (bár mások is végeztek hasonló kísérleteket hasonló eredménnyel); érdekesség, hogy magát a pozitron szót a Physical Review szerkesztője javasolta. Anderson kísérleti elrendezése egyszerű volt koncepcionálisan: Wilson-féle ködkamrát használt, benne egy 6 mm-es ólomlemezrel. A kozmikus sugárzás (amelyet Hess fedezett fel 1912-ben, és Nobel-díjat is kapott érte 1936-ban) részecskéi behatolnak a ködkamrába, és mágneses tér hatására csigavonal alakú jellegű nyomot hagynak benne; az ólomlemez azt segít eldönteni, hogy a részecskék alulról vagy felülről jönnek (ugyanis az ólomban energiát veszítenek, így pályájuk a $p = qBR$ összefüggés miatt kisebb sugarú lesz az ólmon való áthaladás után). A görbület iránya a töltéstől függ, a nyom vastagsága pedig a részecske áthatolóképességétől, így Anderson be tudta látni, hogy az elektronnal azonos tömegű és ellentétes töltésű részecskét talált. Korábban Frédéric és Irène Joliot-Curie is talált ilyen nyomokat, de ők protonnak hitték ezeket (és így más témában kaptak végül kémiai Nobel-díjat), Patrick Blackett pedig később publikálta párhuzamosan elért eredményeit (és így ő is másért kapott Nobel-díjat, többek között a kozmikus sugárzás vizsgálatáért és a ködkamrával kapcsolatos fejlesztéseierért).

11.3.2. A müion és a neutrínók

Anderson (Neddermeyerrel együtt) egy másik részecske felfedezéséért is „felelőssé tehető”: ez pedig az elektron nehezebb „testvére”, a **müion**. A ködkamrában a müion az elektron és a proton között helyezkedett el a pálya jellegzetességeit illetően (azaz a töltés/tömeg arány tekintetében), ezért mesotronnak nevezték el. A müion létét végül Street és Stevenson igazolták Phys. Rev. **52** (1937) 1003 cikkükben, szintén ködkamrával végzett kísérleteik eredményét bemutatva. A müiont sokáig μ -mezonnak is hívták,

ugyanis a sok felfedezett mezon egyikének hitték; később derült ki, hogy valójában elemi fermion, és az elektronhoz hasonló. Tömege ugyanakkor sokkal nagyobb, $105,7 \text{ MeV}/c^2$, és instabil (elektronra és neutrínókra bomlik), felezési ideje $2,2 \mu\text{s}$. Mágneses momentumához $g_\mu \approx 2$ giromágneses faktor tartozik, ugyanakkor az anomális mágneses momentum $a_\mu = (g_\mu - 2)/g_\mu$ értéke $0,001166$, azaz nem egészen egyezik az elektronnal (amely négy értékes jegyre kerekítve $0,001160$), és ma is kísérleti és elméleti kutatások tárgyát képezi, ahogy azt a 7.8. szakaszban is tárgyaltuk.

A részecskefizika történetének további nagyon fontos fejezete volt a **neutrínók** felfedezése. Ezek létezésére Pauli tett javaslatot, a β -bomlás spektrumának magyarázata miatt. A β -bomlásban keletkező elektronok a kísérleti megfigyelés szerint folytonos energiaeloszlással (spektrummal) keletkeznek, holott amennyiben egy határozott anyatommag bomlana egy határozott leánymagra és egy elektronra (pl. egy $n \rightarrow p + e^-$ reakcióban) az elektron energiája jól meghatározott érték kellene hogy legyen (hasonlóan az α - és γ -részecskék spektrumához). Ugyanis (pl. az említett neutronbomlás esetére gondolva) az energiamegmaradás alapján a neutron nyugalmi rendszerében $m_n c^2 = m_p c^2 + m_e c^2 + E_{\text{kin}}$ teljesül (ahol E_{kin} a proton és az elektron összes mozgási energiája), míg az impulzusokra a $p_p = -p_e$ összefüggés teljesül ugyanitt. Ebből az elektron teljes (nyugalmi és mozgási) energiájára

$$E_e = \frac{m_e^2 + m_n^2 - m_p^2}{2m_n} c^2 \approx 1,3 \text{ MeV} \quad (11.10)$$

adódna. Az elektronok észlelt energiaspektruma ugyanakkor folytonos, és éppen a fenti érték körül csökken le nullára.

Bohr ennek magyarázatára már készen állt, hogy azt gondolja, hogy az energiamegmaradás nem teljesül minden egyes részecskereakcióban, hanem csak statisztikus jelleggel. Pauli viszont abból indult ki, hogy ha kettő helyett három részecske keletkezik, akkor az egyik megfigyelt részecske (az elektron) energiaspektruma lehet folytonos, hiszen ilyenkor a bezárt szögektől függ a részecskék energiája, és sokféleképpen is teljesülhet az energia és az impulzus megmaradása. Ezért egy új részecskét tett fel,³⁷ amelyet neutronnak nevezett el 1930-ban (ekkor még a ma ismert „valódi” neutron felfedezése előtt járunk). A neutrínó szót Fermi vezette be 1932-ben (miután Chadwick felfedezte a „nehéz neutron”, azaz a ma is neutronnak hívott részecskét), és 1933-tól már Pauli is a neutrínó elnevezést használta. Fermi írta le a β -bomlás $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$ módját 1934-ben – azonban kéziratát a Nature visszadobta azzal, hogy túl messze áll a valóságtól, és a fizikus közösséget sem mozgatta meg túlságosan elmélete (később, a gyenge kölcsönhatás vizsgálatok azonban alapvető jelentősége lett).

Megemlítjük, hogy a neutrínó ilyen bevezetése az impulzusmomentum megmaradási törvényét is „helyrebillentette”: a $n \rightarrow p + e^-$ reakcióban enélkül ez nem teljesülhetne (merthogy egy feles spinű részecske bomlana két darab feles spinűre). Azonban a neutrínó olyan részecskének bizonyult, ami nagyon gyengén hat kölcsön mindenfajta más részecskével; a neutrínókutatást ez teszi kihívássá. A neutrínót közvetlenül csak 1956-ban sikerült felfedezni, a híres Reines–Cowan-kísérletben (lásd a Science **124** [1956]n103 cikket), amelyért 1995-ben Reines kapott Nobel-díjat (Cowan eddigre elhunyt). A kísérlet alapja az inverz β -bomlás volt, amelyben a $\bar{\nu} + p \rightarrow n + e^+$ reakció játszódik le.

³⁷ Látjuk tehát, hogy miért olyan népszerű a „találjunk ki egy újabb részecskét” gondolat ma is a részecskefizikában – a XX. század első felében számtalanszor vezetett sikerre ez az elképzelés.

Az (anti)neutrínók forrásaként egy atomreaktort használtak, amelyből (a hasadási termékek intenzív β -bomlása miatt) neutrínók léptek ki, a kísérlet helyén $5 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$ neutrínófluxust biztosítva. (Ez az érték tehát a szokásos radioaktív forrásokénál sokkal magasabb). Két nagy (összesen 200 literes) víztartályt helyeztek el a reaktor közelében, amelyben a protonok szolgáltatják a céltárgyat a neutrínók számára. A reakcióban keletkező pozitronok elektronokkal találkozva fotonpárt hoztak létre, az ezek annihilációjából ($e + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$) keletkező fotonokat a két tartály közötti, illetve őket körül is vevő folyékony szcintillátorral észlelték. A kísérlet talán legfontosabb eleme azonban a neutronok egyidejű észlelése volt: ennek érdekében 40 kg kadmium-kloridot (CdCl_2) oldottak fel a vízben, amelyből a Cd elnyelte a neutronokat (nagyon nagy az erre vonatkozó hatáskeresztmetszete), és így eggyel nagyobb tömegszámú izotópot hozott létre, amely kisvártatva (μs időskálán) γ -bomlással alapállapotba került. A neutrínó szignatúrája tehát három foton észlelése volt: kettő a pozitron annihilációjából, egy pedig a neutronelnyelés nyomán. Az első, 1953-as hanfordi kísérletek után a Savannah River-i reaktorhoz tették át a kísérletet, és itt az utólagos adatelemzés óránként átlagosan 3 neutrínóeseményt mutatott ki (szemben a reaktor lekapcsolt állapotában észlelt 0 neutrínóeseménnyel). Valójában itt az antineutrínót mutatták ki – az még ma sem világos azonban, hogy nem azonos-e a kettő. Ez utóbbi kérdést többnyire neutrínómentes kettős β -bomlás keresésével vizsgálják, ez ugyanis csak akkor lenne lehetséges, ha neutrínó önmaga antirészecskéje lenne. Jelenleg úgy tűnik, hogy ez a bomlás nem következik be, és így a neutrínó és az antineutrínó különbözik – a kísérleti eredmények egy nemrégii összegzését lásd például a GERDA kísérlet Phys.Rev.Lett. **120** (2018) 132503 publikációjában. Az első neutrínót (ha különbözik az antineutrínótól) 1965-ben mutatták ki, egy dél-afrikai aranybányában, kozmikus sugarakat vizsgálva (lásd Reines és munkatársai Phys.Rev.Lett. **15** [1965] 429 cikkét).

Az előző bekezdésben ismertetett kísérletek az elektronnal kölcsönható neutrínót (ν_e) mutatták ki – 1962-ben kiderült, hogy létezik egy másik fajta is, a **müion-neutrínó** (ν_μ). Ledermann, Schwarz és Steinberger a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium AGS gyorsítójának protonjait használták, amelyek π -mezonok záporát hozták létre, ahogy az a kísérletek eredményeit leíró Phys. Rev. Lett. **9** (1962) 36 cikkükben szerepel. A pionok kb. 20 méter repülés után egy többezer tonnás acélfalba ütköztek, de sokan közülük még előtte müionokra és neutrínókra bomlottak (a pion jellemzően néhány méteres út megtételének megfelelő felezési idővel bomlik, jellemzően müionra). Ezekből csak a neutrínók tudnak áthatolni az acélfalon: a kísérletben ezek ezután egy neonnal töltött szikrakamrába érkeztek. Itt a neutrínók egy alumíniumlemezeze érkeztek, ahol müionokat keltettek, és ezeket észlelték a kísérletben. Mivel bebizonyosodott, hogy ezek a neutrínók kimondottan müionokat keltenek, így az elektron-neutrínóval semmiképpen sem lehetnek azonosak. A kísérletekért Ledermann, Schwarz és Steinberger 1988-ban Nobel-díjat kaptak. Így tehát már négy lepton (azaz könnyű részecske) is ismert lett: az elektron, a müion és neutrínóik (és ezek antirészecskéi is).

11.3.3. A τ -lepton

Az elméleti kutatások nyomán 1960 óta világos volt, hogy kell lennie egy harmadik fajta leptonnak (többek között Antonino Zichichi és bolognai csoportja munkája nyomán, aki ezt igazoló kísérletet is indított, amely azonban nem rendelkezett elég energiával a kérdéses részecske megtalálásához). A „hiányzó” leptont végül Perl fedezte fel, a Stanfordini Lineáris Gyorsítókomplexum (SLAC) SPEAR elektron-pozitron ütköztetőjé-

nél (lásd a Phys.Rev.Lett. **35** [1975] 1489 cikket, illetve az 1977-es Moriond konferencia SLAC-PUB-1923 azonosítójú publikációját). Valójában nem közvetlenül észlelték a τ -leptonnak elnevezett részecskét, hanem több (szám szerint 64) olyan eseményt észleltek, ahol az annihilációból elektron-müon pár keletkezett, illetve legalább kettő további, nem észlelt részecske. Azt gondolták, hogy az $e^+ + e^- \rightarrow \tau^+ + \tau^- \rightarrow e^\pm + \mu^\mp + 4\nu$ reakció zajlik le, amelyet később további (többek között a hamburgi DESY-ben elvégzett) kísérletekkel sikerült igazolni. A τ -részecske felfedezéséért Perl 1995-ben Nobel-díjat kapott (Reinesszel megosztva). A τ -lepton tömege $1777 \text{ MeV}/c^2$ értékűnek bizonyult, élettartama $2,9 \cdot 10^{-13}$ másodperc (és többféle bomlása van; jellemzően pionok vagy müonok keletkeznek ezekben). Ehhez a leptonhoz is tartozik neutrínó, a ν_τ , amelyet a CERN LEP 1989-es kísérleteiben fedeztek fel, de az első közvetlen észlelése a Fermilab DONUT kísérletének sikerült 2000-ben, az eredményeiket pedig a Phys.Lett. **B** 504 (2001) 218 cikkben foglalták össze. Ezzel lezárult a ma is ismert hat töltött lepton (e , μ , τ , kétféle töltéssel) és a kapcsolódó hat neutrínó felfedezése.

11.4. Különbféle hadronok felfedezése, a kvarkmodell

11.4.1. A pion és a V-részecskék

A leptonok felfedezése után forduljunk az egyéb fajta részecskék felé! Elsőként említendő a legkönnyebb hadron (azaz a protonhoz és a neutronhoz hasonló, kvarkokból álló részecske), a pion, amely már a magerő tárgyalásakor is előkerült. Yukawa megjósolta, hogy a magerőt egy $100 \text{ MeV}/c$ körüli tömegű részecske közvetítheti. Eleinte a müont tekintették úgy, mint a magerő közvetítőjét. Később azonban kiderült, hogy a müon a magerőhöz hasonló kölcsönhatásokban nem vesz részt, így mást kellett keresni. A „célnak megfelelő” π -mezont (avagy piont) többen is észlelték, Chowdhuri, Powell, Lattes, és mások is vizsgálták a kozmikus sugárzást fotoemulziókkal, és ebben sikerült a töltött pionokat (π^\pm) azonosítaniuk. A pionok nyomainak jellegzetessége az volt, hogy egy hasonló, de kisebb impulzusú nyomban folytatódtak, egyfajta „dupla mezon nyomot” hagytak (ahol a második részecske a müon volt). 1948-ban aztán Lattes és Gardner a Berkeley ciklotronban mesterségesen is előállítottak pionokat (α -részecskék szénatomokra bombázásával). 1950-ben Cecil Powell Nobel-díjat kapott mindezekkel (de elsősorban a fotoemulziókkal) kapcsolatos kutatásaiért. Ma már pontosabban ismerjük a töltött pionokat, tömegük $139,57 \text{ MeV}/c^2$, élettartamuk $0,025 \mu\text{s}$, spinjük nulla, így rájuk a Klein–Gordon-egyenlet lehetne érvényes (ha ilyen egyszerű leírását keresnénk). Létezik semleges pion is, amelynek tömege $135 \text{ MeV}/c^2$, élettartama milliárdod része a töltött pionénak, és két fotonra tud bomlani, ezen keresztül tudták megtalálni az 1950-es években Berkeley-ben (lásd Bjorklund és munkatársai Phys. Rev. **77** [1950] 213 cikkét).

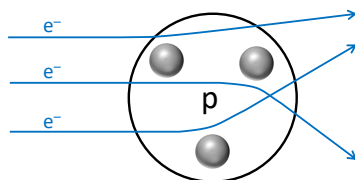
Kozmikus sugárzásban és részecskegyorsítóknál (elsőként a BNL Cosmotron gyorsítójában) az 1940-50-es években kezdtek el olyan nehéz, instabil részecskéket észlelni, amelyek bomlásuk során buborékkamrában jellegzetes V-alakú nyomot hagynak. Ezek közül az elsőként azonosított részecske a K-mezon avagy kaon volt, amelyet Rochester és Butler fedezett fel 1947-ben (Nature **160** [1947] 855). Ködkamrában vizsgálták kozmikus részecskék nyomait, és ezek között találtak olyat, amely két töltött pionra bomlott, illetve olyat, amely egy töltött pionra és egy semleges részecskére. Az észlelt részecske tömege kb. a protontömeg felének tűnt. Nem sokkal később a Caltech elvégzett hasonló kísérletekben 30 töltött és 4 semleges részecskét észleltek. Ezeket úgy kategori-

zálták, hogy vannak az L-mezonok (műion és pion), a K-mezonok (a pionnál nehezebb, de a protonnál könnyebb részecskék), a nukleonok (a proton és a neutron) és végül a hiperonok (a nukleonnál nehezebb részecskék). Sok részecske ezek közül igen hosszú élettartammal rendelkezett, ezért igen hosszú pályájuk volt. Ez azért volt meglepő, mert a proton-pion reakcióban keletkező részecskék jelentős része ennél sok (több mint 10) nagyságrenddel rövidebb élettartamú. Pais ezt egy újfajta kvantumszám, a „ritkaság” bevezetésével magyarázta: ezt a kvantumszámot megőrzi az erős kölcsönhatás, de sérül a gyenge kölcsönhatásban (lásd a 11.5.2. szakaszt). Az ilyen ritkasággal rendelkező részecskék „hagyományos” részecskékké bomlását ezért a gyenge kölcsönhatás irányítja, és ez sokkal nagyobb időskálát eredményez.

11.4.2. Partonok és kvarkok

A **proton szerkezetét** is részecskegyorsítókkal próbálták feltárni a 60-as években. Friedman és Kendall az 1967 és 1973 között a SLAC elektrongyorsítójánál végzett nagyenergiás (úgynevezett „mélyen rugalmatlan”) elektron-proton ütközésekben azt látták, hogy a protonnak is van belső szerkezete: a szórásban észlelt eloszlások nem voltak összeegyeztethetők azzal, ha a protont elemi részecskének tekintjük. Éppen ellenkezőleg, úgy tűnt, hogy a proton három „szórócentrumból” áll (lásd a 61. ábrán). Az *Ann.Rev.Nucl.Part.Sci.* **22** (1972) 203 cikkben összefoglalt eredményeket leíró képet **partonmodellnek** nevezték el – Friedman és Kendall pedig a kísérletekért 1990-ben Nobel-díjat kapott. Hogy a proton nem elemi részecske, hanem alkotóelemei vannak, a felfedezett hadronokkal kapcsolatos kutatásoknak is teljesen új irányt adott.

A ködkamrás és buborékkamrás kísérletekben látott nyomok alapján felismert számos részecskét **érdekes táblázatokba rendezték** töltésük és úgynevezett „ritkaságuk” szerint, lásd a 62. ábrát. Egyes részecskéket mezonoknak, másokat barionoknak neveztek, kölcsönhatási tulajdonságaik alapján. A táblázatok szimmetrikus elrendezése, az ezeken megjelenő háromfogású szimmetria „elárulta” ezen részecskék (összefoglaló néven hadronok) összetételét. 1961-ben Gell-Mann és Ne’eman (egymástól függetlenül) kidolgozták a hadronok ezen alapuló osztályozását, 1964-ben pedig Gell-Mann és Zweig (szintén egymástól függetlenül) a **kvarkmodell** segítségével magyarázták meg ezt az osztályozást. Mindez azt jelentette, hogy a hadronok kvarkokból állnak, méghozzá a ritkaságot a „ritka” (*s*) kvark hordozza, míg a nem ritka hadronokban (pl. a protonban és a neutronban is) másik kettő különböző kvark van: *u* és *d*. Mindegyikhez tartozik egy antikvark is, és a mezonok kvark-antikvark párként írhatóak le, a barionok pedig három kvarkból állóként. A három összetevő közötti (később kiderült: közelítő) szimmetria okozza a táblázatok háromfogású módon szimmetrikus elrendezését. Mindezek nyomán az is kiderült, hogy a proton alkotóelemei is kvarkok. A kvarkok típusát íznek



61. ábra. A proton szerkezetének feltárása elektron-proton ütközésekkel

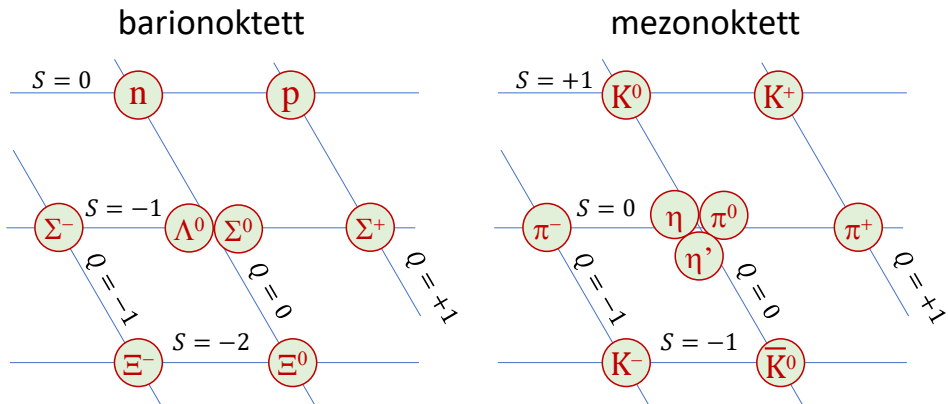
nevezték el, és a három íz (u, d, s) lehetséges állapotainak leírására az $SU(3)$ csoportot választották – világos ma már persze, hogy a kvarkizék nem tökéletesen szimmetrikusak, de mai kutatásokban is néha alkalmazzák az ízek közötti szimmetria határesetét. Igen érdekes, hogy az így bevezetett kvarkok töltései az elemi töltés (amelyet addig ténylegesen a lehető legkisebb töltésnek gondoltak) törtrészeinek adódnak: az u -kvark töltése $+2/3e$, a d - és az s -kvarkoké pedig $-1/3e$ kellett hogy legyen, hogy a belőlük álló (így már összetett részecskének tekinthető) hadronok töltései helyesen adódjanak: a ($+1e$ töltésű) proton kvarkszerkezete pl. uud , a (semleges) neutroné udd kellett hogy legyen.

A kvarkok vizsgálatában kulcsfontosságú volt néhány további részecske felfedezése. Gell-Mann és Ne’eman a fent említett $SU(3)$ -alapú osztályozás alapján már 1961-ben megjósolták az úgynevezett Ω^- barion létezését és tulajdonságait. Nem sokkal később, 1964-ben Barnes és munkatársai a BNL-ben fel is fedezték ezt a részecskét (lásd a Phys. Rev. Lett. **12** [1964] 204 publikációt). Ez a részecske hasonló volt a korábban felfedezett Δ^{++} -barionhoz (amely pionok és protonok ütközése nyomán jött létre): mindkettő spinje $3/2$, tehát kvarkjaik spinjei „egyirányúak”, és mindkettő azonos kvarkokból áll (az Ω s -kvarkokból, a Δ u -kvarkokból). Ez viszont azt jelenti, hogy ezek olyan fermionrendszert (kvarkrendszert) alkotnak, amelyben a fermionok összes tulajdonsága megegyezik – így nem lehet a hullámfüggvényük antiszimmetrikus a részecskecserére, ami pedig fermionok esetén muszáj lenne.

Úgy is mondhatjuk, hogy ezen barionokban sérülni látszik a Pauli-elv. Greenberg a Phys. Rev. Lett. **13** (1964) 598 cikkben, illetve Han és Nambu a Phys. Rev. **139** (1965) B1006 cikkben azt a megoldást javasolta, hogy a kvarkoknak kell hogy legyen egy további kvantumszáma: ezt nevezték el „kvantumszínnek”. Erre a tulajdonságra szintén az $SU(3)$ csoport alkalmazhatóságát tették fel, azaz háromféle színkvantumszámot (másképpen: háromféle színt és antiszínt) használva. A kvantum-szindinamika kidolgozása Fritzscht, Leutwyler, Gell-Mann és mások nevéhez fűződik, és messze meghaladja jelen jegyzet kereteit, bár röviden alább, a 11.5.1. szakaszban visszatérünk rá.

Kiderült később, hogy még többféle kvarkra lenne szükség bizonyos szimmetriák és bomlások miatt.³⁸ 1974-ben Richter (SLAC) és Ting (MIT) csoportja egyszerre fedezte fel a J/ψ -mezont (mindkét csoport november 11-én jelentette be a részecskét, Richter ψ néven, Ting J néven), amely egy c és egy \bar{c} kvarkból áll. A felfedezést a Phys. Rev. Lett. **33** (1974) 1404 és 1406 cikkekben írták le, és a két csoportvezető még 1976-ban Nobel-díjat kapott ezért. Ezzel teljessé lett a második kvarkcsalád: az u, d kvarkok után a c, s kvarkoké. Még 1973-ban Kobayashi és Maskawa (akik ezért 2008-ban fizikai Nobel-díjat kaptak) a kaonok bomlásainak bizonyos furcsa tulajdonságaira (a töltés és a paritás együttes cseréjére vonatkozó szimmetriaelv sérülésére) alapozva megjósolták egy harmadik kvarkgeneráció létezését is (lásd a Prog. Theor. Phys. **49** [1973] 652 cikket). Ezek közül a b -kvarkot Lederman fedezte fel a Fermilab E288 kísérletében a $b\bar{b}$ kvarkpárból álló Υ részecske kimutatása által (a részleteket lásd az AIP Conf.Proc. **424** [1998] 29 visszatekintő cikkben). A t -kvarkot pedig végül a Fermilab Tevatron részecskegyorsítójának D0 és CDF kísérletei találták meg (Phys. Rev. Lett. **74** [1995] 2626 és 2632). Ezzel teljessé vált a kvarkok listája is: u, d, c, s, t, b kvarkokat ismerünk,

³⁸ Itt elsősorban a Sheldon Glashow, John Iliopoulos és Luciano Maiani által megalkotott, és a Phys. Rev. D **2** (1970) 1285 cikkben leírt GIM-mechanizmusra gondolhatunk (közülük Glashow kapott Nobel-díjat 1979-ben), amely egy negyedik kvark létét követelte meg; illetve az elektron-pozitron annihilációban hadron-, illetve müonkeletkezés arányára, amely az energiától függően növekszik, mintha újabb és újabb módusok kapcsolódnának be. Mindkettő messze túlmutat jelen jegyzet keretein.



62. ábra. A nagyenergiás ütközésekben felfedezett részecskék táblázatai az S „ritkaság” és a Q töltés szerint; ezek világítottak rá az elméleti leírásuk helyes módjára

ezek antikvarkjait, és mindegyiket háromféle színkvantumszámmal (az antikvarkokat antiszínekkel). Az ebben és az előző szakaszokban említett részecskék felfedezését a 3. táblázat foglalja össze.

Gyakorlófeladat

A Λ barion tömege $1116 \text{ MeV}/c^2$, egy lehetséges bomlása során protonra és (töltött) pionra bomlik (ezek tömege 938 és $140 \text{ MeV}/c^2$). Mennyi energia szabadul fel ezen bomlás során? Ebből mennyit visz el a proton, és mennyit a pion? A Λ -barionnal együtt mozgó rendszerből nézve az impulzusmegmaradás miatt a hármassimpulzusokra $p_p = p_\pi$, az energiákra pedig ($c = 1$ egységekben) $E_p = m_\Lambda - E_\pi$. Ezen egyenletek négyzetének különbsége az $m_p^2 = m_\pi^2 + m_\Lambda^2 - 2m_\Lambda E_\pi$ egyenlet adódik, ahonnan $E_\pi = (m_\Lambda^2 + m_\pi^2 - m_p^2)/2m_\Lambda$, és így adott a pion összes energiája, innen kinetikus energiája $E_\pi - m_\pi$ módon határozható meg. A számolást hasonlóan elvégezhetjük a protonra is. (És azt kapjuk, hogy a pion viszi el a felszabaduló kinetikus energia $\approx 85\%$ -át; ez általánosságban jellemző az ilyen reakciókra: a kisebb tömegű bomlástermék több mozgási energiát visz el.)

11.5. A részecskefizika standard modellje és az alapvető kölcsönhatások

A részecskéket és a köztük ható kölcsönhatásokat a kvantumelmélet írja le. Három ilyen kölcsönhatást ismerünk: az elektromos töltésekre ható elektromágneses kölcsönhatást, az atommagokat összetartó és a maghasadás és magfúzió energiáját adó erős kölcsönhatást, illetve a radioaktív β -bomlásért és a neutrínókért felelős gyenge kölcsönhatást. A gravitáció a negyedik kölcsönhatás, ezt azonban egyelőre nem tudjuk az előbbiekkal egységes keretbe foglalni; ez jelenleg is aktív kutatási terület. Jelenleg a gravitáció leginkább a téridő görbületén keresztül leírható elméletként kezelhető. Vannak kísérletek arra, hogy ezt kvantummechanikai keretbe öntsék, pl. kvantumgravitáció, szuperszim-

Évszám	Felfedezés	Felfedező(k)	Kísérleti berendezés
1869	Katódsugárzás	Hittorf és Plücker	Vákuumcső
1895	Röntgensugárzás	Röntgen	Fényérzékeny lemez
1896	Radioaktivitás	Becquerel, Skłodowska-Curie	Fotólemez
1897	Elektron	Thomson	Crookes-cső
1899	α -, β -sugárzás	Rutherford	Fotólemez
1900	γ -sugárzás	Villard	Fotólemez
1911	Atommag	Rutherford	Cink-szulfid ernyő
1911	Kozmikus sugárzás	Hess	Elektroszkóp
1932	Neutron	Chadwick	Hidrogén- és nitrogéngáz
1932	Pozitron	Anderson	Ködkamra
1937	Müion	Street és Stevenson	Ködkamra
1947	Pion	Powell és tsaai	Fotoemulzió
1947	Kaon	Rochester és Butler	Ködkamra
1956	Neutrínó	Cowan és Reines	Víztartály, szcintillátor
1962	Müion-neutrínó	Lederman, Schwartz, Steinberger	AGS
1967–1973	Partonok	Friedman és Kendall	SLAC
1974	c -kvark (J/ψ)	Richter és Ting	AGS és SLAC
1975	τ -lepton	Perl	SPEAR
1977	b -kvark (Υ)	Lederman	Fermilab E288
1979	gluon	DESY PETRA	
1983	W és Z	CERN UA1 és UA2	
1992–1995	t -kvark	Fermilab D0 és CDF	
1989–2000	τ -neutrínó	CERN LEP és Fermilab DONUT	
1964–2012	Higgs-bozon	Higgs és mások, illetve CERN CMS és ATLAS	

3. táblázat. Különböző részecskék (és sugárzások) felfedezésének kronológiája. A „kísérleti berendezés” oszlopban néhol csak egy fontos elemet említünk, máshol az egész detektorrendszert/gyorsítókomplexumot.

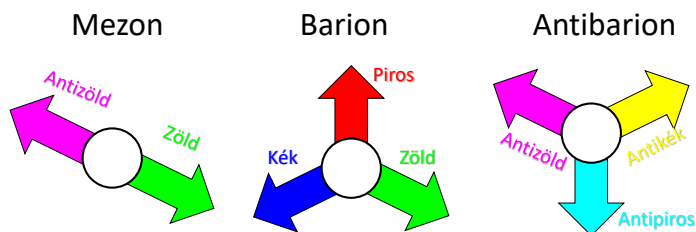
metria, hűrelméletek stb., de egyelőre nincs ez ügyben semmilyen kísérleti ellenőrzésre lehetőség, illetve nem sikerült semmilyen kísérleti bizonyítékot vagy cáfolatot találni egyik elméletre sem. Térjünk is vissza a másik három kölcsönhatáshoz, amelyeket együttesen leíró elméletet a részecskefizika standard modelljének neveznek.

Az **elektromágneses kölcsönhatás** tulajdonképpen már az ókor óta ismert. Minden **elektromos töltéssel** rendelkező részecskékre hat, mai megfogalmazás (a **kvantum-elektrodinamika**, QED elmélete) szerint pedig a kölcsönhatást a **fotonok** közvetítik: azaz a töltések nem közvetlenül hatnak egymásra, hanem fotonok kicserélésén keresztül (ahhoz hasonlóan, mintha két evezős medicinlabdákat dobálna oda-vissza, és így „taszítanak” egymást – ugyanakkor az elektromos kölcsönhatás esetében vonzás is létezik). Az elmélet matematikailag igen összetett, részletekbe itt nem tudunk belemenni, de azt fontos megemlíteni, hogy a QED a **legpontosabb ismert elmélet**: a hidrogénatom szerkezetét 12 tizedesjegy pontossáig helyesen írja le, és az elektron mágneses momentumát is, ahogy a 7.8. szakaszban részleteztük. A többi kölcsönhatást is ennek mintájára képzelhetjük el, csak másfajta „töltéssel” és más közvetítő részecskével, ahogy azt alább látni fogjuk.

11.5.1. Az erős kölcsönhatás

Az **erős kölcsönhatás** jelentősége abban áll, hogy ez a kölcsönhatás teszi stabil részecskévé a protont, illetve ez tartja össze az atommagokat (a magerő segítségével). A protonok és a neutronok **barion** típusú részecskék, a kísérleti tények szerint három kvarkból állnak. További hasonló részecskék a pion, a kaon és társaik: ezek mind két kvarkból állnak, és **mezonoknak** nevezzük őket. A kvarkokat a **gluonok** tartják össze (a nevük is az angol „glue” – ragasztó – szóból származik). A kvarkokat a korábban említett SLAC-beli elektronszórásos kísérletekben fedezték fel – pontosabban a partonokat fedezték fel itt, amelyek később a kvarkoknak bizonyultak, ahogy a 11.4.2. szakaszban láttuk. Már itt kiderült, hogy elektronok és pozitronok ütközéseiben gyakran észlelhető két, ellentétes irányú részecskezár („jet”), amelyek a $e^+e^- \rightarrow q + \bar{q}$ folyamatban létrejövő kvarkok **hadronizációja** során keletkeznek. A gluonokat pedig a hamburgi DESY PETRA nevű elektron-pozitron ütköztetőjében fedezték fel, ahol olyan eseményeket észleltek, ahol az elektronból és pozitronból három, egymással körülbelül azonos szöget bezáró részecskezár keletkezik, amely csak úgy volt értelmezhető, hogy $e^+e^- \rightarrow q + \bar{q} + g$ folyamat zajlik le.

A kvarkokat és gluonokat, valamint a közöttük ható erős kölcsönhatást leíró elmélet a **kvantum-színdinamika** (Quantum Chromo Dynamics, QCD). A kölcsönhatás alapja a **színtöltés** (hasonlóan ahhoz, ahogyan az elektromágneses kölcsönhatás az elektromos töltéshez kapcsolódik). Természetesen a szín csak analógia, de azt mutatja, hogy szemben az elektromos töltéssel (melyet egy – pozitív vagy negatív – szám ad meg: a töltés nagysága) itt három alapszíntöltés van (hagyományosan piros, kék és zöld névvel elnevezve). Mindegyikhez létezik antiszín is (mint a negatív elektromos töltés); a hagyományos piros, kék és zöld antiszínjeit ciánkék, sárga és magenta színekkel szoktuk kijelölni. A három szín, illetve a három antiszín kombinációja semleges, „fehér” színt eredményez, ahogy egy színnek és antiszínének kombinációja is, mint azt a 63. ábra mutatja. A QCD szerint a közönséges megfigyelhető részecskék mind színsemlegesek (azaz „fehérek”). A magerő a színsemleges protonok és neutronok között úgy hat, mint az elektromosan semleges atomok és molekulák között ható van der Waals típusú erő. A kvarkok tehát színtöltéssel rendelkeznek, de a típusuk (vagy ízüik) is megkülönbözteti



63. ábra. A kvarkok színei a három alapszínből kerülnek ki (piros, kék és zöld). Az antikvarkok színe ennek megfelelően ciánkék, sárga és magenta lehet („antiszínek”). A három szín, illetve a három antiszín kombinációja semleges, „fehér” színt eredményez, ahogy egy színnek és antiszínének kombinációja is.

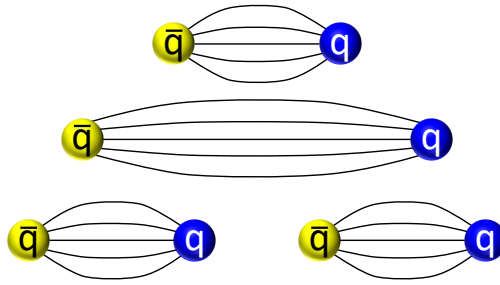
őket egymástól, így belőlük sokféle hadron rakható össze. Például proton két u típusú és egy d típusú kvarkból áll, míg a neutronban két d - és egy u -kvark található, az Ω^- három s -kvarkból áll, a Δ^{++} három u -kvarkból; a J/ψ valójában $c\bar{c}$, míg az Υ összetétele $b\bar{b}$.

A kvarkokból összetett részecskék (hadronok) között érvényes a **kvarkbezárás** nevű megállapítás: ha egy mezonból vagy barionból el akarnánk távolítani egy kvarkot, akkor az ehhez szükséges energia annyira nagy, hogy új kvark-antikvark párok létrejöttét teszi lehetővé, és a kiszabadítani szándékozott kvark nem szabadon, hanem egy újabb mezonba zárva észlelhető csak (lásd 64. ábra). Azt mondhatjuk tehát, hogy a kísérletek tanúsága szerint csak színtöltés szempontjából „fehér” (színsemleges) részecskék repülhetnek szabadon; soha nem sikerült pl. magányos szabad kvarkokat kimutatni. Ez a következtetés elvileg levezethető lehetne a színtöltések kölcsönhatását (azaz az erős kölcsönhatást) leíró QCD elméletéből, azonban ez bizonyos szempontból a mai napig nyitott kérdés.

A QCD fontos ismert következménye viszont **az aszimptotikus szabadság**: eszerint extrém nagy energián a kölcsönhatás úgynevezett csatolási állandója (mely az erősségét jelzi) lecsökken, azaz a kvarkok kevésbé hatnak egymással kölcsön. Így tehát extrém nagy energiájú hadronütközésekben a kvarkok és gluonok kiszabadulhatnak hadronbörtönükből (de a létrejövő állapot olyan, hogy mire detektorokkal észlelhető részecskékké válik, már újra csak színsemleges hadronokból áll, lásd a következő fejezetben is).

11.5.2. A gyenge kölcsönhatás

A **gyenge kölcsönhatást** a radioaktív bomlásokon keresztül vizsgálhatjuk. Ahogy fentebb említettük, a β -bomlásban a protonon és az elektronon kívül egy neutrínó is keletkezik. A neutrínó semleges, és színtöltése sincs, tehát sem az elektromágneses, sem az erős kölcsönhatásban nem vesz részt. Akkor mi az a folyamat, ami a β -bomlást leírja? Kiderült, hogy létezik egy harmadik, az említett gyenge kölcsönhatás. Ennek közvetítői az úgynevezett W - és Z -bozonok, amelyeket 1983-ban fedeztek fel a CERN Szuper Proton-Antiproton Szinkrotronjánál lévő UA1 és UA2 kísérletekben. A gyenge kölcsönhatásban minden anyagi részecske részt vesz: a kvarkok, az elektron és a neutrínó is. A gyenge kölcsönhatáshoz is tartozik egy töltés, amelyet gyenge hipertöltésnek neveznek. (Ennek kétféle alapértéke van, ahhoz hasonlóan, ahogyan az elektromos töltés



64. ábra. Ahogy távolítjuk egymástól a kvarkokat, a potenciál olyan erős lesz, hogy annak energiája elég egy újabb kvark-antikvark pár létrehozásához

egyféle, a szintöltés háromféle alapértékkel rendelkezik – és persze mindegyik alapérték „ellentettje” is lehetséges.)

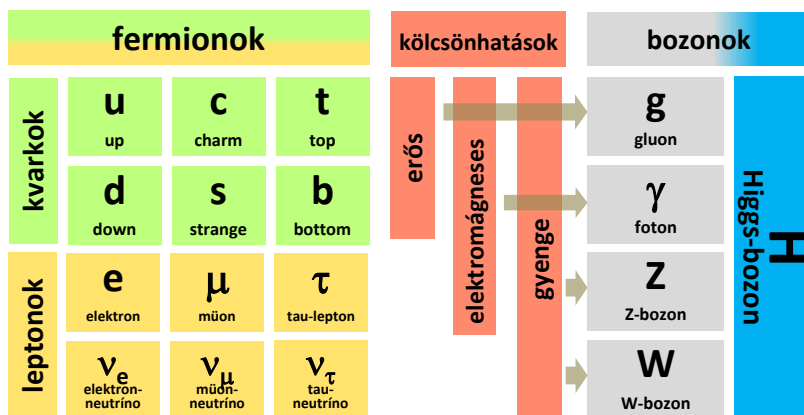
A gyenge kölcsönhatás vizsgálata során kiderült, hogy a protont és a neutront alkotó u - és d -kvarkok bizonyos értelemben egy „családba” tartoznak az elektronnal és a neutrínóval, létezik azonban két másik család is: az egyikben a c - és s -kvarkok mellett a müon, illetve a hozzá tartozó müon-neutrínó. A harmadik családot pedig a t - és b -kvarkok alkotják, illetve a τ - (tau) lepton és a τ -neutrínó.

11.5.3. A standard modell

Láthattuk tehát, hogy a világot **anyagi és közvetítő típusú részecskék** alkotják. Érdekes módon az anyagi típusú részecskék mind fermionok, azaz a spinjük $1/2$. A közvetítő részecskék mind bozonok, egész spinűek. Mindezen részecskék és kölcsönhatásaik ma ismert elmélete az úgynevezett **standard modell**. Ezt illusztrálja a 65. ábra. A modell szerint a gyenge kölcsönhatás minden anyagrészecskére hat, az elektromos a töltött részecskékre (kvarkok és töltött leptonok). Az erős kölcsönhatás pedig csak a szintöltéssel rendelkező részecskékre hat, ezek a kvarkok. A legerősebb az erős kölcsönhatás: ha nem így lenne, a protonok és a neutronok között ható összetartó erőt legyőzné a protonok elektromos taszítása. A neutrínó viszont csak gyengén hat kölcsön: ez a magyarázat arra, hogy gyakorlatilag akadálytalanul áthaladhat a Földön is akár – a kozmikus sugárzásban érkező neutrínók szinte mindegyike ezt is teszi.

Az anyagi részecskék (kvarkok és leptonok) és a közvetítő bozonok mellett van egy harmadik típusú elemi részecske is: a **Higgs-bozon**. Ezt Higgs, Englert, Brout és mások 1964-ben jósolták meg, illetve igazából a Higgs-mezőt, amely egy kvantummező, amely kitölti a vákuumot, és a standard modell szerint a kvarkok és a leptonok az ezzel való kölcsönhatás által kapnak tömeget. A Higgs-részecske pedig ezen mező kvantuma (ahhoz hasonlatosan, ahogyan a foton az elektromágneses mező kvantuma). A standard modell ezen eleme sokáig „hiányzott”, mígnem **2012-ben** az LHC gyorsító ATLAS és CMS kísérletei **találtak egy új részecskét**, amely, mint kiderült, tényleg a régóta keresett **a Higgs-bozon** volt (lásd a felfedezést közlő Phys.Lett.B **716** [2012] 1 és 30 publikációkat). A felfedezés kapcsán Higgs és Englert Nobel-díjat kapott 2013-ban.

Mindezen részecskék tömegét és tulajdonságait a 65. ábra mellett a 4. táblázat is összefoglalja.



65. ábra. A standard modell kölcsönhatásai és elemi részecskéi.

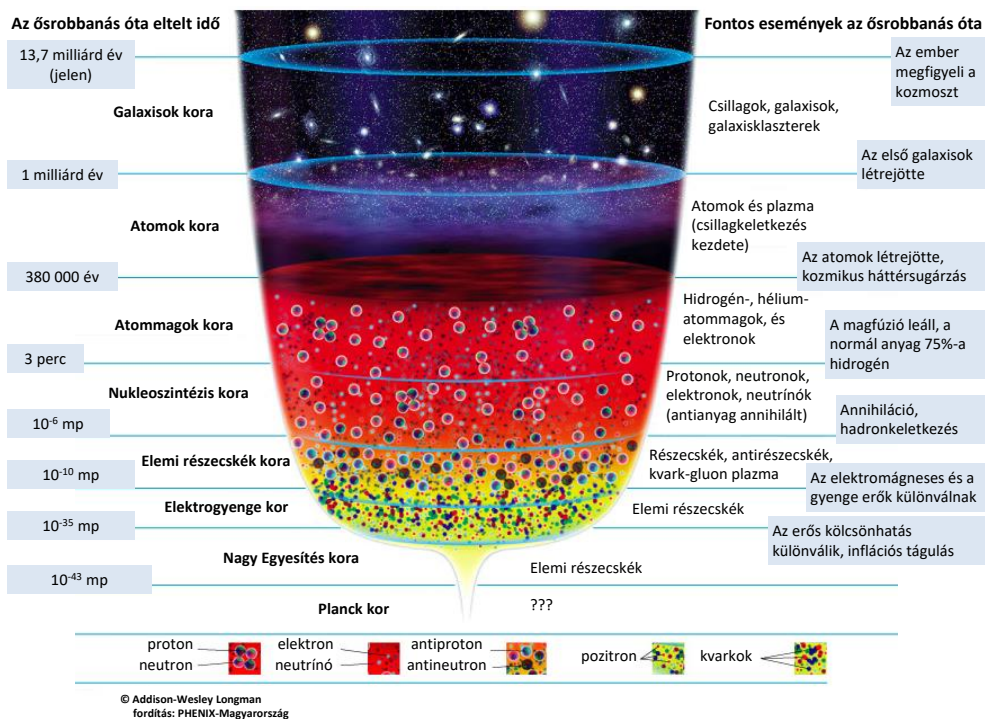
Részecske	Tömeg	Spin	Töltés
<i>u</i> -kvark	$2,2 \text{ MeV}/c^2$	$1/2$	$\mp 2/3$
<i>d</i> -kvark	$4,6 \text{ MeV}/c^2$	$1/2$	$\pm 1/3$
<i>c</i> -kvark	$1280 \text{ MeV}/c^2$	$1/2$	$\mp 2/3$
<i>s</i> -kvark	$96 \text{ MeV}/c^2$	$1/2$	$\pm 1/3$
<i>t</i> -kvark	$173 \text{ GeV}/c^2$	$1/2$	$\mp 2/3$
<i>b</i> -kvark	$4,2 \text{ GeV}/c^2$	$1/2$	$\pm 1/3$
elektron	$511 \text{ keV}/c^2$	$1/2$	± 1
μ	$106 \text{ MeV}/c^2$	$1/2$	± 1
τ	$1,8 \text{ GeV}/c^2$	$1/2$	± 1
ν_e	≈ 0	$1/2$	0
ν_μ	≈ 0	$1/2$	0
ν_τ	≈ 0	$1/2$	0
foton	0	1	0
W-bozon	$80 \text{ GeV}/c^2$	1	0
Z-bozon	$91 \text{ GeV}/c^2$	1	± 1
gluon	0	1	0
Higgs-bozon	$125 \text{ GeV}/c^2$	0	0

4. táblázat. A standard modell részecskéi és tulajdonságaik.

12. Nagyenergiás mag- és részecskefizika

12.1. Részecskegyorsítókkal az ősrobbanás nyomában

A világegyetemünk története során időben visszamenve azt látjuk (illetve azt következtetjük ki modellek és kísérletek segítségével), hogy a hőmérséklet egyre nagyobb és nagyobb volt, a táguláshoz kapcsolódó hűléssel összhangban. Mivel így a hőmérséklet adta átlagos mozgási energia eleinte jóval meghaladta az atomok ionizációs energiáját, kiszámítható, hogy 380 ezer évvel az ősrobbanás utánig (amikor a közeg 3000 K körüli hőmérsékletre hűlt) még nem léteztek atomok, az akkori Univerzumot egyfajta plazma töltötte ki, amelyet az atommagok és elektronjaik alkottak. Az ősrobbanás utáni első pillanatokra visszamenve még érdekesebb jelenségeket láthatunk (lásd 66. ábra) – **egy milliomed másodperccel az ősrobbanás után** nemhogy az atomok, de még atommagok sem, sőt maguk a protonok és neutronok sem léteztek, hanem az őket alkotó kvarkok és gluonok „ősleve”, a **kvark-gluon plazma** töltötte ki a világegyetemet.



66. ábra. A világegyetem története. A kvarkok csak hadronokba (például protonokba vagy neutronokba) zárva vannak jelen az első ezredmásodperc után. Ez előtt azonban szabad kvarkok és gluonok egyfajta levele tölthette be az univerzumot.

Ahhoz, hogy ezt az „őslevest” megfigyeljük és kísérletileg vizsgálhassuk, az akkor jelenlévőhöz hasonló körülményeket kell teremteni. Ez **extrém hőmérsékletet és nyomást** jelent, a Nap központi hőmérsékleténél is kb. milliószor forróbb anyagot. Ilyet **ultrarelativisztikus** sebességre gyorsított **atommagok ütköztetésével**, „kis bum-

mok” létrehozásával érhetünk el. Az ütközési pont köré rendezett detektorainkba érkező részecskéket vizsgálva érdemi információt kaphatunk arról, hogy milyen is volt az anyag, amely közvetlenül az ütközés után létrejött.

A helyzet ahhoz hasonló, mint ha egy **fagyott világban** élünk, ahol a víz csak jég formájában van jelen. Felvetnék azonban elméleti kutatók, hogy a jégnek lehet egy **új-fajta, folyékony formája** is, de az ehhez szükséges hőmérsékletet közönséges módszerekkel nem tudják elérni. Az az ötletük támadhat azonban, hogy jégdarabokat röpítenek egymásnak, és a nagyenergiás ütközésekben a jég megolvadását remélik. A megolvadó anyag persze azonnal szétrepül (az ütközés energiája miatt), és a cseppek repülés közben egyből megfagnak. Alakjukból, méretbeli eloszlásukból azonban visszakövetkeztethetnek arra, hogy létrejött-e a számukra ismeretlen „folyékony állapotú jég”.

A kutatások mai állása szerint a nehézionok (elektronjaiktól teljesen megfosztott nehéz atommagok) ütközése nyomán létrejövő közeg hamar, körülbelül 1 fm/c (azaz kb. $3 \cdot 10^{-24}$ másodperc) alatt *termalizálódik*, azaz hőmérséklettel, nyomással leírható közeggé válik, majd **robbanásszerű tágulása** során gyorsan kihűl. Nagyjából 10 fm/c idő (azaz kb. $3 \cdot 10^{-23}$ másodperc) múltán lehűl nagyjából 160 MeV (azaz kb. $1.8 \cdot 10^{12} \text{ K}$) hőmérsékletre, ezen a hőmérsékleten pedig a kvarkok és gluonok „kifagyva” hadronokba záródnak, amelyeket detektorainkkal észlelhetünk. A hadronok számából és eloszlásukból tudunk visszakövetkeztetni az ütközésekben létrejövő anyag tulajdonságaira.

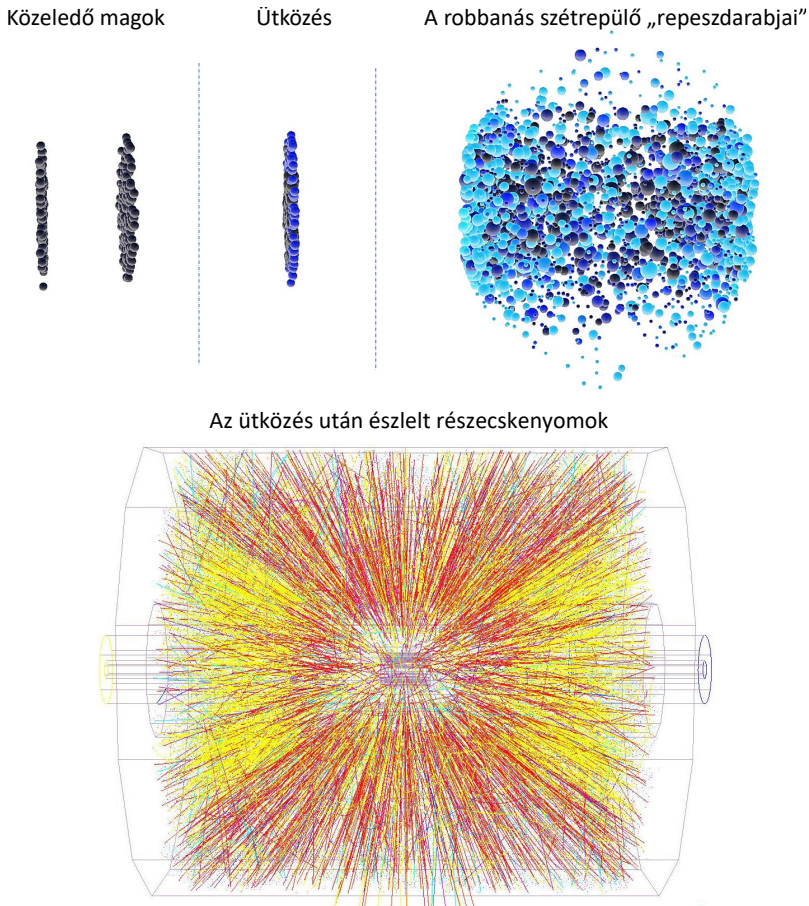
12.2. Nagyenergiás gyorsítók és detektoraik

Ultrarelativisztikus sebességre gyorsított atommagok (nehézionok) – melyek a Lorentz-kontrakció hatására lapos korongoknak tűnhetnek³⁹ – a 67. ábrán illusztrált ütközéseit figyelik meg a CERN és a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium kísérleteiben. Az itt létrejött hatalmas energiasűrűségnek köszönhetően az atommagok anyaga a megszokottól egészen eltérően viselkedik: a protonok és a neutronok megolvadhatnak, egy új, utoljára a világegyetem születésekor jelen lévőhöz hasonló közeget (a fentebb említett kvark-gluon plazmát) és új részecskék seregét létrehozva. A nagy energiasűrűség miatt a nyomás is igen nagy, ez pedig azonnal szétveti az eleinte igen kis térfogatba koncentrált anyagot, amely tágulni és hűlni kezd, majd mire – különféle, jól ismert részecskék formájában – az ütközési pont köré rendezett detektorainkba ér, újra a megszokott tulajdonságait mutatja (azaz a megszokott részecskékből áll). Az észlelt részecskék fizikai jellemzőit (impulzusát, energiáját, tömegét, töltését stb.) megmérve, eloszlásukat vizsgálva információt kaphatunk arról, hogy milyen volt az az anyag, amely közvetlenül az ütközés után létrejött. Ezekben az ütközésekben tehát az anyag olyan állapota jön létre, amilyen a Világegyetem létrejöttkor, néhány mikromásodperccel a nagy mumm után uralkodott. Emiatt a nagyenergiás gyorsítóknak zajló nehézion-ütközéseket – a bennük uralkodó óriási energiasűrűség és hőmérséklet, valamint a gyors tágulás miatt – kis bummoknak is nevezhetjük.

Az ilyen típusú kutatások a berkeley-i Bevalac-nál kezdődtek, ahol $\sqrt{s_{NN}} = 1 \text{ GeV}$ nukleononkénti tömegközépponti energiával ütköztettek atommagokat (ezen mennyiség definícióját lásd fentebb a (11.5) egyenletben). A brookhaveni AGS-nél ezt 5 GeV -re emelték, majd a CERN SPS gyorsítójánál 17 GeV -re. Ma a brookhaveni RHIC (Relativisztikus Nehézion-ütköztető) kísérleteiben akár 200 GeV /nukleon energiájú mag-mag

³⁹ Valójában egyrészt nem látjuk őket, másrészt ha látnánk is, a gyors mozgásuk és véges méretük miatt nem egészen a laborrendszerben egyidejű alakjuk jelenne meg számunkra, hanem egy bonyolultabb, elforgatott alakot „látnánk”.

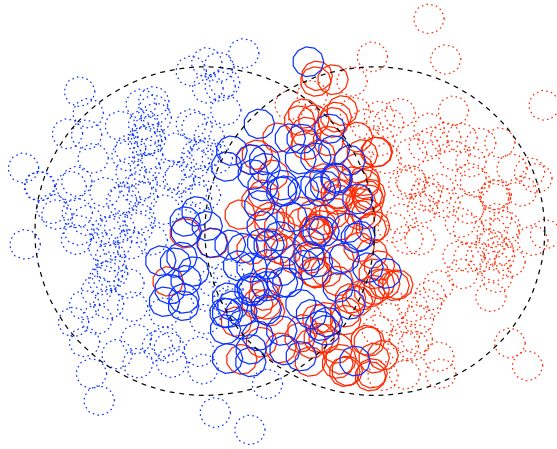
ütközéseket is megfigyelhetnek, míg a CERN LHC (Nagy Hadronütköztető) gyorsítóban ennél még egy nagyságrenddel nagyobb, akár $\sqrt{s_{NN}} = 5$ TeV energiával is ütköztethetnek atommagokat.



67. ábra. Atommagok ütközése a MADAI projekt (lásd <http://madai.phy.duke.edu>) animációi alapján (fent); arany atommagok nukleononként 200 GeV tömegközépponti energiájú ütközésének felvétele a RHIC STAR kísérletében (lent). A fenti ábrák és a lenti „felvétel” mérettartománya között 15 nagyságrend eltérés van, ugyanis míg az ütköző atommagok és a kvarkanyag femtométeres skálájú, addig a részecskéket észlelő detektorok több méter méretűek.

Ezen gyorsítóknál több kísérlet működik vagy működött (a RHIC-nél a BRAHMS, (s)PHENIX, PHOBOS és STAR, az LHC-nál az ALICE, ATLAS, CMS, LHCb, LHCf, MOEDAL és TOTEM kísérletek). Ezen kísérletek bonyolult detektorrendszereket használnak, amelyek elvégzik a sokféle mérési feladatot. A detektorokat többnyire két fő csoportra osztjuk: az (ütközési) események globális tulajdonságainak leírását szolgálókra, illetve a részecskék észlelését és azonosítását elvégzőkre.

Az események karakterizálására szolgáló detektorok meghatározzák az ütközések pontos helyét, az ütközés geometriai elrendezését, azon belül az ütközések centralitását:

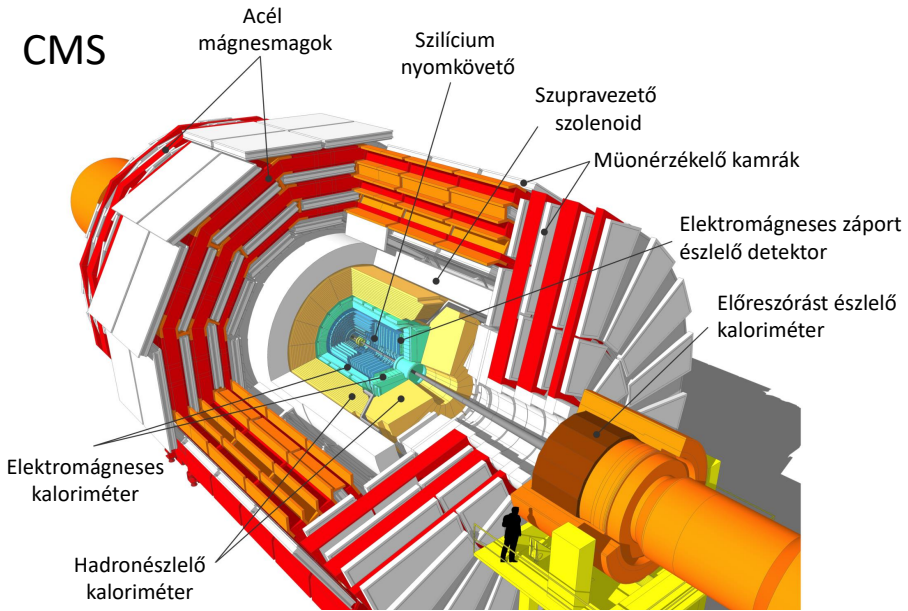


68. ábra. Két aranyatommag ütközésének Monte–Carlo-szimulációja. Az egyik atommag nukleonjait piros, a másikeit kék körök jelzik, a vastaggal rajzolt körök pedig a kölcsönható nukleonokat mutatják. A többi nukleon nem vesz részt a reakcióban, az ezek által alkotott töredék-atommag közel fénysebességgel továbbrepül. Az ütközésben érintett nukleonok száma alapján definiálhatjuk az ütközés centralitását (részletek a szövegben). Az ábra forrása B. Alver és munkatársai arXiv:0805.4411 publikációja.

hogya a két atommag mennyire „középen” találta el egymást. Egy jellegzetes, közepesen centrális ütközést mutat a 68. ábra. A centralitást pedig konkrétan úgy definiáljuk, hogy az $X\%$ centralitású esemény centrálisabb az összes esemény $X\%$ -ánál, és periférikusabb a maradék $(100 - x)\%$ -nál. Ennek értelmében a legcentrálisabb eseményeket a 0% , a legperiférikusabbakat a 100% jelöli (ezt többnyire rugalmatlan ütközések százalékában értjük, amelyek közül a leginkább periférikusabbakat többnyire nem tudják a kísérletek egyenes hatékonyssággal észlelni, így a ténylegesen vizsgált, legperiférikusabb ütközések centralitása többnyire nem éri el a 100% -ot).

A részecskék észlelése és azonosítása egy másik detektorcsoport segítségével működik. Ezek általában „hagymahéj-szerkezetűek”, azaz egy-egy részecske sok rétegen áthalad. A fotonokat és egyéb, áthatoló részecskéket többnyire a legkívül elhelyezkedő energiamérő detektorok észlelik: ezek az ún. kaloriméterek, amelyek azt tűzik ki célul, hogy az érzékelt részecskét (illetve annak energiáját) teljesen elnyeljék, energiájuk minél pontosabb mérésével. Megkülönböztetünk elektromágneses kalorimétereket, melyek fotonok, illetve elektronok kölcsönhatásaira vannak „kihegyezve”, valamint hadronikus kalorimétereket, melyek hadronok energialeadását optimalizálják.

A kirepülő töltött hadronok pályáját pedig az úgynevezett nyomkövető (tracking) detektorok mérik meg, amelyek egyfeljebb elhelyezkedő rétegben szoktak lenni: a nyomkövető detektor elve, hogy a részecske lehetőleg minimális megzavarásával meghatározza annak pályáját. A nyomkövető detektorok legtöbbször mágneses térben helyezkednek el: a töltött részecskék pályája a mágneses tér hatására íves alakot ölt, aminek sugarából (a részecskepálya rekonstruálása után) meghatározható a részecske impulzusa. A kirepülő, észlelni kívánt részecske típusát a tömegükön keresztül azonosítjuk (összehasonlítva a tömeget az ismert részecskék tömegeivel, és leszűrve, hogy az melyikhez esik a legközelebb, a mérési bizonytalanságokat is figyelembe véve.) A részecs-



69. ábra. Az LHC CMS detektorrendszere. Az ábra forrása a J. Phys. Conf. Ser. **513** (2014) 022032 publikáció.

kék tömegeinek méréséhez az impulzusuk mellett szükség van még valamilyen további információra: a részecske v sebességére vagy E energiájára. Ezek ismeretében a tömeg a relativisztikus kinematikai képleteknek megfelelően számolható:

$$(mc^2)^2 = E^2 - (pc)^2, \quad \text{vagy} \quad mc^2 = (pc)^2 \cdot \left(\frac{1}{v^2} - \frac{1}{c^2} \right).$$

A részecske impulzusát a mondott módon, a mágneses térbeli pályagörbületből általában elég pontosan meg lehet mérni (azaz úgy tervezik a nyomkövető detektorok geometriai méreteit, illetve helyfelbontását, valamint a mágneses tér nagyságát, hogy a vizsgálni kívánt impulzustartományú részecskék impulzusára ez jól működjön); a részecske energiáját viszont általában nem lehet olyan pontosan megmérni, hogy p és E méréséből rekonstruálható legyen a tömeg a felírt egyenlet alapján. A részecskeazonosítás általában tehát a sebesség ismerete kell. A sebességet meghatározhatjuk a repülési idő („time of flight”) mérésével, repülésiidő-detektorokkal – követelmény a jellemzően nanoszekundumnál jobb időfelbontás. (Jó időfelbontású elektromágneses kaloriméterek is alkalmasak lehetnek repülésiidő-mérésre.) Egy további lehetőség a töltött részecskék sebességének mérésére a nyomkövető detektor töltőgázában (amelyben az ionizálás megfigyelésével egyúttal a pálya is rekonstruálható) történő energialeadás (dE/dx) mérése: korábban, a (11.6) egyenletben (Bethe-formula) láttuk, hogy ez az energialeadás lényegében a részecske sebességétől függ. A harmadik lehetőség az, hogy a részecske a detektor közegében (gáz vagy valamilyen speciális, nagyobb törésmutatójú anyag) Cserenkov-sugárzást hozhat létre, ha a sebessége meghaladja a közegbeli fénysebességet: ennek észlelésére alkalmas detektorral eldönthető, hogy a részecske sebessége nagyobb volt-e

az ehhez tartozó küszöbértéknél. Az alábbi 69. ábra példaként bemutat egy komplex detektorrendszert: az LHC CMS kísérletét.

Gyakorlófeladat

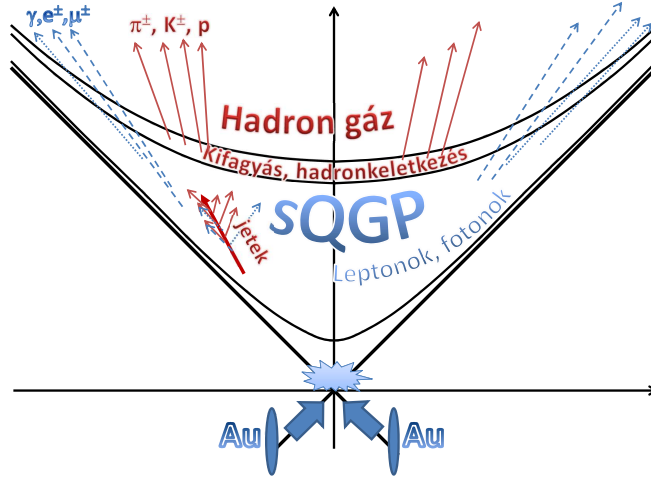
Az LHC-ban 208-as tömegszámú ólomizotópokat gyorsítanak fel nukleononként legfeljebb 2,51 TeV energiára. Mennyi egy egész atommag (mozgási) energiája itt, és mekkora sebességgel mozgó (3 g tömegű) pingponglabda mozgási energiájának feleltethető ez meg? A RHIC esetében 197-es tömegszámú aranyatommagokat gyorsítanak, nukleononként legfeljebb 100 GeV energiára. Vessük össze ezt egy 0,1 gramm tömegű rovarral – mekkora sebességgel repülve lenne ugyanannyi a mozgási energiája, mint egy a RHIC-ben ütköző atommagnak?

12.3. Mérföldkövek a kvark-gluon plazma kutatásában

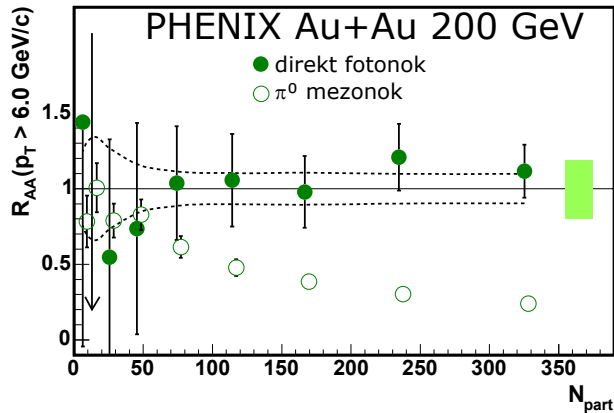
Ahogy fentebb említettük, mai ismereteink szerint a nehézionok ütközésében létrejövő közeg kb. 1 fm/c idő alatt termalizálódik (lásd a 70. ábrát), majd robbanásszerű tágulása során gyorsan kihűl. Nagyjából 10 fm/c idő múltán lehűl körülbelül 160 MeV hőmérsékletre, ahol már hadronok is huzamosabb ideig létezhetnek. Egy forró, dinamikusan változó összetételű hadrongáz által jellemzett szakasz következik, melynek során a közeget alkotó hadronok egymással ütközve impulzus mellett másik fajta hadronokba is átalakulhatnak, majd további hűlés után a „hadrokémiai” szabadsági fokok is kifagynak, azaz megszűnnek a hadronok fajtáit megváltozó ütközések a közegben, azaz rögzülnek a hadrontípusok. Ezt a szakaszhatárt nevezzük kémiai kifagyásnak. Egy ideig még a közeget alkotó hadronoknak van elég tipikus (hőmérsékleti) mozgási energiája, hogy (ha már rugalmatlan, hadronfajta váltó ütközések nem is, de) rugalmas ütközések még lejátszódhatnak: további tágulás és hűlés után (az „utolsó” rugalmas ütközés után) már a kirepülő részecskék impulzusai is rögzülnek: ezt nevezzük kinetikus kifagyásnak. A keletkezett hadronokat, illetve egyes esetekben bomlástermékeiket végül a detektorainkkal észlelhetjük. A következőkben áttekintjük a felfedezések azon sorát, amelynek nyomán ma kijelenthetjük, hogy ultrarelativisztikus nehézion-ütközésekben valóban létrejön az erősen kölcsönható kvark-gluon plazma, az sQGP: ilyenkor tehát a termalizáció után a maganyag ezen fázisa (halmazállapota) van jelen, ami csak ezután „hadronizálódik”, azaz alakul ki belőle a hadronokból álló sűrű gáz. Mindezek (pontosabban a 2005-ig elért eredmények) bővebben olvashatóak a RHIC gyorsítónál akkor működésben lévő kísérletek összefoglaló publikációiban: Nucl.Phys.**A757** (2005) 1–27, Nucl.Phys.**A757** (2005) 28–101, Nucl.Phys.**A757** (2005) 102–183 és Nucl.Phys.**A757** (2005) 184–283.

12.3.1. Az erősen kölcsönható anyag

Amikor két atommag ütközik, az őket alkotó nukleonok (protonok és neutronok) kölcsönhatásba lépnek egymással, páronként nukleon-nukleon ütközéseket létrehozva. Egy adott geometriai elrendezést az atommagok középpontjának legkisebb távolsága, azaz az impakt paraméter jellemez. Az egymást majdnem szemből eltaláló atommagok (kis impakt paraméterű) ütközését centrálisnak nevezzük, míg a nagy impakt paraméterű ütközéseket periférikusnak. Ezen különböző ütközéseket az ún. Glauber-moddal vizsgálhatjuk, ahol az egyes nukleonok ütközési hatáskeresztmetszetét vesszük alapul. Ezzel adott mértékű centralitás esetén meghatározható az ütközésben részt vevő nukleonok,



70. ábra. Egy arany-arany ütközés vázlatos tér-időbeli lefolyása Minkowski-diagramon (a függőleges tengely jelzi az időt, a vízszintes a távolságot). Az ütközés után nagyjából 1 fm/c alatt (amelyet a legelső hiperbola és a függőleges időtengely metszete jelez) kialakul a termalizálódott, erősen kölcsönható kvarkanyag, az sQGP. Ez robbanásszerűen tágul, eközben hűl és fotonokat, elektronokat, müonokat bocsát ki magából. Amikor egyfajta kritikus hőmérsékletet elér, a közegből „kifagy” a kvark és gluon szabadsági fokok, és létrejönnek (rekombinálódnak) a hadronok.



71. ábra. Az Au+Au ütközésekben mért nagyenergiás (itt konkrétan 6 GeV/c-nél nagyobb impulzusú) semleges pionokra és a fotonokra vonatkozó módosulási faktor az ütközés centralitásának (pontosabban a részt vevő (participáns) nukleonok számának, N_{part} -nak) függvényében. Látható, hogy lényegében éppen annyi foton keletkezik, mint azt p+p ütközések alapján vártuk, azonban centrális ütközésekben az így vártnál lényegesen kevesebb nagyenergiás piont látunk. Ez az úgynevezett „jetnyomás” jelensége.

illetve a létrejövő bináris (páros) nukleonütközések száma. Egy ilyen mag-mag (szokásos jelöléssel: AA) ütközésben a valamilyen fajta keletkező részecskék (detektorainkkal mért) átlagos száma összevethető a nukleon-nukleon (kísérletileg a proton-proton, azaz pp) ütközésekben keletkező részecskék átlagos számával, ha ez utóbbit megszorozzuk az atommagütközésben várható bináris nukleonütközések átlagos számával (az általában N_{coll} módon jelölt mennyiséggel):

$$\left\langle \text{AA ütközésben keletkező részecskék száma} \right\rangle \leftrightarrow \left\langle \text{bináris ütközések száma} \right\rangle \times \left\langle \text{pp ütközésben keletkező részecskék száma} \right\rangle. \quad (12.1)$$

Amennyiben egy atommagütközés lényegében nem más, mint sok bináris nukleonütközés együttes lefolyása, akkor ez a két mennyiség várhatóan megegyezik. Elképzelhető azonban, hogy az atommagütközésekben valami másképpen zajlik. Ez alapján definiálják a magmódosulási faktort a fenti két mennyiség hányadosaként:

$$R_{AA} = \frac{\langle \text{AA ütközésben mért részecskeszám} \rangle}{\langle \text{bináris ütközések száma} \rangle \times \langle \text{pp-ben mért részecskeszám} \rangle}. \quad (12.2)$$

Ez tehát megmérhető, ha valamilyen adott fajta részecske mag-mag (AA-)ütközésbeli keletkezési gyakoriságát (hozamát) összehasonlítjuk a p+p ütközésekben mérttel. Ilyen mérést végezve a brookhaveni RHIC gyorsítónál működött PHENIX kísérletnél azt találták, hogy centrális ütközésekben lényegesen kevesebb nagyenergiás semleges pion keletkezik, mint azt proton-proton ütközések alapján várták, lásd a 71. ábrát. (És ez másfajta keletkező hadronokra is igaznak bizonyult; a PHENIX kísérlet a mondott semleges pionokat tudta legkézenfekvőbben megmérni.) Miután a nagyenergiás részecskenyalábot „jet”-nek is hívják, a jelenség neve „jetelnyomás” lett (angol eredetije „jet suppression” vagy „jet quenching”). Ezt a jelenséget a RHIC STAR kísérlete, majd az LHC-nél működő kísérletek is megerősítették.

Érdekes azonban, hogy a lényegében a proton-proton ütközések (N_{coll} -al felskálázott) hozamának megfelelő mennyiségű nagyenergiás foton keletkezik; más szóval: az ilyen fotonokra $R_{AA} = 1$. Ez azt mutatja, hogy a hadronokra vonatkozó R_{AA} 1-nél kisebb volta tényleg csak az erősen kölcsönható, azaz (a kvantum-színdinamika szóhasználatával) „színes” részecskékre vonatkozik. Erre a jelenségre az a magyarázat, hogy az ütközésben keletkezett, erősen kölcsönható „színes” (azaz: a színeknek megfelelő szabadsági fokokat nem hadronokba zárva, hanem „kiszabadultan” tartalmazó) anyag jelentős mértékben elnyeli az abban 5-10 fm nagyságú utat megtevő, az erős kölcsönhatásban részt vevő, színtöltéssel rendelkező részecskék energiáját. Ennek bizonyítására deuteron-arany ütközésekben végeztek ellenpróbát: a deuteron kis méretéből adódóan a létrejövő közeg mérete ilyen ütközésben kicsi, ezért itt ilyen módosulásra nem számítunk. A mérések során valóban az derült ki, hogy ahogy periférikus mag-mag ütközésekben, úgy deuteron-arany ütközésekben sem tapasztalható módosulás. Azóta az is kiderült, hogy ha csökkentjük az ütközési energiát, a jelenség eltűnik: a következő évek egyik legfontosabb célja a „kritikus ütközési energia” megtalálása, amely esetén ez az új típusú anyag már éppen létrejön.

12.3.2. A tökéletes folyadék

A következő fontos megfigyelés az volt, hogy a keletkező részecskék mozgási energiájának eloszlása „kicsi” (ennek jelentése itt: 2-3 GeV-nél kisebb) impulzus esetén

$$N(E) \propto \exp \left[-\frac{E}{T_{\text{eff}}} \right] \quad (12.3)$$

jellegű Boltzmann-eloszlást követ, ahol a Boltzmann-állandót elhagytuk (ebben az egységrendszerben 1 MeV hőmérséklet kb. 11,6 milliárd kelvinnek felel meg). Ez azt jelenti, hogy termalizált közegről van szó, amelynek effektív hőmérséklete T_{eff} . Nem túl bonyolult hidrodinamikai számolással belátható, hogy ha ez a közeg T_0 hőmérsékleten keletkezett (ez tehát a hadronok kifagyásakor jelen lévő hőmérséklet), és a „robbanás” maradványaként u sebességgel távolul, akkor az m tömegű részecskék energiaeloszlásának effektív hőmérséklete

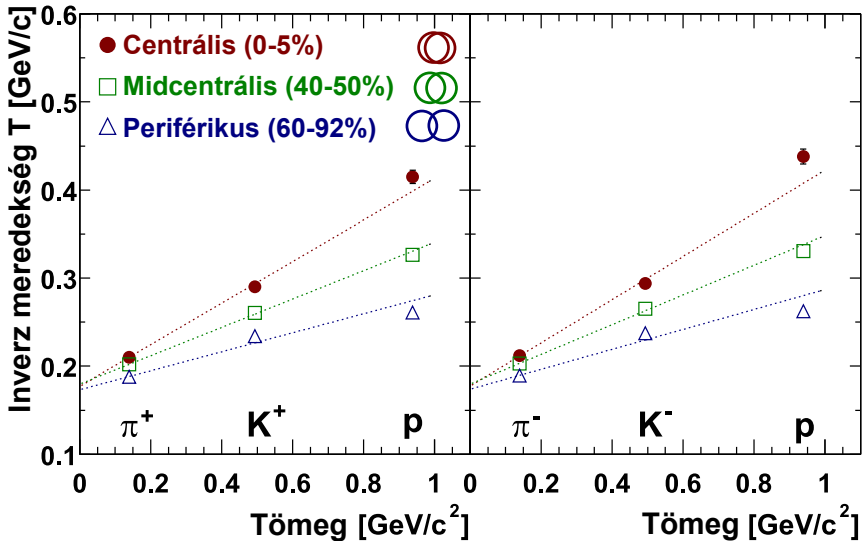
$$T_{\text{eff}} = T_0 + m \cdot u^2 \quad (12.4)$$

módon adódik. A 72. ábrán látható, hogy a mérések igazolták ezt a lineáris tömegfüggésre vonatkozó jóslatot. Kiderült az is, hogy a hadronspektrumokban látható hőmérséklet $T_0 = 160$ MeV körüli értéket vesz fel. Mivel a hadronok a fent részletezett kifagyáskor keletkeznek, mikor a közeg az átmenetnek megfelelő hőmérsékletre hűl, ezért a fenti érték egyúttal a kvarkanyag és a hadronikus anyag közötti átmenet hőmérsékletét is megadja. A fenti módon mért érték kiváló összhangban van az elméleti (numerikus, diszkrétizált téridőrácsos végzett) QCD számításokkal is – ez utóbbiakat lásd például a Budapest–Marseille–Wuppertal-csoport Phys. Lett. B **643** (2006) 46 publikációjában.

Nem teljesen centrális ütközésekben ezen termalizált közeg kezdeti állapota egyfajta ellipszoid vagy mandulaalakot ölt (lásd a 73. ábrán). A kezdeti geometria tehát egyfajta elliptikus aszimmetriát mutat a z irányú nyalábra merőleges $x - y$ síkban (ahol a két atommag kezdeti impulzusát tartalmazó sík az $x - z$ eseménysík). Kérdés, hogy a végállapotban (a hadronok impulzuseloszlásában) megjelenik-e ez, azaz a részecskék azimut-szög (azaz az impulzusuk $x - y$ síkban vett iránya) szerinti eloszlása aszimmetrikus-e. Ennek a kérdésnek az eldöntésére jelöljük az impulzus $x - y$ síkban vett (transzverz) komponensét p_t -vel, az azimut-szöget ϕ -vel, és vegyük a keletkező részecskék impulzuseloszlásának ϕ szerinti Fourier-sorát! Ezt a következő alakban szokták írni:

$$N(p_t, \phi) = N(p_t) \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} v_n \cos(n\phi) \right]. \quad (12.5)$$

Elméletileg a páratlan n -hez tartozó tagok, ahogy a fel sem tüntetett szinuszosak is, elhanyagolhatóak az $x - z$ ($\phi = 0$) és az $y - z$ ($\phi = \pi/2$) síkra való tükrözési szimmetria miatt. Érdekeség, hogy ha eseményenként nézzük (lásd a 68. ábrát), akkor a kezdeti állapot fluktuációja miatt a páratlan tagok is megjelennek, különös tekintettel a v_3 együttathóra: ez a mai kutatások egyik fontos új irányát jelenti. Ha azonban sok eseményt kiátlagolunk, és az $x - z$ eseménysíkhöz képest vesszük az eloszlást, akkor annak Fourier-sorában az első lényeges együttathó a v_2 lesz. Ez az úgynevezett elliptikus aszimmetria vagy elliptikus folyás (amely nem más, mint a $\cos(2\phi)$ mennyiségnek a szögeloszlás szerinti várható értéke). Ez azt méri, hogy mekkora a mért impulzuseloszlás tengelyes (forgási) szimmetriától való eltérése az $x - y$ síkban.



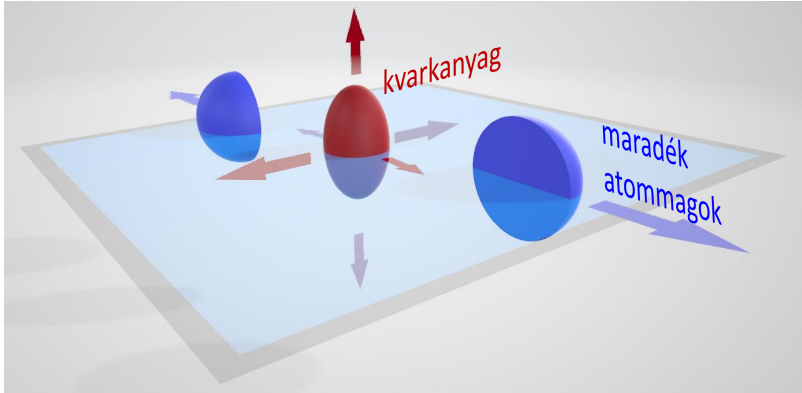
72. ábra. Az Au + Au ütközésekben észlelt, azonosított részecskék spektrumának meredekségéből adódó T hőmérsékleti paraméter tömegfüggése. Jól látható a hidrodinamikai, lineáris viselkedés. Az ábra forrása a PHENIX kísérlet Phys.Rev.C69 (2004) 034909 publikációja.

Ha a közeg, ami létrejött, olyan, hogy benne a részecskék szabad úthossza nagy, nincs köztük gyakori kölcsönhatás, és egyfajta gázjellegű halmazállapotban vannak, akkor ez az elliptikus aszimmetria a kezdeti geometriai aszimmetria ellenére kicsi lesz. Ha azonban a közeg részecskéi közötti kölcsönhatás erős (abban az értelemben, hogy jelentős mértékű), a szabad úthossz kicsi, és a halmazállapot inkább folyadékra hasonlít: ebben az esetben a kezdeti geometriai aszimmetria erős impulzustérbeli elliptikus aszimmetriához vezethet. Onnan is kiindulhatunk, hogy a nyomásgradiens az esemény síkban nagyobb, mint arra merőlegesen (hiszen a nyomás középen nagy, míg az ellipszoidon kívül kicsi). Ekkor a nagy nyomásgradiens az esemény síkban nagyobb tágulást hoz létre, és a tágulási anizotrópia a kifagyás során a hadronimpulzusok anizotrópiájában is megnyilvánulhat – amennyiben a rendszer tágulását a nyomásgradiens irányítja.

A mérések azt mutatták, hogy valóban ez utóbbi helyzet áll fenn: a különféle hadronokra vonatkoztatott v_2 korántsem elhanyagolható, tehát az anyag halmazállapota folyadék. Azóta részletesebb vizsgálatok sikeres elvégzése nyomán azt is megtudtuk, hogy a forró anyagból keletkező fotonok és a nehéz kvarkok aszimmetriája is a közeg aszimmetriáját követi.

Ha a v_2 a körhöz képesti elliptikus aszimmetriát jelöli, akkor a v_4 együtttható pedig egyfajta kvadrupólus aszimmetriát – ez tulajdonképpen a $\cos(4\phi)$ -nek a szögeloszlás szerinti átlaga. A folyadék tágulásának belső súrlódása (viszkózitása) ezt a magasabb rendű anizotrópiát hamarabb kimosná, mint a v_2 nemnulla értékét. Azonban a mérések szerint a v_4 sem elhanyagolható, ahogy az például a PHENIX kísérlet Phys.Rev.Lett. 107 (2011) 252301 publikációjában olvasható. Ebből, és a nehéz kvarkok R_{AA} és v_2 értékeiből⁴⁰ következő igen csekély diffúziós együttthatóból arra következtettek (lásd

⁴⁰ A nehéz kvarkok és a belőlük keletkező hadronok vizsgálata igen gazdag területe a nagyenergiás



73. ábra. Az ütközés nyomán kialakuló régiók. Az atommagok egy része átfed, ebből alakul ki a gyorsan táguló kvarkanyag. A magok maradék része „háborítatlanul” továbbhalad, a központi régióban azonban óriási energia koncentrálódik, a létrejövő forró és sűrű anyag pedig robbanás-szerűen tágul. A kezdeti geometria a mért impulzuseloszlásokban is tükröződhet. A fenti ábra annyiban torzít, hogy valójában a központi régió is közel fénysebességgel tágul a longitudinális irányban, tehát nem alakul ki ilyesfajta „szünet” az ütközésben részt nem vevő, továbbhaladó atommag-töredékek és a központi régió között.

például a PHENIX kísérlet Phys.Rev.Lett. **98** [2007] 172301 publikációját), hogy a közeg belső sűrűdése, pontosabban az úgynevezett kinematikai viszkozitása nagyon kicsi. Ez alatt itt a nyírási viszkozitási együttható (η) és az entrópiasűrűség (s) hányadosát értjük, amely tulajdonképpen az impulzusban vett diffúziót írja le – ezért egyenlítően ez ki a kisebb impulzustérbeli aszimmetriákat, mint a v_4 . Az aszimmetria azonban jelen van a végállapotban, a hadronok szögeloszlásában is, az η/s kinematikai viszkozitás tehát roppant kicsi. Ezen mérések szerint a nagyenergiás nehézion-ütközésekben észlelt kvarkanyag viszkozitása megközelíti az tér- és gravitációelméleti (dualitáson alapuló) számolásokból a Phys.Rev.Lett. **94** (2005) 111601 publikációban kapott

$$\frac{\eta}{s} \leq \frac{\hbar}{4\pi} \quad (12.6)$$

alsó korlátot. A mért kinematikai viszkozitás konkrét értéke a szuperfolyékony komponens is tartalmazó ultrahideg héliuménál is lényegesen kisebb, tehát tulajdonképpen itt is egyfajta tökéletes folyadékról beszélhetünk. Emellett egyszerűen belátható, hogy az intenzíven kölcsönható anyagban jelen lévő rövid szabad úthossz is kis kinematikai viszkozításra utal (a kettő éppen arányos egymással). Összességében tehát az derült ki, hogy a keletkező anyag nem közönséges folyadék, hanem elhanyagolható viszkozitással rendelkező tökéletes folyadék.

fizikának. Jelen jegyzetben azonban ezt a témakört nem érintjük.

Gyakorlófeladat

A kvarkanyag entrópiasűrűsége függjön $s = 16T^3 \sigma_{\text{SB}}$ módon a T hőmérséklettől, ahol $\sigma_{\text{SB}} = \pi^2/(60\hbar^3)$ a Stefan–Boltzmann-állandó ($k_{\text{B}} = 1$ és $c = 1$ egységekben). A fent említett $\hbar/4\pi$ alsó korlátot figyelembe véve mennyi lenne egy 200 MeV hőmérsékletű közeg minimális viszkozitása? Fejezzük ki ezt SI (J/m^2) egységben is!

12.3.3. A kvark szabadsági fokok megjelenése

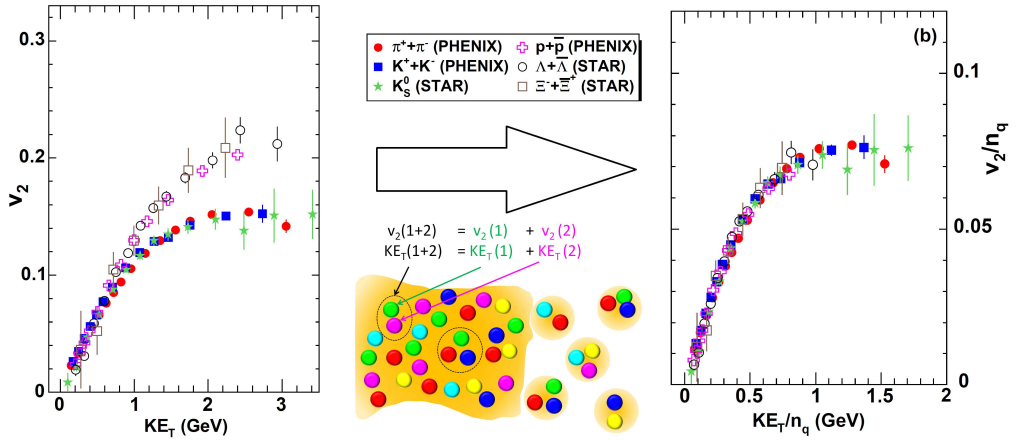
A fent említett elliptikus aszimmetria (elliptikus folyás, v_2) különféle hadronokra vett energiafüggésében érdekes skálázási viselkedés volt felfedezhető. A mezonok (pl. π , K , ϕ) és a barionok (pl. proton, Λ , Σ) mért v_2 értékei a p_t transzverz impulzus függvényében különböző görbéket követnek. Ha azonban a v_2 -t a kinetikus energia függvényében ábrázoljuk, és ezt és az aszimmetriát is átskálázzuk a hadront alkotó kvarkok számával,⁴¹ akkor egyetlen görbét kapunk (lásd a 74. ábra). Koaleszcencia-modellekben (amelyek a kvarkok hadronokká alakulását vizsgálják) egyszerűen igazolható, hogy ha a hadronok egy kvarkok alkotta közegből jöttek létre, akkor a hadronok mozgási energiája és elliptikus folyása is éppen a kvarkok n_q számával skáláz:

$$v_{\text{hadron}}(E_{\text{hadron}}) = n_q v_q(E_q), \quad (12.7)$$

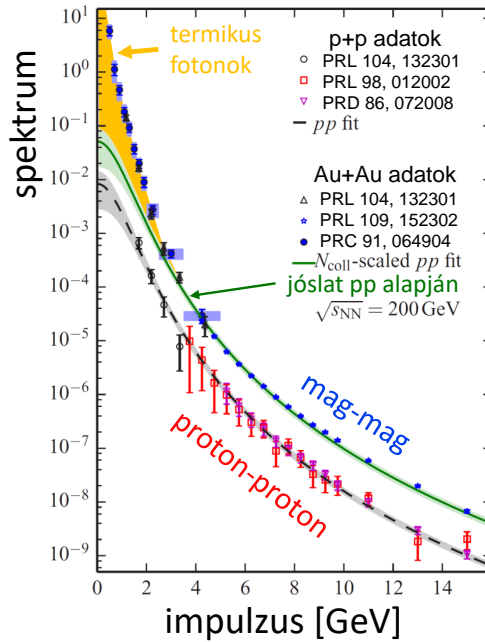
ahol v_q a kvarkközeg elliptikus folyása, míg $E_q = E_{\text{hadron}}/n_q$ az adott hadront alkotó kvarkok (mozgási) energiája. Így tehát a megfigyelések alátámasztják ezt a képet, hogy a kollektív mozgás a kvarkok szintjén jön létre, azaz ők hordozzák a meghatározó szabadsági fokokat a kifagyás előtti közegben. Erre a megfigyelésre mondhatjuk azt tehát, hogy valóban kvarkokból és gluonokból áll az ütközésekben létrejövő közeg; megtörtént a kvarkoknak a hadronokból való „kiszabadulása” (angol szóval: deconfinement).

További fontos kérdés azonban, hogy mennyi volt a kezdetben (a termalizáció után) uralkodó hőmérséklet. Az erősen kölcsönható anyagon (a fentiekben bemutatott R_{AA} mérések tanúsága szerint) a fotonok szinte akadálytalanul áthatolnak, így ezek az anyag időfejlődésének kezdeti szakaszairól is árulkodnak, általuk hozzáférhetővé válik az anyag kezdeti hőmérséklete (az általa kibocsátott hőmérsékleti sugárzás mérésével: itt ez a szokásos atomfizikai fotonenergiákhoz képest igen nagy, ~ 100 MeV fotonenergiákat jelent.) A fotonok ezen méréshez szükséges pontosságú észlelése a PHENIX kísérletben volt lehetséges. Azért jelent(ett) kihívást ez a mérés, mert meg kell különböztetnünk az ún. direkt fotonokat (ezek azok, amelyek közvetlenül az ütközési zónából, a közegből jönnek; ezek árulkod(hat)nak a hőmérsékleti sugárzásról is) azoktól a fotonoktól, amelyek különböző hadronok (pl. semleges pionok) bomlásaiban jönnek létre. Azonban végül ezt a bonyolult mérést is sikerült elvégezni a PHENIX kísérletben – lásd bővebben a Phys.Rev.Lett. **104** (2010) 132301 publikációt, illetve a 75. ábrát. Ez utóbbi a Phys. Rev. C **91** (2015) 064904 adatai alapján mutatja a mag-mag és proton-proton ütközésekben mért eloszlásokat. Ha utóbbit a mag-mag ütközésekben létrejövő nukleon-nukleon ütközések számával (N_{coll}) felskálázzuk, akkor jó egyezést kapunk; megjelenik ugyanakkor egy kisimpulzusú növekmény, amely minden bizonnyal a termikus fotonok

⁴¹ Valójában a hadronokban kvantumfluktuációk miatt rengeteg „tengerkvark” és gluon is megtalálható, itt azonban csak a hadront szigorú értelemben véve alkotó „valenciakvarkokról” van szó, úgy mint ahogy pl. a protont két u- és egy d-kvark alkotja.



74. ábra. Ha a transzverz síkban vett mozgási energia függvényében ábrázoljuk a különféle hadronok szögeloszlásának elliptikus aszimmetriáját, majd ezt visszakálazzuk a hadront alkotó kvarkok számával, az adatok egy görbére esnek. Ez azt támasztja alá, hogy a hadronok egy kvarkközegből jöttek létre. Az ábrán látható adatok forrása a PHENIX kísérlet Phys.Rev.Lett. **98** (2007) 162301 publikációja.



75. ábra. Direkt fotonok impulzuseloszlása proton-proton és mag-mag ütközésekben, a Phys. Rev. C **91** (2015) 064904 cikk összegző ábrája alapján. A részleteket lásd a szövegben.

(azaz a hőmérsékleti sugárzás) számlájára írható – ilyen ugyanis csak a mag-mag ütközésekben lép fel jelentős mértékben. A termikus fotonok spektrumát vizsgálva arra juthatunk, hogy a hűlés során az átlagos hőmérséklet legalább 224 MeV ($2,6 \cdot 10^{12}$ K), míg a kezdeti hőmérséklet legalább 350 MeV ($4 \cdot 10^{12}$ K).⁴² Ez a kezdeti hőmérséklet a mérési és elméleti bizonytalanságot is beleszámítva bőven a hadronok megolvastásához szükséges (elméleti QCD számítások és fenomenológiai megfontolások alapján megbecsült) hőmérséklet, 160 MeV ($2 \cdot 10^{12}$ K) felett van. Ez alapján kijelenthetjük, hogy a megfigyelt anyag kezdeti állapota semmiképpen sem lehet összhangban a kizárólag hadronikus anyagot feltételező képpel, vagyis így is leszűrhető, hogy új szabadsági fokok (a kvarkok) jelentek meg.

12.3.4. Az erősen kölcsönható kvarkanyag

Összességében tehát kijelenthetjük, hogy a RHIC kísérleteiben létrehozott anyag

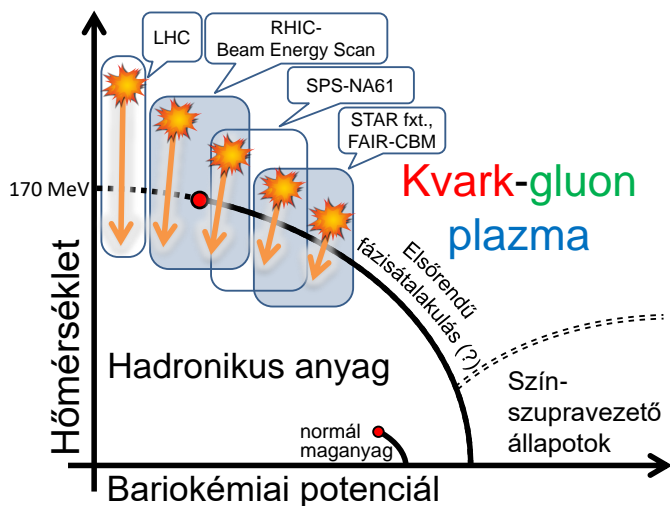
- olyan erősen kölcsönható, hogy femtométeres úthosszon is lelassítja részecskéket, még az extrém nagyenergiásakat is;
- igen kicsi benne a szabad úthossz, azaz folyadék halmazállapotú;
- szinte tökéletes folyadék, azaz elhanyagolható a kinematikai viszkozitása;
- kezdetben extrém magas hőmérsékletű, és megjelennek benne a kvark szabadsági fokok.

Mindezek alapján a felfedezett anyagot erősen kölcsönható, szinte tökéletes kvarkfolyadéknak nevezhetjük. A legfőbb tulajdonságait sikerült meghatározni, a vizsgálatok jelentős része azonban még hátravan. Fontos látni, hogy az LHC nehézion-fizikai kísérletei azóta a jelenségek egy részét megerősítették, például a jetelnyomás itt is tapasztalható, ahogy az elliptikus folyás és a direktfoton-eloszlás mérése is hasonló eredményt adott. Az ütközések lényegesen nagyobb energián zajlanak az LHC-nál, így a kezdeti állapot energiasűrűsége sokkal nagyobb, de hogy ez pontosan melyik jelenségekben hogyan nyilvánul meg – ez is a nehézion-fizikus közösség vizsgálatainak fókuszában van.

12.4. Az erős kölcsönhatás fázisdiagramja

A fentiek alapján bizonyítottnak tekinthető, hogy a RHIC és az LHC nehézion-ütközéseiben kvarkfolyadék jön létre, majd a tágulása során hadronikus anyaggá alakul, és ezen hadronokat észleljük detektorainkkal. Felmerül tehát a kérdés, hogy milyen jellegű az átmenet, azaz hogyan tér vissza a kvarkanyag a hadronos formába, miként történik a kifagyás. Elméleti és kísérleti eredmények szerint az átalakulás nem elsörendű fázisátmenet (mint amilyen a hagyományos víz-gőz átalakulás), hanem „cross-over” típusú folytonos átalakulás, mint a víz-gőz átmenet a kritikus pont felett (lásd a 76. ábrát). Mindez a RHIC $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV ütközési energiája, illetve az LHC még nagyobb energiái esetén igaz, ahol a barionsűrűség (amely a barionok és antibarionok számának különbségével függ össze) közel nulla. Kisebb ütközési energia esetén azonban nagyobb a barionsűrűség, erről a régióról lényegesen kevesebb ismeretünk van – effektív elméletek és fenomenológiai gondolatmenetek alapján azonban a várakozások szerint igen

⁴² A mérés eredménye bekerült a Guinness-rekordok közé is, mivel ez az ember által dokumentáltan előállított legnagyobb hőmérséklet.



76. ábra. A maganyag fázisdiagramja, az elsőrendű fázisátmenetet jelző folytonos vonallal, az ennek végénél található, feltételezett kritikus ponttal (pirossal jelölve), utána a folytonos átmenet tartományával (szaggatott vonallal jelölve) és az egyes gyorsítók által elérhető tartománnyal. A szaggatott vonal a kísérletek és elméleti számítások szerint kb. 160 MeV hőmérsékletnél metszi a függőleges tengelyt, egyéb, kísérletileg is megerősített információ nem áll rendelkezésre.

nagy barionsűrűség esetén elsőrendű fázisátmenetre kerülhet sor. További sejtés az, hogy a kvark- és a hadronfázist elválasztó, elsőrendű fázisátmenetet kijelölő határvonal egy kritikus pontban ér véget, ahogy a 76. ábra is illusztrálja. A különféle energiájú és centralitású ütközésekhez tartozó kifagyási hőmérsékleteket és bariokémiai potenciálokat (ez utóbbi a barionsűrűségből származtatható) a STAR kísérlet meghatározta a Phys.Rev.C **96** (2017) 044904 publikációban. Ez alapján míg 200 GeV/nukleon energián a bariokémiai potenciál 20 MeV körül van, addig 7,7 GeV/nukleon energián akár a 400 MeV-et is elérheti. Nem világos jelenleg, hogy létezik-e a kritikus pont, és ha igen, ezen tartományba esik-e. A STAR végez céltárgyas kísérleteket is, amelyekkel 3 GeV/nukleon tömegközépponti energiáig tud lemenni, míg az SPS gyorsító NA61/SHINE kísérlete az 5-17 GeV/nukleon energiatartományt éri el. Ezekén felül világszerte több gyorsítót és kísérletet terveznek a fázisdiagram vizsgálata céljából: a németországi GSI-ben a FAIR gyorsítót, az oroszországi Dubnában a NICA gyorsítót, míg Japánban a JPARC-HI komplexumot tervezik megépíteni. Ezeknél sorrendben a CBM, az MPD és a BM@N, illetve a JHITS kísérletek üzemelnek majd. A további részletek azonban messze túlmutatnak jelen jegyzet keretein.

A 19. század végétől kezdve forradalmak zajlottak le a fizikában. Ezek nyomán gyökeresen új képet kaptunk arról, hogy miként működik a világ az elérhető legkisebb méretskálákon. Mindebben elengedhetetlen szerepük volt egyes „sorsfordító” kísérleteknek, elméleti innovációknak és általában a kísérleti és elméleti kutatások párhuzamos fejlődésének.

Jelen kötetben az atomok, atommagok és részecskék fizikájának legfontosabb eredményeit tekintjük át, kezdve az atomelmélet kialakulásától és az első atommodellektől, a kvantummechanika születésén, matematikai alapjain és atomfizikai alkalmazásain át a magfizikáig és a részecskefizika alapjaiig. Minden témakörben igyekeztünk a kísérleteket vagy számolásokat bemutató eredeti publikációkra is hivatkozni, hogy az elhivatott olvasó részletesebben is utánajárhasson egy-egy témakörnek. Emellett gyakorlófeladatokat is feladtunk, remélve, hogy ezek segítik az adott terület elmélyítését.

A jegyzetben az empirikus bizonyítékokra legalább akkora hangsúlyt fektettünk, mint az elméleti háttérre. Ez azért is fontos, mert így kiderül, hogy egyes új fizikai elméletek igencsak ellentétesek egyes hétköznapi tapasztalatokkal. Emiatt is hasznos megértenünk, hogy milyen kísérleti tények kényszerítették ki egy adott elmélet bevezetését. Mindebből az is kiderül, hogy ha matematikai vagy tudományfilozófiai szempontból egy „szébb” elméletet alkotnánk meg, akkor az új hipotézisnek számtalan már ismert kísérleti eredménynek kellene megfelelnie. Ennek tudatosítását is szolgálja a kísérleti eredmények részletes ismertetése. Végző soron Richard Feynman állítása motivál bennünket: „Ha ellentmond a kísérleteknek, akkor az elméletünk hibás”.



ELTE | TTK
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

ELTE
EÖTVÖS
KIADÓ

