

# Atomfizika

Az időtől független Schrödinger-egyenlet (energia sajátérték-  
egyenlet), 3D

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(x, y, z)$$

A **Laplace operátor** derékszögű koordinátarendszerben

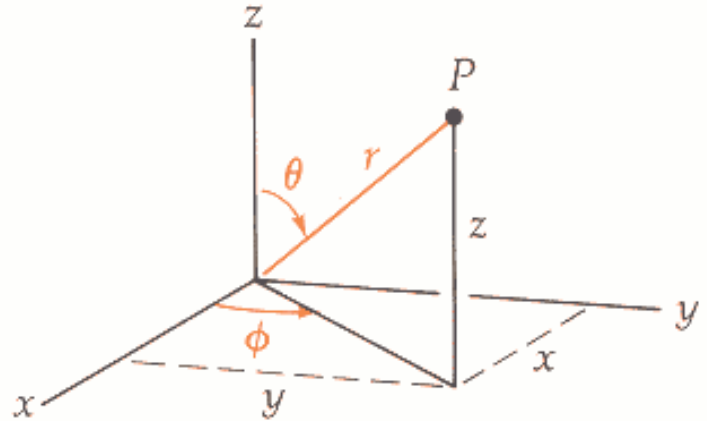
$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

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

## A H-atom

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$$



A **Laplace operátor** gömbi (térbeli polár-) koordinátarendszerben

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

A sajátérték egyenlet (Schrödinger-egyenlet):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r, \theta, \phi) + U(r) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

## A Schrödinger egyenlet megoldásának fő lépései

(1) A parciális differenciálegyenlet szeparálása

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$R(r)$       radiális tényező

$\Theta(\theta)$       poláris tényező

$\Phi(\phi)$       azimutális tényező

Három közönséges differenciálegyenletet kapunk.

*Reguláris* függvény (folytonos, egyértékű, négyzetesen integrálható) megoldásokra szorítkozunk. A térbeli polár-koordináták mindegyikéhez adódik egy, a megengedett megoldásokat kijelölő **kvantumszám**. Ezen megoldások mindegyike az *atom egy kvantumállapotát* képviseli

(2)

Az  $R(r)$  radiális hullámfüggvény  $r \rightarrow \infty$   $\psi \rightarrow 0$

határfeltételt kielégítő megoldás csak az  $n$  főkvantumszám 1, 2, 3, ... egész értékeinél létezik.

Az elektron energiája csak a  $n$  főkvantumszámtól függ:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

(3)

A határfeltételeket kielégítő  $\Theta(\theta)$  poláris függvény eredményezi az  $l$  *mellékkvantumszámot* (*orbitális kvantumszámot*), mely adott  $n$  estén az

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

értékeket veheti fel. Ettől a kvantumszámtól függ a az elektron proton körüli pályájának pályá-impulzusmomentuma.

A pályá-impulzusmomentum  $l$  diszkrét értékei miatt kvantált, hossza

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

(4)

A harmadik  $m_l$  kvantumszám a  $\Phi(\phi)$  azimutális függvény egyértékűségi követelményéből következik. Ez a *mágneses kvantumszám* adott  $l$  esetén az

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad \text{mágneses kvantumszám}$$

értékeket veheti fel.

$m_l$  kvantumszám határozza meg az  $L$  impulzusmomentum  $z$ -komponensének értékét

$$L_z = m_l \hbar \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Az  $L$  pálya-impulzusmomentumhoz *mágneses dipólusmomentum* tartozik

$$\mu_l = -\left(\frac{e}{2m}\right)L$$

A mágneses dipólusmomentum  $z$ - komponense szintén kvantált

$$(\mu_l)_z = -\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)m_l$$

BOHR-  
MAGNETON

$$\left(\frac{e\hbar}{2m}\right) = 9.27 \times 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$$



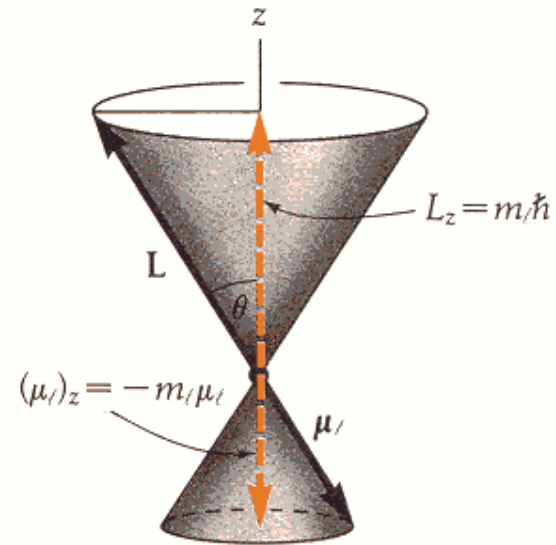
$L$  közvetlenül nem mérhető. A mágneses dipólusmomentum  $z$ -komponense mérhető, ezzel észlelhetjük  $L$  diszkrét irányait.

A szemléletességet segíti a vektormodell.

$L$  precessziós mozgást végez a  $z$ -tengely körül

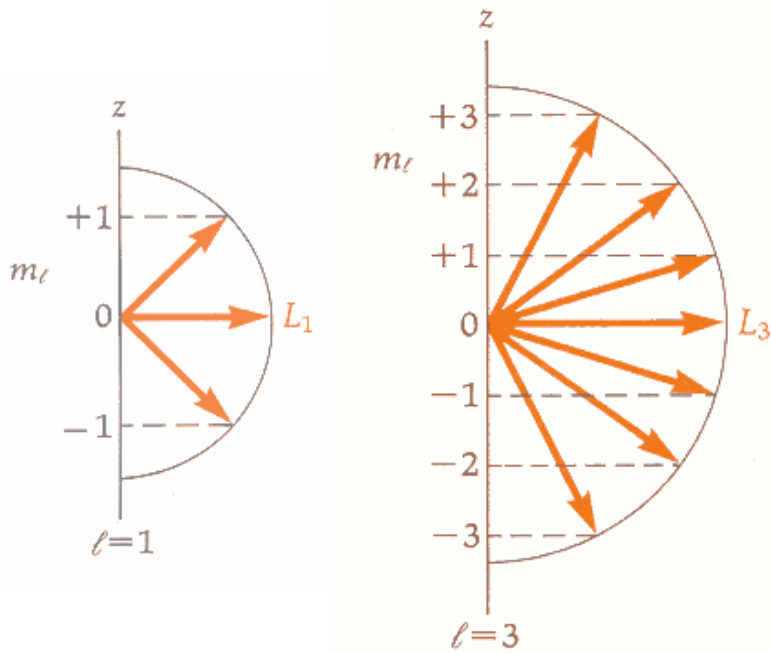
$$\Delta L_z \Delta \phi \geq \frac{\hbar}{2}$$

Más kísérleti adatunk nem lehet, mint a vektor abszolút értéke és vetülete a  $z$ -tengelyre.



**FIGURE 44-3**

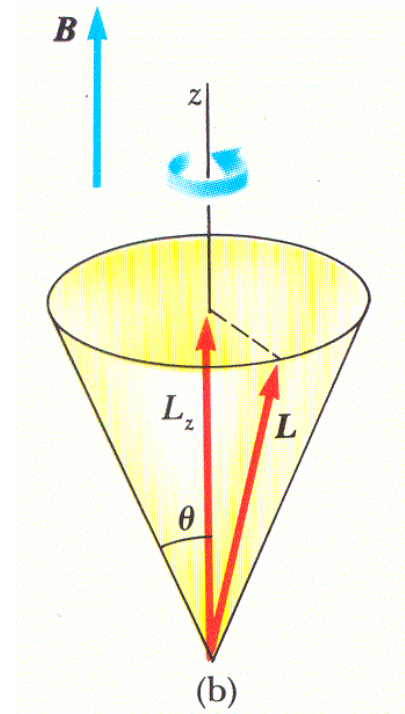
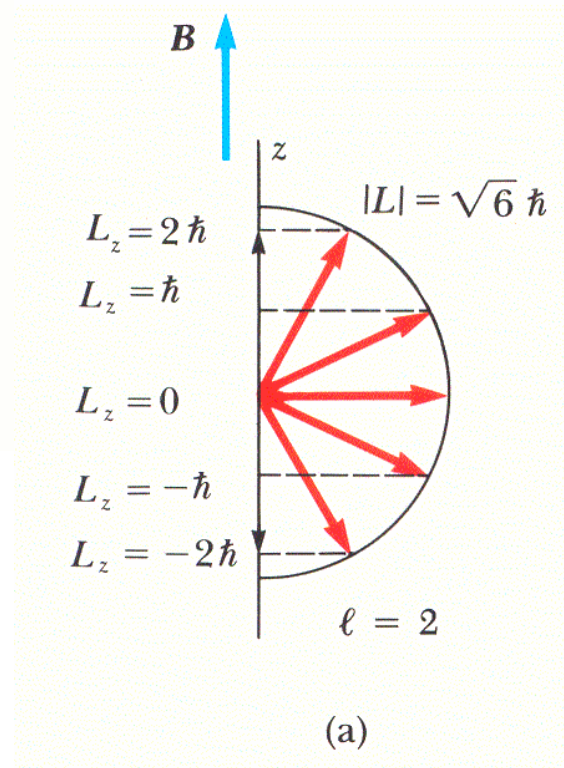
A *vector model* for visualizing the quantized spatial orientations of vector quantities in quantum mechanics. Here we show one of the possible orientations for  $L$  and its projection on the  $z$  axis. The vectors  $L$  and  $\mu_l$  precess together about the  $z$  axis.



**FIGURE 44-2**

The allowed values of  $L_z = m_l \hbar$  for two different values of  $\ell$  (drawn to different scales). The values of  $m_l$  are the integral numbers along the  $z$  axis, covering all possibilities from  $+\ell$  to  $-\ell$ . The magnitude of

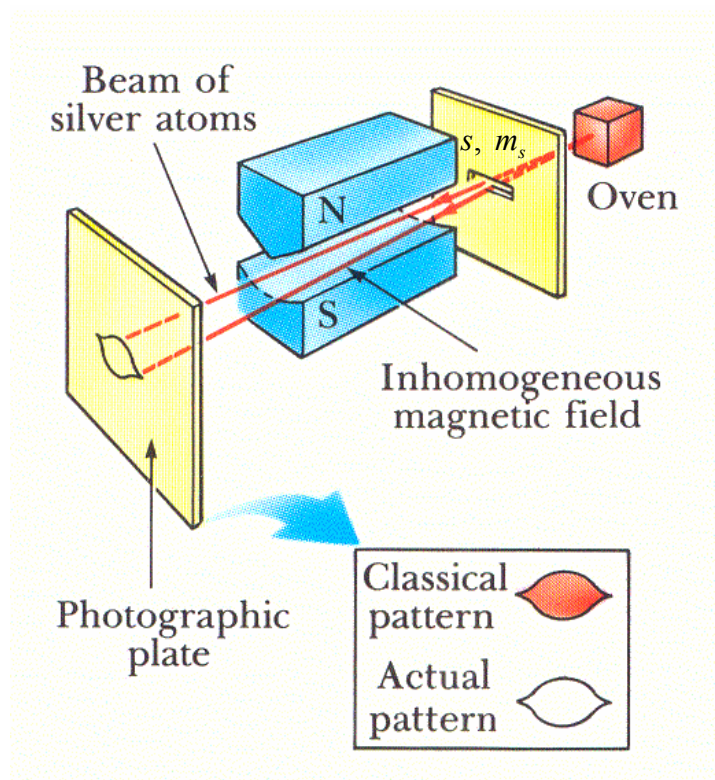
$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar.$$

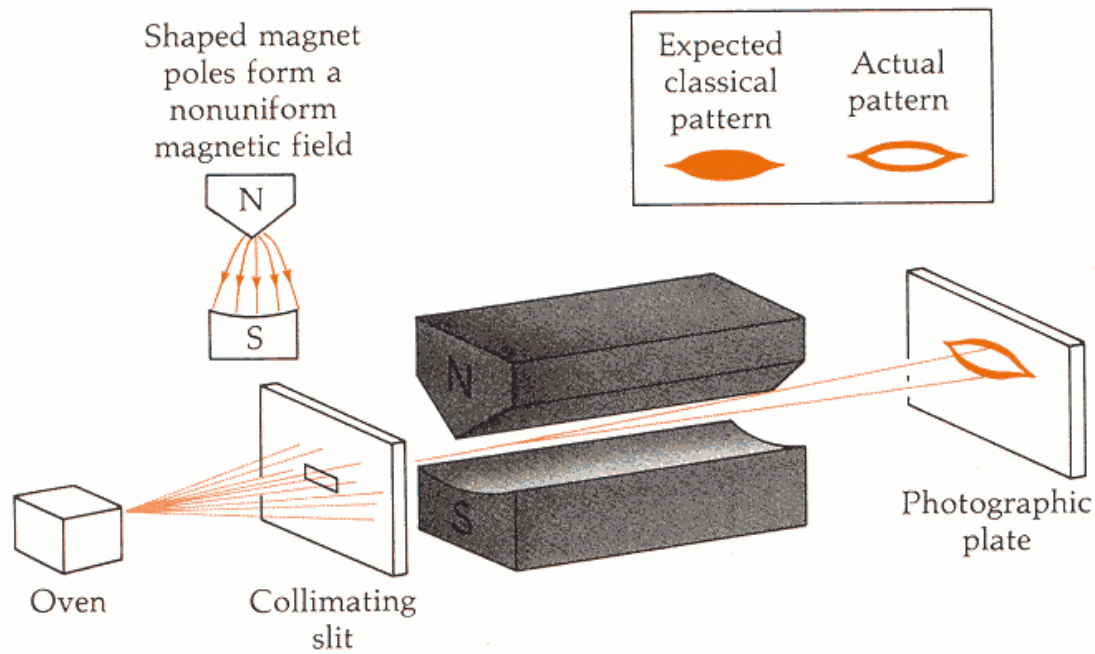


# Az elektronspin

Stern-Gerlach kísérlet (1922)

Ezüst atomnyaláb eltérése *inhomogén mágneses* térben. Az Ag atom *mágneses dipólusmomentuma* az egyetlen vegyértékelektronjától származik, melynek nincs pályá-impulzusmomentuma ( $l=0$ )





**FIGURE 44-4**

The Stern–Gerlach experiment (1922) demonstrates the spatial orientation of spin magnetic moments in a magnetic field. A beam of neutral silver atoms is sent through a nonuniform magnetic field. The magnetic moment of the silver atom is due solely to the single valence electron, which has zero *orbital* magnetic moment ( $\ell = 0$ ); only the *spin* magnetic moment for that electron is present. Classically, a single smeared pattern is expected since the magnetic moments of the atoms in the beam should be able to have any orientation as they pass through the field. Instead, the beam splits into two distinct lines, verifying the spatial orientation of spin magnetic moments in a magnetic field. The spin magnetic moments align either *parallel* or *antiparallel* to the field direction, and the nonuniform field then pushes them either up or down to form the double-line pattern.

S.A. Goudsmit és G. E. Uhlenbeck (1925)  
spektrumvonalak finomszerkezete

Az elektronnak *saját impulzusmomentuma* (saját perdülete), „spinje” van, melyhez *mágneses momentuma* is tartozik. A mágneses momentum mérhető. Az elektron-spinnek (és az elektron saját mágneses momentumának) a külső mágneses térhez képest csak *két beállási lehetősége* van.

Az elektron-spinhez tartozó kvantumszámok  $s, m_s$

$$s = \frac{1}{2} \qquad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)} \qquad s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = m_s \hbar \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

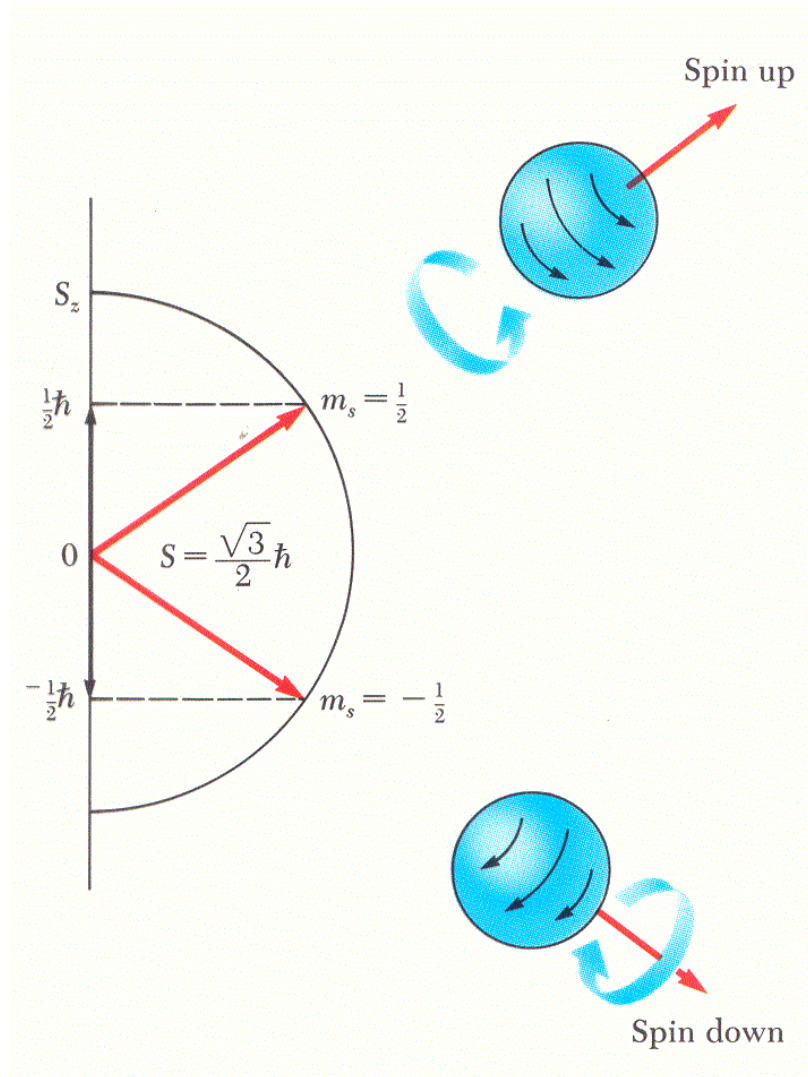
$$S_z = +\frac{1}{2} \hbar$$

$$S_z = -\frac{1}{2} \hbar$$

A spin-mágnesesmomentum z-komponense

$$(\mu_s)_z = -\left(\frac{e\hbar}{m}\right) m_s \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Az elektron-spinhez tartozó mágneses momentum kétszer akkora, mint a pályamomentumhoz tartozó.



A spin vektormodellje

A hidrogén megengedett állapotait jellemző kvantumszámok:

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

KVANTUM  
SZÁMOK

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

P. A. M. Dirac (1928)

Az elektron relativisztikus hullámmechanikai tárgyalása (Dirac egyenlet)

Az egyenletből kiadódik az elektron-spin és az egyenlet megjósolta az elektron anti-részecskéjének a pozitronnak a létezését.

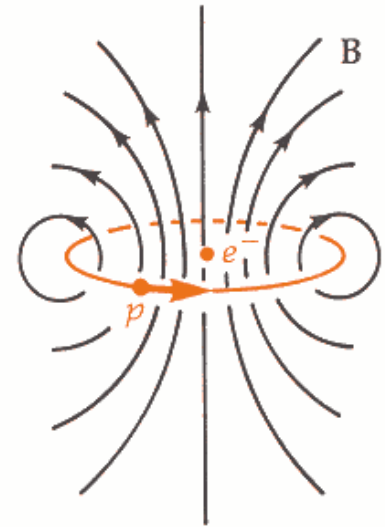


## A spin-pálya csatolás

A spektrumvonalak finomszerkezete az elektron spinjéből és a pályamenti mozgásából származó dipólusmomentumok kölcsönhatása következtében jön létre. A két momentum kölcsönhatása a **spin-pálya kölcsönhatás**.

Az elektronhoz rögzített vonatkoztatási rendszerben a proton kering az elektron körül és  $\mathbf{B}$  mágneses teret hoz létre az elektron helyén. Ehhez képest az parallel vagy antiparallel módon állhat be.

A potenciális energiához hozzáadódik az elektron saját mágneses momentumának potenciális energiája. Az energiaszintek felhasadnak (dublettek).



Az elektron saját mágneses dipólus-momentumának potenciális energiája a „keringő” mag (proton) által keltett mágneses térben

$$U = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$$

$$\boldsymbol{\mu} = -\left(\frac{e}{m}\right)\mathbf{S} \quad \mathbf{B} \propto \mathbf{L}$$

$$U \propto \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

*L-S* csatolás

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

*J* teljes impulzusmomentum

$$J = \hbar\sqrt{j(j+1)} \quad j = l \pm \frac{1}{2}$$

$j$  a belső kvantumszám

$$J_z = m_j \hbar \quad m_j = j, (j-1), (j-2), \dots, -(j-2), -(j-1), -j$$

$(2j+1)$   $m_j$  érték

$$(l + \frac{1}{2})$$

$$(l - \frac{1}{2})$$

$$n, l, m_l, m_s$$

$$n, l, j, m_j$$

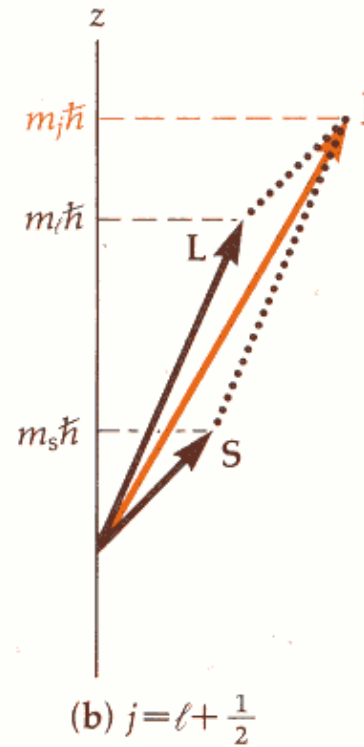
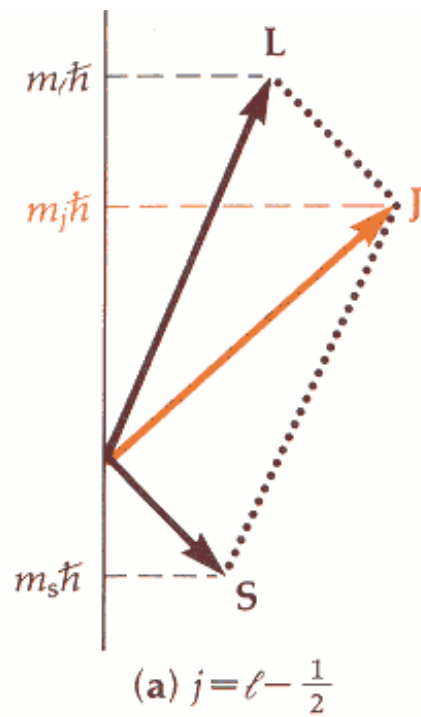
ALTERNATÍV  
KVANTUMSZÁMOK

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

$$j = l \pm \frac{1}{2}$$

$$m_j = j, (j - 1), \dots, -(j - 1), -j$$



**FIGURE 44-6**

In L-S coupling, the orbital and spin angular momenta may add in two ways to form the total angular momentum  $\mathbf{J}$ . Because of the unusual quantized values for their magnitudes,  $L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}$ ,  $S = \sqrt{s(s + 1)}$ , and  $J = \sqrt{j(j + 1)}$ , these vectors can add only at certain discrete angles.

# A hidrogénatom kvantumállapotai

Spektroszkópiai jelölés  
(alhéjak)

$l$	0	1	2	3	4	5
	s	p	d	f	g	h

Pl.  $1s_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{3}{2}}$

A **héjak** jelölése  
(röntgensugárzással  
kapcsolatban)

$n$	1	2	3	4	5	6	7
	K	L	M	N	O	P	Q

A  $3p$  elektron az M héjon és a  $p$  alhéjon helyezkedik el.

**TABLE 44-1** States Based on the Quantum Numbers  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$ , and  $m_s$ .

$n$	$\ell$	$m_\ell$	$m_s$
1	0	0	$+\frac{1}{2}$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	0	0	$+\frac{1}{2}$
2	0	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	0	$+\frac{1}{2}$
2	1	0	$-\frac{1}{2}$
2	1	+1	$+\frac{1}{2}$
2	1	+1	$-\frac{1}{2}$
2	1	-1	$+\frac{1}{2}$
2	1	-1	$-\frac{1}{2}$

**TABLE 44-2** States Based on the Quantum Numbers  $n$ ,  $\ell$ ,  $j$ , and  $m_j$ .

$n$	$\ell$	$j$	$m_j$
1	0	$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
1	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
2	0	$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
2	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
2	1	$\frac{3}{2}$	$+\frac{3}{2}$
2	1	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$
2	1	$\frac{3}{2}$	$+\frac{1}{2}$
2	1	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$
2	1	$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
2	1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

# A hidrogénatom energiaszint diagramja

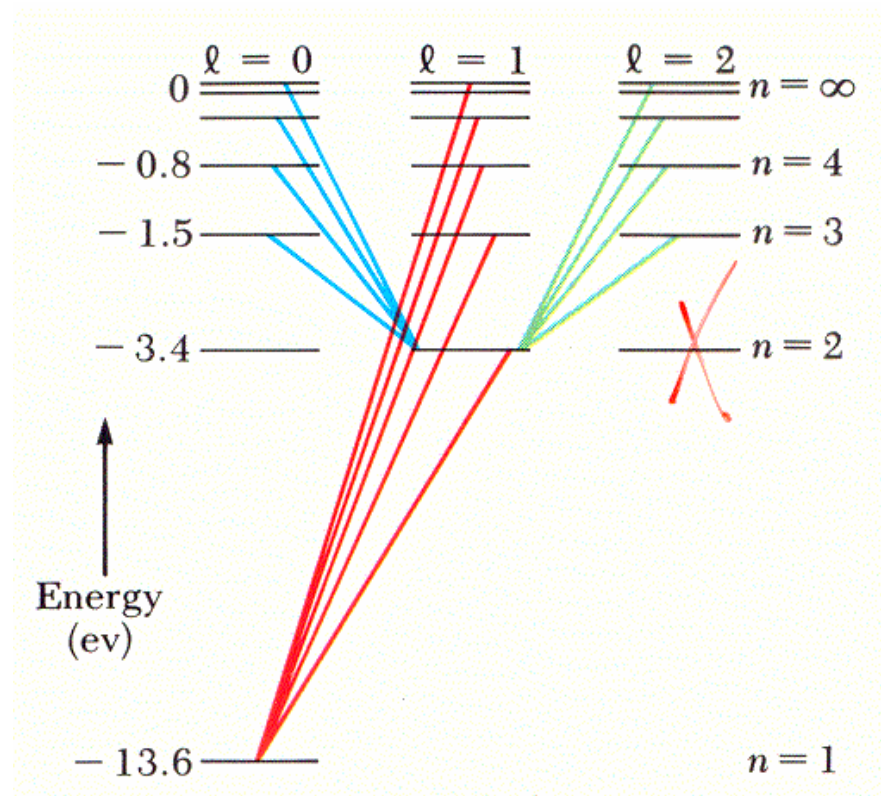
$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots)$$

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

A foton spinje  $\hbar$

az impulzusmomentum  
megmarad.

KIVÁLASZTÁSI SZABÁLYOK  
megengedett átmenetek



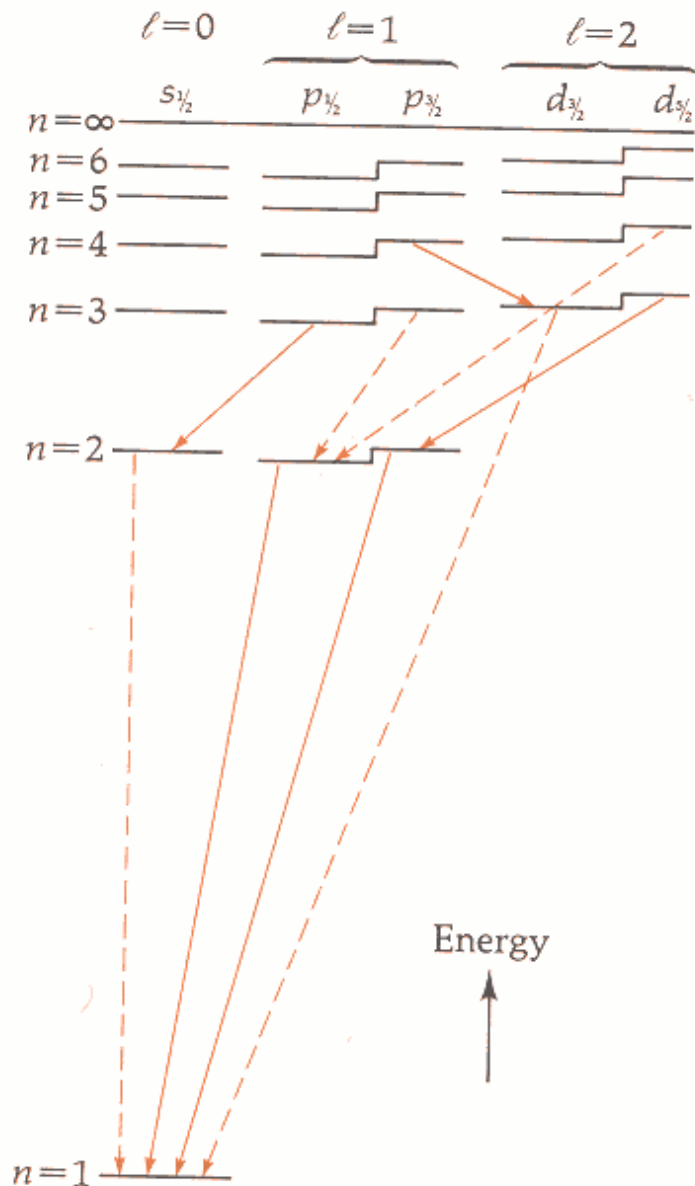
$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$



A spin-pálya kölcsönhatás nélkül a H-atom energiaszintjeinek degenerációja  $2n^2$  lenne.

A  $j=l+1/2$  és a  $j=l-1/2$  nívók energiája különböző, a  $3p_{3/2}$  energiája kicsit nagyobb, mint a  $3p_{1/2}$  energiája.



**FIGURE 44-7**  
 Energy-level diagram for hydrogen, including fine structure. The solid lines indicate some of the allowed transitions. The dashed lines illustrate *forbidden transitions*, which violate the selection rule  $\Delta l = \pm 1$ . (See Footnote 7.) The fine-structure splitting of the energy levels is greatly exaggerated in this diagram.

## A hidrogénatom hullámfüggvényei

Alapállapot (1s)  $\psi(r, \theta, \phi) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-(r/a)}$

BOHR-SUGÁR  $a \equiv \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0.0529 \text{ nm}$

s állapotban az elektronnak nincsen pálya-perdülete!

Hol van az elektron?

$$\mathcal{P} = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$$

$$dV = 4\pi r^2 dr$$

A térfogatelem az  $r$  sugarú  $dr$  vastagságú gömbhéj térfogata

Annak a valószínűsége, hogy az elektront a magtól az  $r$  távolságra lévő  $dr$  vastagságú gömbhéjban találjuk

$$\mathcal{P} = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$$

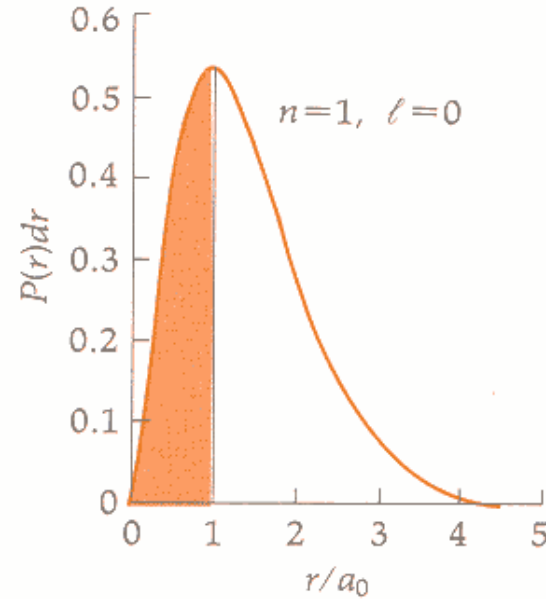
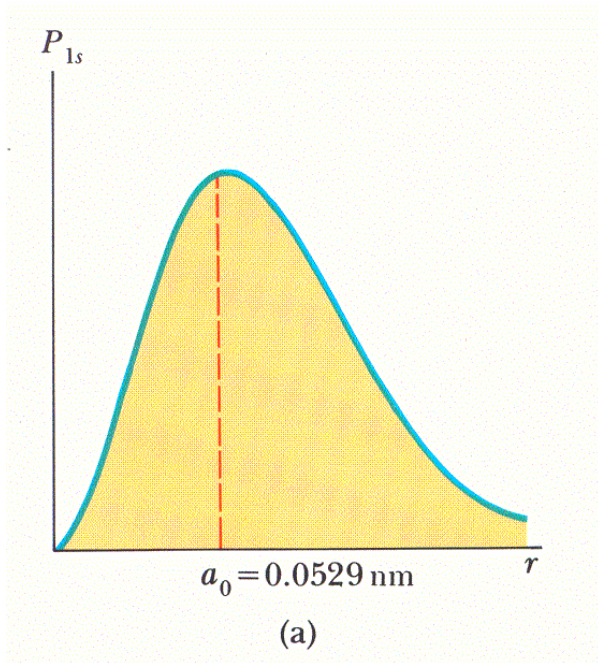
$$\mathcal{P} = P(r)dr \quad P(r) \text{ a radiális valószínűség-sűrűség függvény}$$

$$P(r) = |\psi|^2 4\pi r^2$$

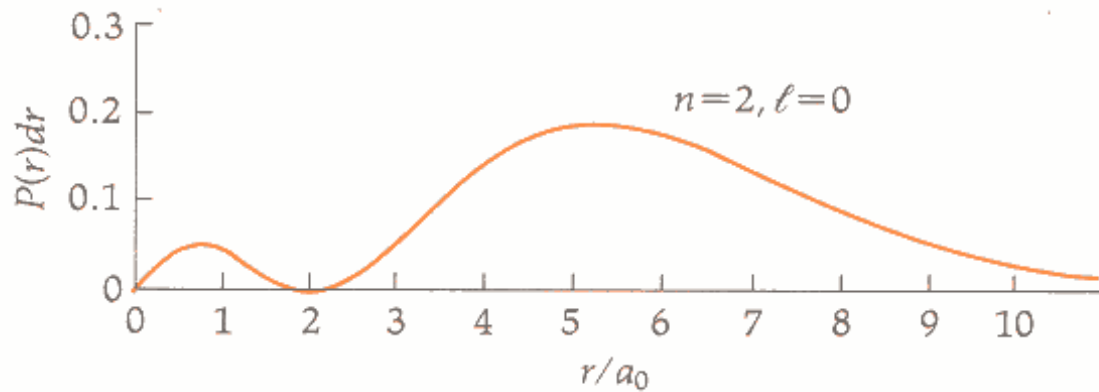
$$\mathcal{P} = \left( \frac{1}{\pi a^3} \right) e^{-(2r/a)} 4\pi r^2 dr$$

A  $P(r)$  radiális valószínűség-sűrűség függvény: 
$$P(r) = \left( \frac{4r^2}{a^3} \right) e^{-(2r/a)}$$

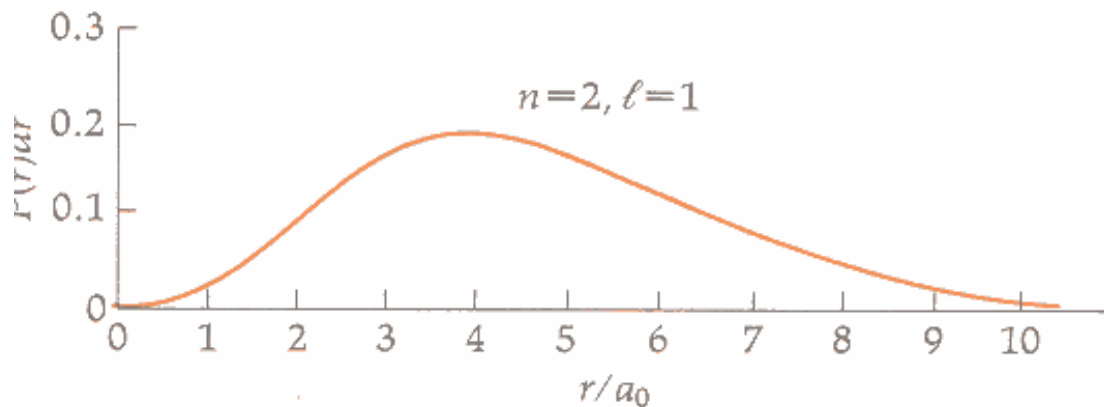
Az elektron legvalószínűbb tartózkodási helye a  $P(r)$  radiális valószínűség-sűrűség függvény maximumánál van. Ha kiszámítjuk ennek értékét, a Bohr sugarat kapjuk.



(a) The 1s state ( $n=1, \ell=0$ ). The shaded portion indicates that there is about a 32% probability of the electron being inside the classical Bohr radius  $a_0$  (the peak of the curve) and a 68% probability of its being farther from the nucleus.



(b) The  $2s$  state ( $n=2, \ell=0$ ).

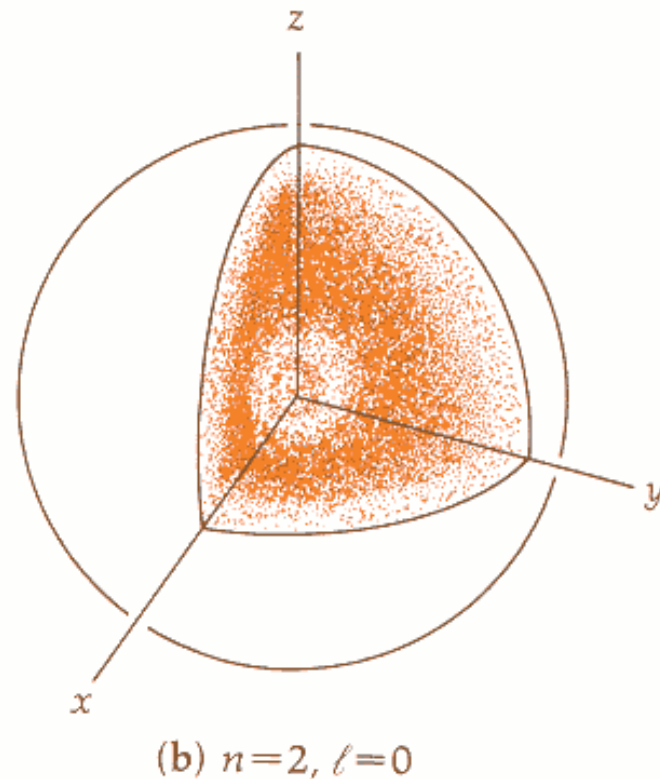
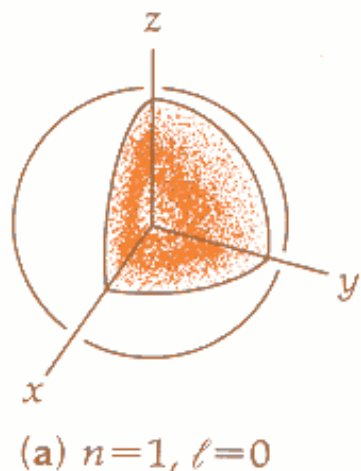


(c) The  $2p$  state ( $n=2, \ell=1$ ).

**FIGURE 44-8**

The radial probability density function  $P(r)$  for the three lowest states of hydrogen.

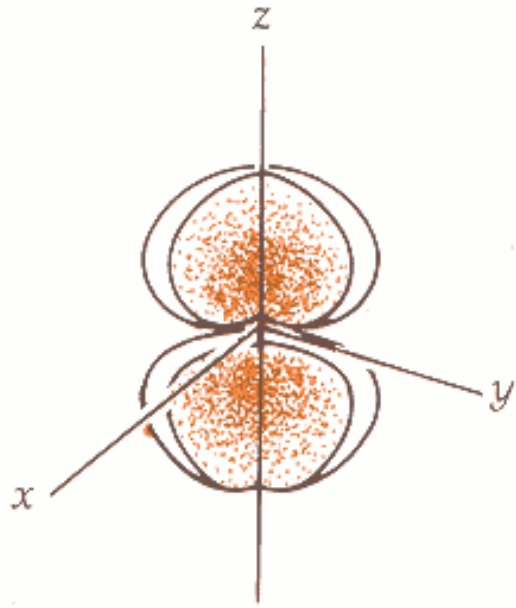
Az  $n, l=n-1$  elektronállapotban a radiális hullámfüggvénynek (és így a radiális valószínűség-sűrűségnek is) csak egy púpja van.



**FIGURE 44-9**

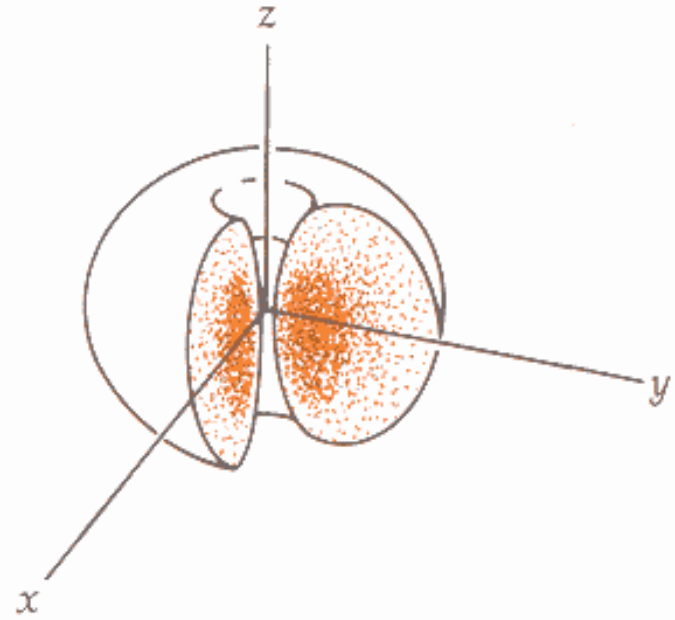
One way of representing the probability density for the  $1s$ ,  $2s$ , and  $2p$  states of the hydrogen atom. (We have drawn rather artificial boundaries to the distributions; the probability of finding an electron outside the boundary of a cloud is less than about 10%.) In each case, the nucleus is at the coordinate origin. The greater the cloud density, the greater the probability of finding the electron in that region.

A „valószínűségi felhők” keresztmetszete. Az elektronnak a felhők határán belüli tartózkodás valószínűsége 90%.



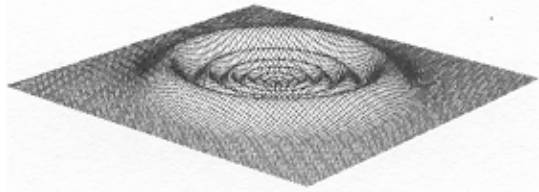
(c)  $n=2, l=1, m_l = \pm 1$

$$n = 2, l = 1, m_l = \pm 1$$



(d)  $n=2, l=1, m_l = 0$

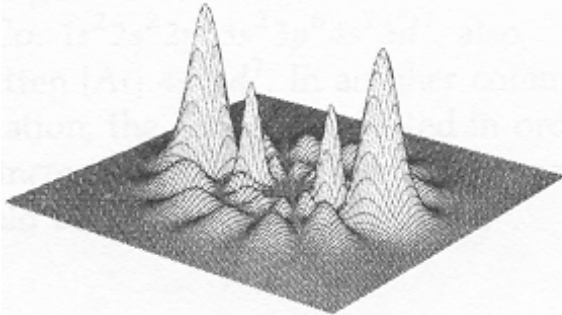




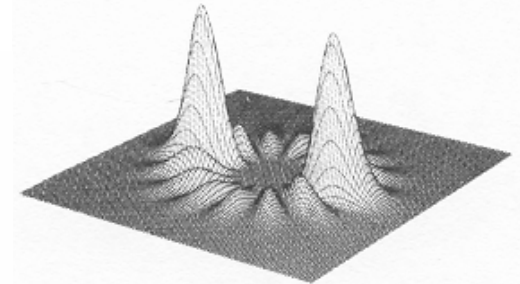
(a)



(b)



(c)



(d)

**FIGURE 44-10**

Representations of the probability-density distributions for highly excited states ( $n = 8$ ) of the hydrogen atom that have different values of angular momentum. The nodal lines are either concentric circles or straight lines passing through the nucleus. The true three-dimensional distributions may be visualized by imagining that the graph is rotated about a horizontal line passing through the nucleus, forming nodal surfaces that are spherical shells or cones. In these excited states, the hydrogen atom is much larger than it is in its lowest energy state. The distance from the nucleus to the edge of these graphs is 380 times the Bohr radius for  $n = 1$ .

# A Pauli-elv és az elemek periódusos rendszere

Mengyelejev (1870)

Sok azonos részecskéből (elektronból) álló rendszer törvényei.

Wolfgang Pauli (1925)

A PAULI-FÉLE  
KIZÁRÁSI ELV

**Egy atomban nem lehet két olyan elektron,  
melynek mind a négy kvantumszáma azonos.**

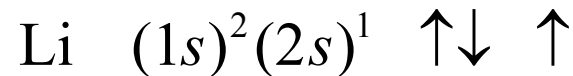
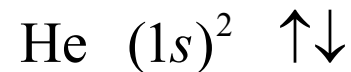
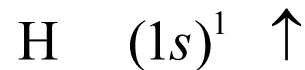
A Pauli-elv a többelektronos rendszer hullámfüggvényének szimmetriatulajdonságaiból *levezethető*. A fenti megfogalmazás az u.n. egy-részecske közelítésre érvényes, (amikor a rendszer hullámfüggvényét egy-részecske hullámfüggvények szorzatainak lineáris kombinációjával közelítjük).

Hogyan oszlanak meg az elektronok a lehetséges energiaállapotok között a többelektronos atomokban?

Építsük fel az atomokat elektronok hozzáadásával!

*Az atom alapállapotú konfigurációjában az elektronok a Pauli elv által megengedett lehetséges legalacsonyabb energiájú állapotban helyezkednek el.*

Elektronkonfiguráció



Betöltött héj:  $S=0$ ,  $L=0$ ,  $J=0$  zérus impulzusmomentum  
zérus mágneses momentum

**TABLE 44-4** Ground-State Configuration of the Elements

Element	Number of Electrons	Ground State*	$n$ Value
H	1	$1s^1$	K shell ( $n = 1$ )
He	2	$1s^2$	
Li	3	$1s^2 2s^1$	L shell ( $n = 2$ )
Be	4	$1s^2 2s^2$	
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	
N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	
Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	M shell ( $n = 3$ )
Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	
Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	
			⋮

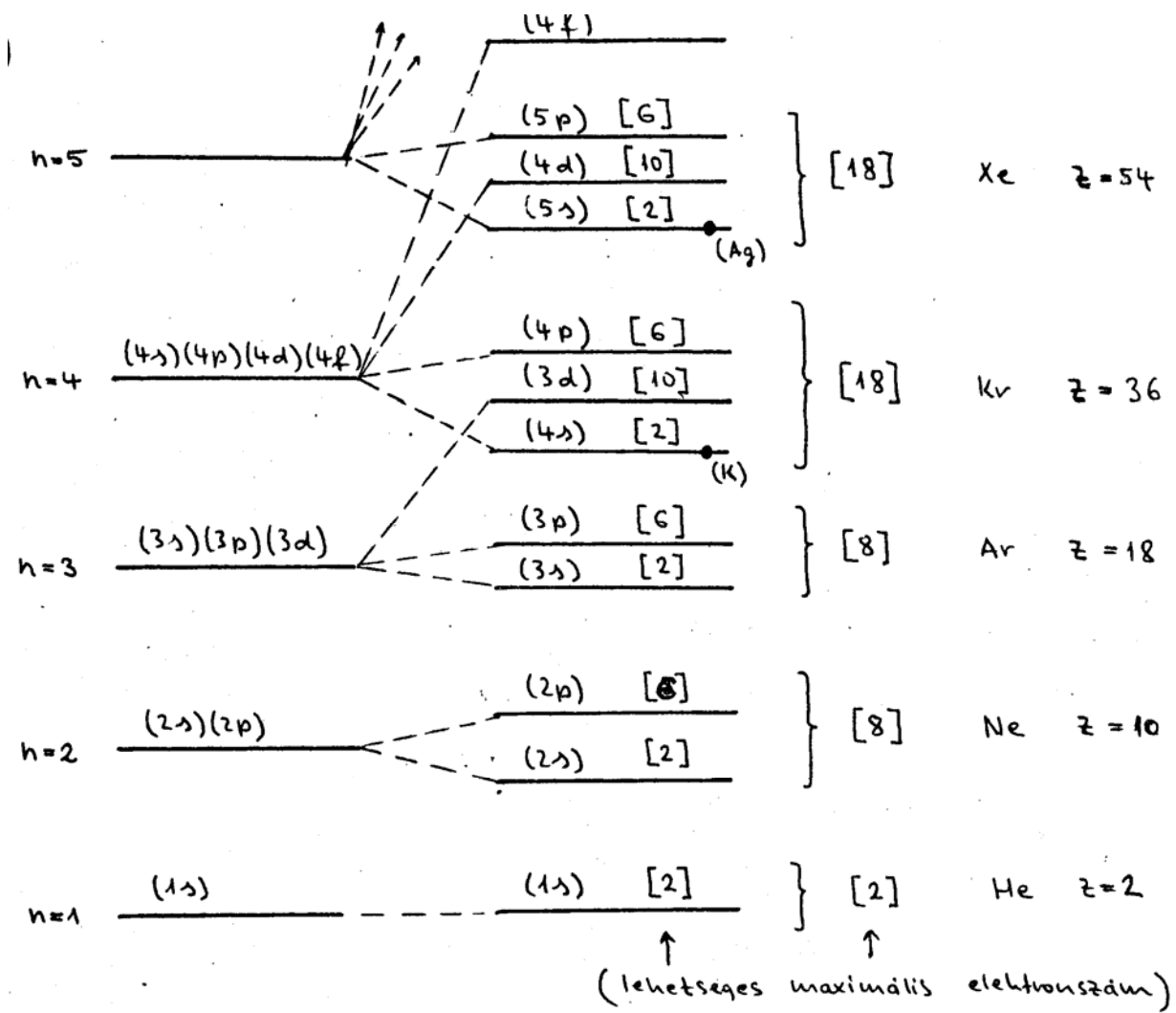
\* A shorthand notation is often used for closed inner shells. Thus, lithium may be written [He]  $2s^1$ ; aluminum, [Ne]  $3s^2 3p^1$ ; and so forth. The symbol in brackets designates the closed-shell configuration for that atom.

Atom	1s	2s	2p			Electron configuration
Li						$1s^2 2s^1$
Be						$1s^2 2s^2$
B						$1s^2 2s^2 2p^1$
C						$1s^2 2s^2 2p^2$
N						$1s^2 2s^2 2p^3$
O						$1s^2 2s^2 2p^4$
F						$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne						$1s^2 2s^2 2p^6$

Több-elektromos atomokban az elektronok közötti taszítás, és a spin-pálya kölcsönhatás miatt az energiaszintek felhasadnak, az energia  $l$ -től is függ.

A magasabb héjak bizonyos energiaszintjei kezdik átfedni a kisebb főkvantumszámhoz tartozó energiaszintek egy részét. Így megtörik az a szabály, hogy sorban töltjük be az egyes elektronállapotokat.

A Paschen háromszög segítségével meghatározható, milyen sorrendben töltődnek be az alhéjak. (Nehéz atomoknál van néhány kivétel).

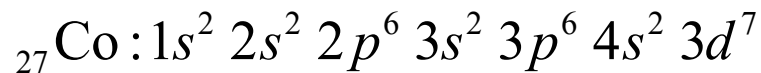


**TABLE 44-5 Shells**

X-Ray Notation	K	L	M	N	O	P
<i>n</i>	1	2	3	4	5	6
S	1s	2s	3s	4s	5s	6s
U		2p	3p	4p	5p	6p
B			3d	4d	5d	6d
S				4f	5f	6f
H					5g	6g
E						6h
L						...
L						...
S						...

**TABLE 44-5**

**Paschen's triangle**, an array that organizes shells and subshells in a convenient pattern. The arrows indicate the sequence of energy levels for adding electrons. (There are a few exceptions in heavy atoms.) The electronic configuration for cobalt is thus  ${}_{27}\text{Co}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$ , also written  $[\text{Ar}] 4s^2 3d^7$ . In another common notation, the sequence is listed in order of increasing *n*, so the last two terms could be interchanged:  $[\text{Ar}] 3d^7 4s^2$ .





Az elemek kémiai tulajdonságait elsősorban a külső elektronok határozzák meg.

Alkáli fémek:       betöltött héj + 1 elektron

Halogén elemek:   betöltött héj - 1 elektron

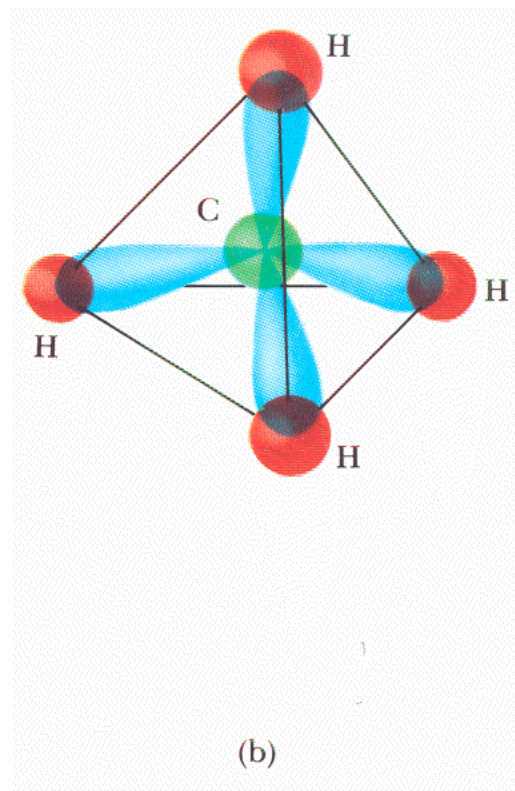
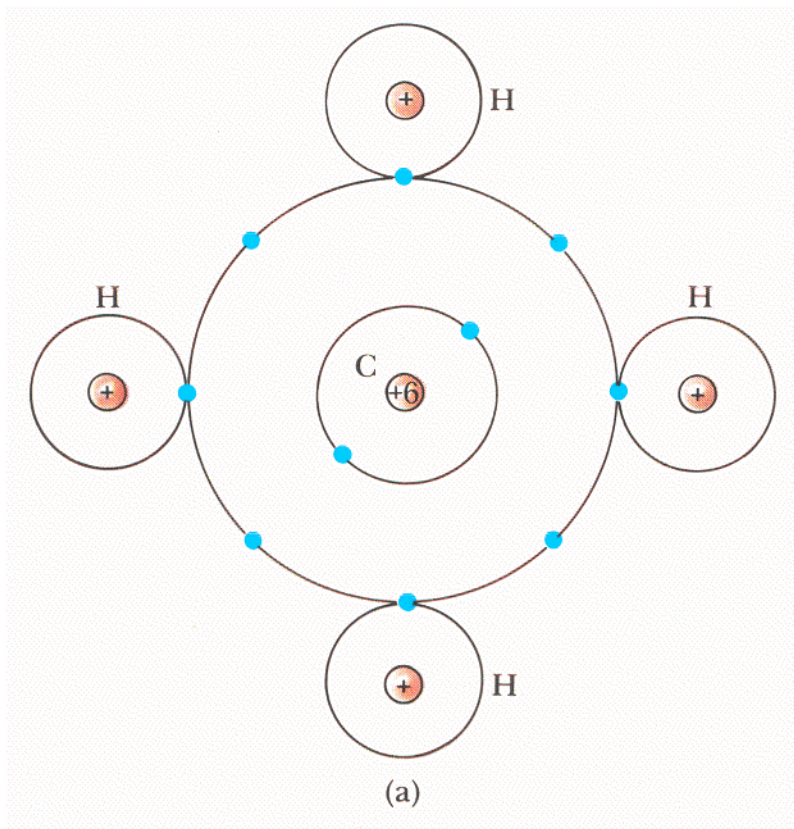
Ionos kötés                $\text{Na}^+\text{Cl}^-$

A nátrium atom elveszíti a gyengén kötött  $3s$  elektronját, a Cl atom ezzel feltölti a  $3p$  héjat. A két ion Coulomb vonzása tartja össze a molekulát.

Kovalens kötés

Az atomok megosztóznak egy vagy több elektronon. Pl.:  $\text{H}_2$

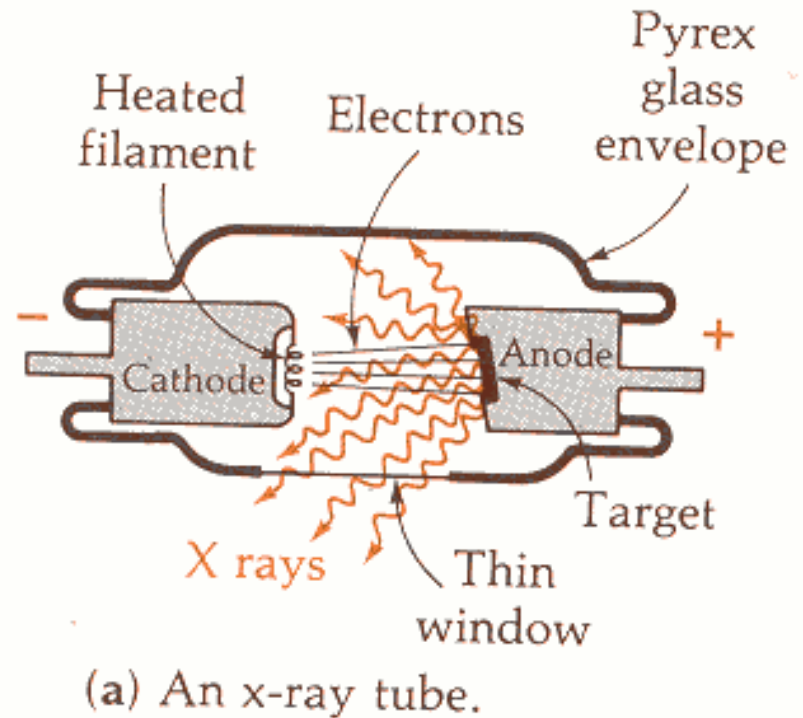




Példa a kovalens kötésre.  $\text{CH}_4$

## A röntgensugarak

$$0.001 \text{ nm} < \lambda < 10 \text{ nm}$$



Kétféle folyamat

lefékezés

fotoeffektus a belső héjakon

Amikor nagy energiájú elektronok fém céltárgyba ütköznek, lelassulnak, sugároznak, **folytonos spektrumú fékezési sugárzás** (Bremsstrahlung) keletkezik.

A fékezési sugárzásnak rövidhullámú határa van

$$[K_{\text{elektron}}] = [\text{maximális fotonenergia}]$$

$$Ve = hf_{\text{max}} = \frac{hc}{\lambda_{\text{min}}}$$

## Karakterisztikus vonalas spektrum

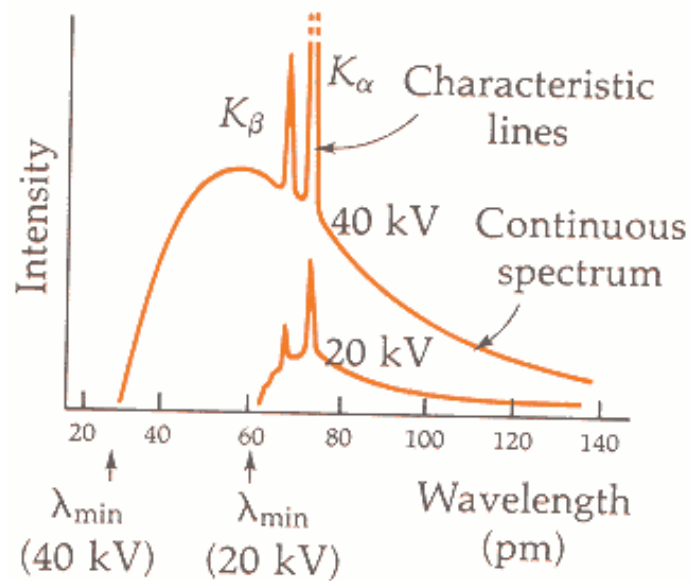
A vonalak „karakterisztikusak”, jellemzőek a céltárgyat alkotó elemre.

A legbelső, a  $K$  héjon lévő elektronok  $Ze$  magtöltést érznek

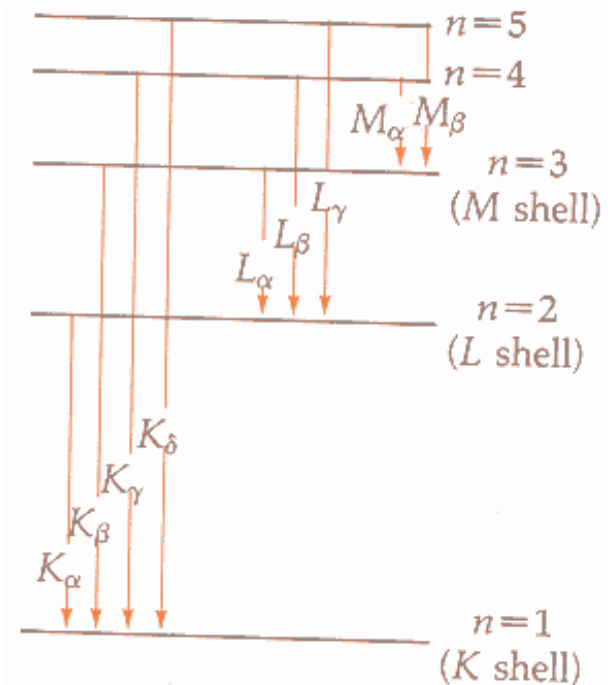
$K_{\alpha}, K_{\beta}, K_{\gamma}, K_{\delta}$  vonalakat akkor kapunk, amikor az atom gerjesztett elektronja az  $n=2, n=3, n=4, n=5$  főkvantumszámú szintekről az alapállapotba ugrik át.

Ezek a vonalak „ráülnek” a fékezési sugárzás folytonos spektrumára.

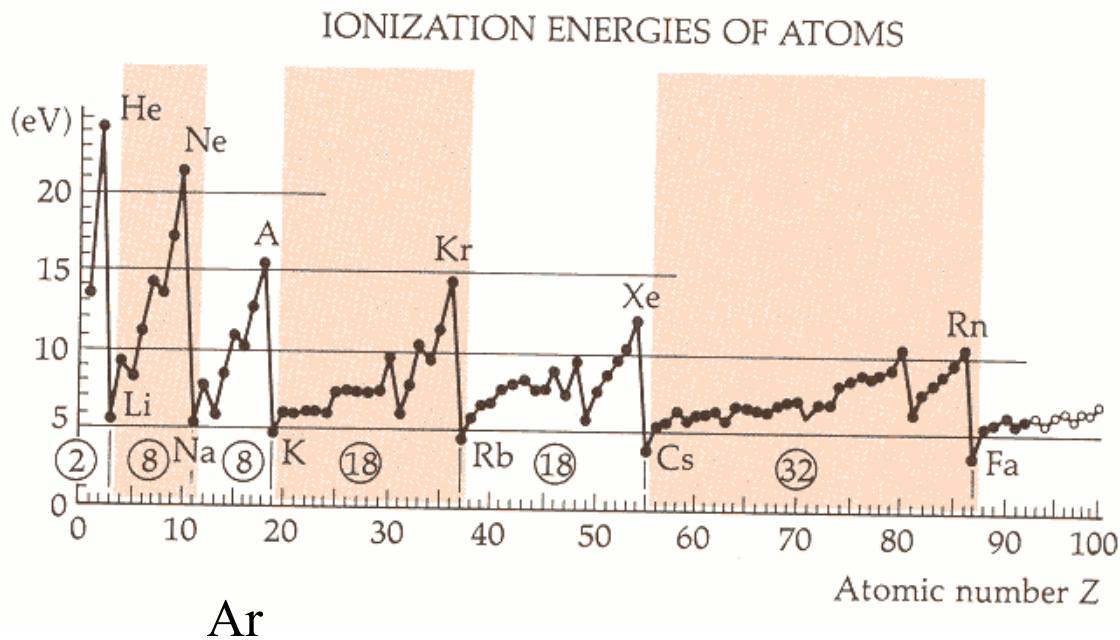
A külső héjakon lévő elektronok nem a  $Ze$  magtöltést érzik, hanem a belső héjak elektronjainak árnyékoló hatása következtében ennél kisebbet.



(b) The x-ray spectrum of a metal target obtained at two different accelerating voltages.



(c) The x-ray series are named for the shell vacancy that the electron fills.



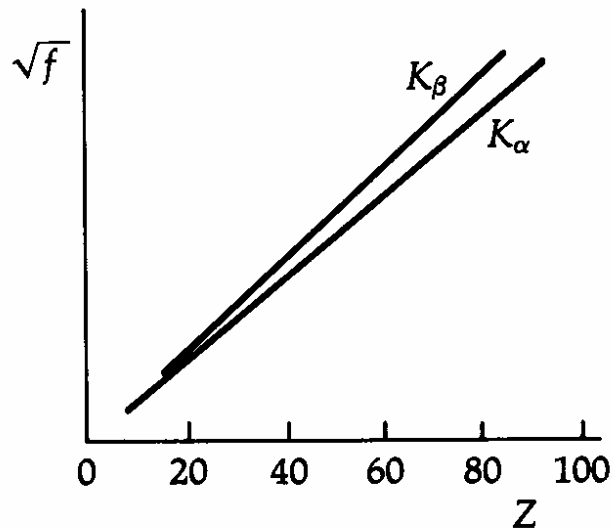
**FIGURE 44-11**

The *ionization energy* of an atom is the minimum energy (in electron volts) required to remove an electron from the atom in its ground state. The peaks at the inert gases are for atoms whose electron subshells are all complete. The next added electron must go into the next higher shell, farther from the nucleus, so notably less energy is required to remove it from the atom; these form the alkali metals. As more electrons are added (and, of course, more protons to the nucleus), the binding of the electrons becomes progressively stronger, until the next shell is complete. Thus, each period in the periodic table starts with a strongly reactive alkali metal, and ends with an inert noble gas. The numbers of elements in these periods are 2, 8, 8, 18, 18, and 32.

Az atomok ionizációs energiájának változása a  $Z$  rendszám függvényében megmutatja a periódusos rendszer periódusaiban lévő elemek számát: 2, 8, 8, 18, 18, 32.

H. G. J. Moseley (1913)

Különböző elemeket (atomokat) választott céltárgynak. Amikor egy elektron magasabb energiaszintről a legbelső (a  $K$ ) héjra ugrik, fotont sugároz ki. A foton frekvenciájának négyzetgyökét a rendszám függvényében ábrázolva egyenest kapunk.



**FIGURE 44-13**

This *Moseley diagram* plots the square root of the frequency  $\sqrt{f}$  vs. the atomic number  $Z$  of the target element for two lines of the  $K$  series. [Later plots used  $(Z - 1)$  instead of  $Z$ , still obtaining a straight line. See Problem 44C-38.]

Moseley-diagram

A belső ( $K$ ) héjon lévő elektronokat a többi elektron nem árnyékolja le, energiájukat, és az emisszió során kibocsátott fotonok frekvenciáját a hidrogénszerű ionra kapott képletből számíthatjuk

$$E_n = -\frac{13.6 \cdot Z^2 \text{ eV}}{n^2} \quad E_n - E_1 = hf \propto Z^2$$

$$\sqrt{f} \propto Z$$

A Ni és Co helyét meg kellett cserélni a *periódusos rendszerben*, mert az elemek helyét a *periódusos rendszerben* a  $Z$  *rendszerhatározza meg* és nem az  $A$  *tömegszám*, ahogy azt korábban gondolták.

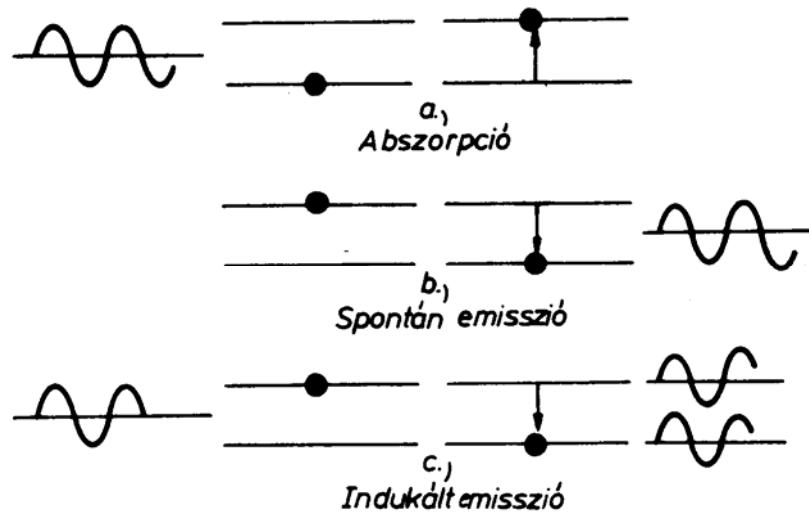
Sikerült meghatározni az 57-71 közötti rendszámú alkáli földfémek helyét és sorrendjét.



# A lézer

Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation → laser

Fénykibocsátás, fényelnyelés



A **spontán emisszió** során az atom fotont bocsát ki, az elektron alacsonyabb energiájú állapotba kerül. A foton energiája a két energiaszint különbségével egyenlő. A foton kibocsátása véletlenszerűen, a környezettől függetlenül, az atom belső törvényei szerint történik. Az atomi energiaszintek átlagos élettartama  $\tau \approx 10^{-8}$  s.

Fényforrások spontán emisszióval kisugárzott fénye elemi hullámvonulatok véletlen összessége, inkoherens hullám.

Az **indukált emisszió** (A. Einstein, 1916) sajátosságai:

- **rezonáns** jelleg: a bejövő foton energiájának meg kell egyeznie a két energiaszint különbségével
- a keletkező foton *frekvenciája, iránya, fázisa, polarizációja* megegyezik az indukáló fotonéval, a fény **koherens módon erősödik**

Az abszorpció és az indukált emisszió *egymással versengő folyamatok*.

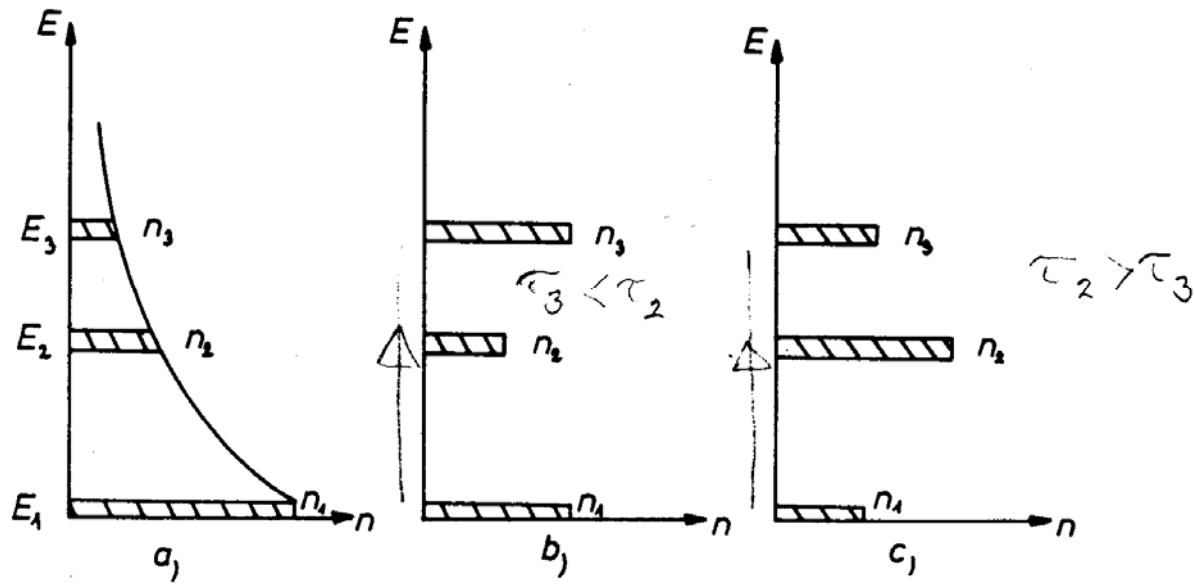
Termikus egyensúlyban lévő atomok esetén az egyes energiaállapotokban lévő atomok számát a Maxwell-Boltzmann eloszlásfüggvény határozza meg. Két állapothoz tartozó betöltési számok (populációk) aránya:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-(E_2 - E_1)/kT}$$

A *magasabb* energiaállapotok populációja *kisebb*. Ahhoz, hogy az indukált emisszióval bekövetkező foton-képződés gyakoribb legyen, mint a fotonok abszorpciója, **populációinverziót** kell létrehoznunk.

A populáció inverzió fenntartásához az atomokat folyamatosan „pumpálni” kell a gerjesztett állapotba, melynek hosszú élettartamú, un. metastabil állapotnak kell lennie. Az atomi nívók átlagos élettartama tipikusan  $\tau \approx 10^{-8}$  s, a metastabil nívóké  $\tau \approx 10^{-3}$  s

Ahhoz, hogy populációinverziót létre tudjunk hozni, a rendszernek legalább 3 energiaszinttel kell rendelkeznie. Ha a 3-as nívó átlagos élettartama nagyobb a 2-esénél az inverzió a 3-as és 2-es között jön létre. Az populációinverzió fennmaradásához a 2-es nívónak gyorsan ki kell ürülnie.



## Pumpálás

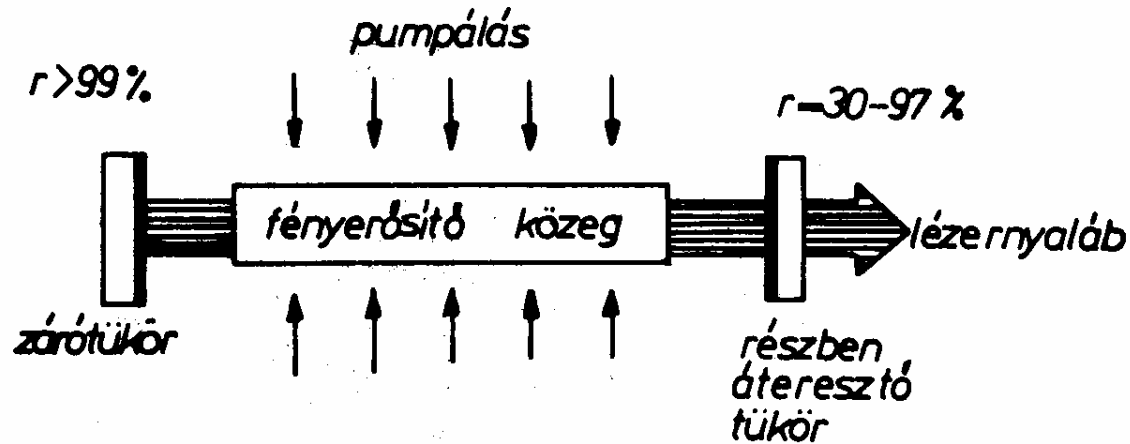
- intenzív villanófénnyel (pl. rubinlézer)
- atomi ütközésekkel (pl. He-Ne lézer)
- kémiai reakcióval (pl. CO<sub>2</sub> lézer)

A lézer fényhullám generátor, így két alapvető részből áll:

- erősítőből*
- és visszacsatoló elemből.*

*fényerősítő közeg: gáz, folyadék, szilárd test*

*pozitív visszacsatolás: tükrök a közeg két szélén → rezonátor*



Egy tipikus lézer felépítése

gerjesztett atomok  $\rightarrow$  spontán emisszió révén fotonok  $\rightarrow$  tengelyirányú fotonok száma indukált emisszió révén láncreakciószerűen növekszik  $\rightarrow$  *azonos irányú, azonos polarizációjú, koherens hullám* alakul ki

Az intenzitás növekedése csak egy bizonyos határig tart, növekedésével ugyanis csökken a gerjesztett atomok száma és így a közeg erősítése; rövidesen beáll az egyensúly.

A tükrökön történő visszaverődések nagymértékű **iránykoncentrációt** hoznak létre. Az eltérést a síkhullámtól a kilépő apertúrán fellépő diffrakció okozza, kis divergenciájú a nyaláb. (A Holdon elhelyezett tükörről visszavert lézernyaláb detektálható!)

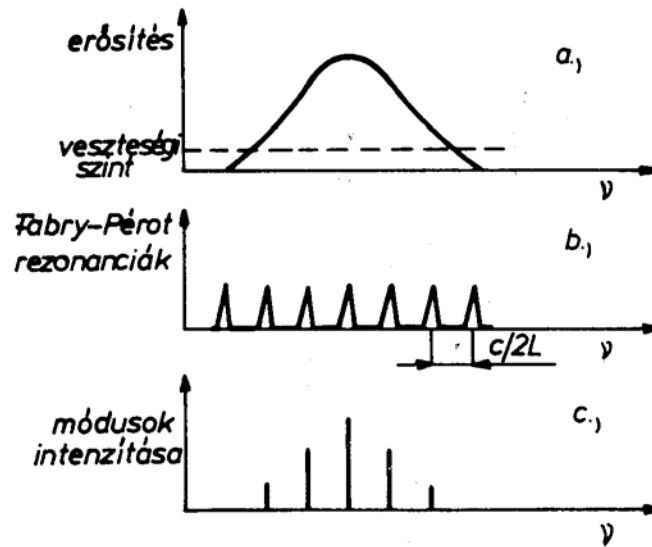
### **Longitudinális módusok.**

Ha  $L$  a tükrök távolsága (a rezonátor hossza) az állóhullámok kialakulásának a feltétele

$$L = m \frac{\lambda_m}{2} \quad m = 1, 2, \dots \quad f_m = \frac{c}{\lambda_m} = \frac{c}{2L} m$$

A szomszédos longitudinális módusok „távolsága”

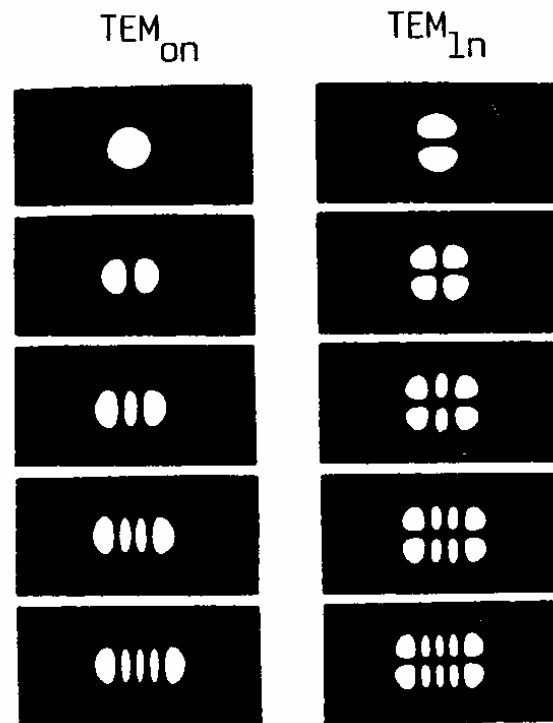
$$\Delta f = f_{m+1} - f_m = \frac{c}{2L}$$



A közeg erősítésének és a longitudinális módusoknak szerepe a lézer frekvenciájának (frekvenciáinak) kiválasztásában. Az erősítés-frekvencia függvény maximuma közelében lévő módus a többi rovására növekszik.

Több módus léte rontja a koherenciát (az időbeli koherenciát).



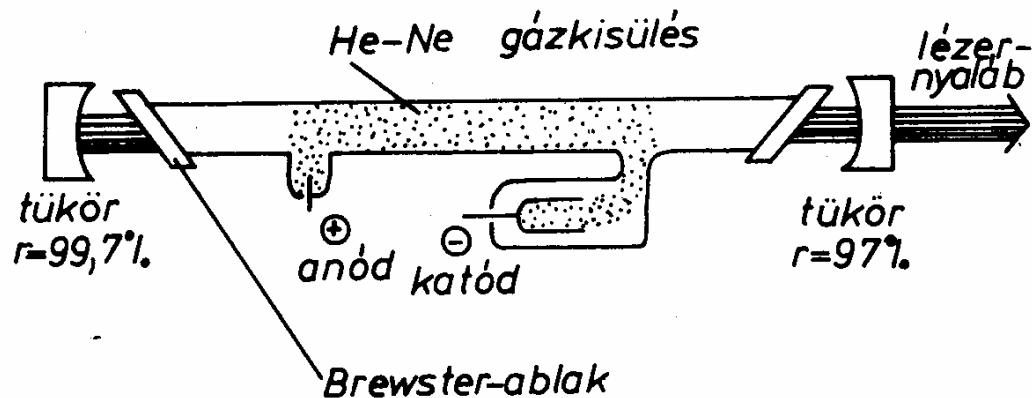


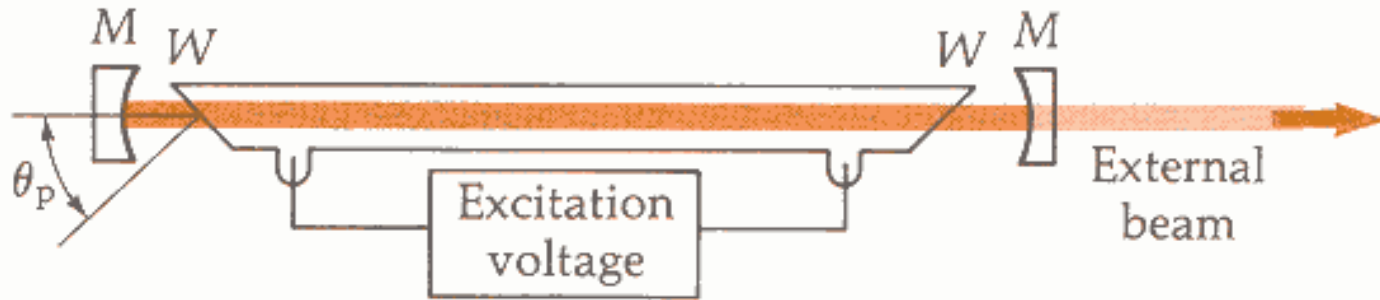
### Tranzverzális (keresztirányú) módusok

Homorú tükrök → a tükörrezonátorban többfajta stabil keresztirányú intenzitás-eloszlás alakulhat ki. A több módus rontja a térbeli koherenciát. Legkedvezőbb a tranzverzális alaplómódus: a  $TEM_{00}$  módus, kötött a fázis.

# He-Ne lézer

- He és Ne atomok 7:1 arányban, nyomás 1-3 torr, egyenáramú gázkisülés
- **négynívós** lézer
- lézerátmenet: a Ne energiaszintjei között,
- pumpálás: gerjesztett He atomok Ne atomokkal történő rugalmatlan ütközése révén



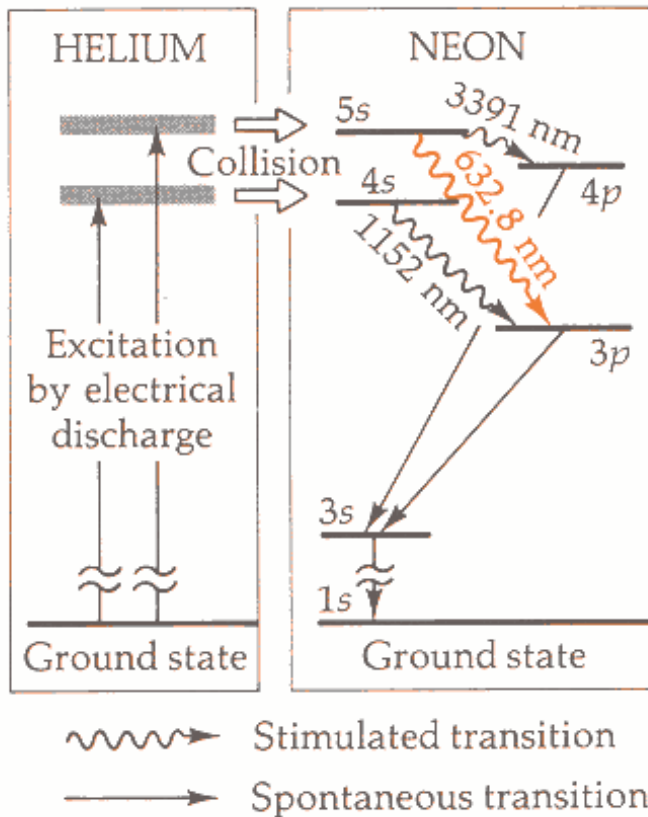


**FIGURE 44-15**

The He–Ne gas laser. The windows  $W$  at each end are tilted at the Brewster angle to reflect light of the unwanted polarization out of the laser.\* The other polarization component transmits essentially 100% through the windows. (With windows perpendicular to the beam, each reflection would have  $\sim 4\%$  loss—an intolerable situation.)

Focussing mirrors  $M$  reflect light back and forth about 100 times, while the right-hand mirror permits a tiny fraction ( $\sim 1\%$ ) to pass through, forming the external beam.

\* This does *not* mean that the laser loses half its power. After only *one pass* through the tube, the Brewster reflection removes that component, so it doesn't build up much energy in the tube in the first place.



A neon atom az  $5s$  és  $4s$  energiaszintje metastabil, az  $5s \rightarrow 4s$  átmenet tiltott.

Populációinverzió az  $5s$  és  $4p$  valamint a  $4s$  és  $3p$  állapotok között jön létre.

A gerjesztett elektron a  $4p$  és  $3p$  állapotból azonnal átmegy a  $3s$  állapotba, így a populációinverzió megmarad.

A  $3s$  nívó a fallal történő ütközés során (sugárzásmentesen) ürül ki.

**FIGURE 44-16**

Significant energy levels in the He-Ne gas laser.

## Lézerek néhány alkalmazása

Információtechnológia: száloptikákban, CD, DVD írás és olvasás, optikai egér, stb. (félvezető lézer)

integrált áramköröki maszkok készítése, IC gyártás

Technológia: elektronikus alkatrészek trimmelése, vágás, hegesztés (széndioxid lézer)

Orvosi alkalmazások: szemműtétek, operációk (szilárdtest lézerek), véráramlás mérése, stb.

Méréstechnika: távolság, elmozdulás, sebesség mérése (félvezető és gáz lézerek),  
vonalkód leolvasás

Holográfia (gáz lézerek)

Fizikai és energetikai kutatások pl. fúziós reaktorban a D-T gömb felrobbantása

Haditechnika: intelligens bombák irányítása, műholdak megsemmisítése, stb.