

ATOMFIZIKA

„Ha ezek az átkozott kvantumugrások valóban igazak, akkor nagyon sajnálom, hogy valaha is kvantumelmélettel foglalkoztam.”

ERWIN SCHRÖDINGER (részlet egy, a Bohr-posztulátumokról Bohrral folytatott heves vitából)

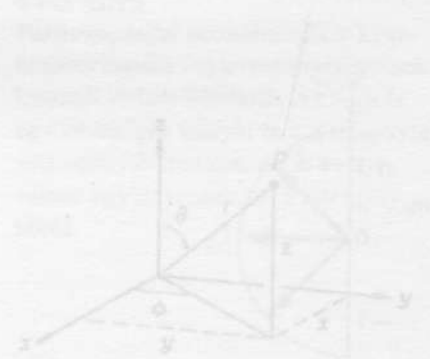
„A kvantumelmélet hatalmas kezdeti sikerei sem indítanak engem arra, hogy elhiggyem, hogy itt lényegében kockajáték folyik.”

ALBERT EINSTEIN (Max Bornhoz, 1944. november 7-én írt levelében)

44.1 Bevezetés

Az előző fejezetben már láttuk, hogy lényeges különbség van a klasszikus és a kvantummechanika között. A newtoni klasszikus mechanika olyan mérhető paraméterekkel írja le a tárgyak erőhatás következtében végbemenő mozgását – mint a tömeg, sebesség, helykoordináták, gyorsulás – melyek értéke bármely időpontra előre kiszámítható. Ez a felfogás megfelel mindennapi tapasztalatainknak. A kvantummechanika is mérhető paraméterek közötti összefüggéseket ad meg, de úgy, hogy közben elvi korlátokat állít fel. A *határozatlansági elv* (amely az anyag és sugárzás alapvetően kettős; hullám-részecske természetéből ered) szerint bizonyos paraméterpárok nem mérhetőek egyidejűleg tetszés szerinti pontossággal. Ennek következményeként a kvantummechanika csak annak a *valószínűségét* állapítja meg, hogy egy adott paraméter milyen meghatározott tartományba esik valamilyen átlag körül. Nem ad tehát pontos eredményt, mint a klasszikus mechanika.

Ha valaki azt gondolja, hogy a kvantummechanika nem nagyon jól helyettesíti az egészen precíz klasszikus mechanikát, akkor téved; a klasszikus mechanika csupán közelítése a sokkal finomabb és gazdagabb kvantummechanikai elméletnek. A klasszikus mechanika korlátlan pontossága csak illúzió. Jó közelítés makroszkópikus környezetben, ahol nagyszámú atom vesz részt a folyamatokban, és az átlag bizonytalansága elhanyagolható, de kisléptékű rendszerekre csak a kvantummechanika alkalmazható. Különösen szép a kvantumelméletben, hogy magába foglalja a teljes newtoni elméletet, és átmege bele, ha közeledünk a makroszkópikus méretek felé. Ma ez az



44-1 ábra
A *P* pont helyzetét az (x, y, z) derékszögű koordinátákkal vagy az (r, θ, ψ) gömbi koordinátákkal adhatjuk meg.

$$\frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right] + U(r)\psi = E\psi \quad (44-4)$$

Mitani még elő megfogalmazás magánról és elvén részéről közöltem, amely a kvantummechanika alapjait tartalmazza. *Physics Today*, Oct. 1988.

egyetlen igazán jó elmélet, amely a világegyetem legtöbb csodáját helyesen írja le.¹ Idézzük Herman Feshbach és Victor F. Weisskopf szavait²:

„A kvantumfizika olyan építmény, amely az emberi gondolkodás történetében egyedülálló helyet tölt be, mint a természeti jelenségeknek eddig legtökéletesebben megfogalmazott elmélete.”

Ebben a fejezetben a kvantummechanikát a hidrogénatomra alkalmazzuk, és értelmezzük a kapott eredményeket. A legegyszerűbb kéttest-rendszer példáján látványosan lehet szemléltetni a kvantummechanika egyedülálló tulajdonságait.

A hidrogénatom Bohr-modellje csodálatos alkotás; eredményei jól egyeznek a kísérleti adatokkal. Niels Bohr felfedezésének talán a legnagyobb vívmánya, hogy a modell több problémát vetett fel, mint amennyit megoldott, s ezzel elősegítette, hogy az atom szerkezetébe mélyebben betekinthessünk. A megoldatlan problémák közé soroljuk a következőket:

- (1) Az elektromágnesség szigorú törvényeivel ellentétben, hogyan keringhet az elektron a proton körül anélkül, hogy energiát veszítene?
- (2) Mi az oka annak, hogy ha a hidrogén-spektrumot nagyobb felbontással vizsgáljuk, akkor sok vonal két vagy három vonalra bomlik (*finomszerkezet*)?
- (3) Hogyan magyarázható a Bohr-moddellel az a tény, hogy a spektrumvonalak különböző intenzitásúak?
- (4) Mivel magyarázza a Bohr-modell a pályák kvantáltságát?

Az előző fejezetben már szó volt róla, hogy Louis de Broglie 1924-ben értelmezni tudta a kvantumosságot az anyaghullámokkal. C. J. Davisson és L. H. Germer 1925-ben kísérletileg is kimutatta az anyaghullámok létezését. Mindezzel új atomszerkezet elmélet alapjait megvetették. Az új elméleti legfőbb „építész” Erwin Schrödinger, a hullámmechanikai modell alkotója meg, Werner Heisenberg volt, pedig az atom kezdő és végállapota közötti átmenetet értelmezte mátrixok segítségével. Később kiderült, hogy a két elmélet teljesen egyenértékű, ezért mi csak az egyszerűbb hullámmechanikai modellt ismertetjük.

A hullámmechanika következtetései jól egyeznek a kísérleti adatokkal, azonban amikor elfogadjuk ezt a tisztán matematikai modellt, le kell mondanunk arról a szemléletes képről, hogy az elektronok a mag körül szigorúan megszabott pályákon mozognak. Azt tudjuk csak megállapítani, hogy az elektron mekkora valószínűséggel található a térnek *ebben* vagy *abban* a tartományában; örvendetes azonban, hogy a legnagyobb valószínűségek éppen a Bohr-modell diszkrét pályáinak felelnek meg.

A kvantummechanika másik sikere, hogy a kvantáltság magából a hullámegyenletről adódik, ha csak *állóhullámmegoldásokat* „engedünk meg”. **Megengedettek azok a megoldások**, amelyek eleget tesznek *bizonyos határfeltételeknek*. Ez már előfordult az előző fejezetben is, amikor a szilárd falak között mozgó elektron egydimenziós mozgását vizsgáltuk. Ott kikötöttük, hogy a falaknál $\psi = 0$ legyen, ezzel a megoldásokban automatikusan csak a falak közötti állóhullámokra szorítkoztunk. Az atomi elektron háromdimenziós esetében azt kell kikötnünk, hogy ψ ugyanakkora legyen $\phi = 0^\circ$ -nál, mint $\phi = 360^\circ$ -nál. A következő pontban megmutatjuk, hogy ezek a korlátozások hogyan adják ki a kvantumszámokat is tartalmazó megengedett megoldásokat.

¹ Marad még elég megoldatlan magfizikai és elemi részekkel kapcsolatos rejtély, amely a fizikusokat a további kutatásra ösztönzi.

² Physics Today, Oct. 1988.

44.2 A Schrödinger-féle hullámegyenlet

A hidrogén-atomra a megoldás hullámmechanikai közelítését akkor kaphatjuk meg, ha az elektront olyan de Broglie-féle „anyag”-hullámnak tekintjük, amely a mag (a proton) U Coulomb-potenciálterében mozog. Az elektron mint hullám, ki kell hogy elégítse a hullámegyenletet. Egydimenziós esetben a (43-27) időtől független Schrödinger-egyenlet:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \right) \psi = 0$$

Ennek gyakrabban használt alakja:

$$\text{SCHRÖDINGER HULLÁMEGYENLETE (egydimenziós)} \quad \left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi = E\psi \quad (44-1)$$

Mivel az elektronhullám háromdimenziós (egy pulzáló zselatingömbhöz hasonlítható), ezért a hullámegyenletet is háromdimenziós alakban kell felírni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z)\psi = E\psi \quad (44-2)$$

ahol az $U(x, y, z)$ potenciális energia a Coulomb-potenciál, Descartes-koordinátákkal:

$$U(x, y, z) = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \quad (44-3)$$

A gömbszimmetria miatt $U = -ke^2/r$, ezért kényelmesebb a Schrödinger-egyenletet az r , θ és ϕ gömbi polárkoordinátákkal felírni (44-1 ábra). Helyettesítés után a hullámegyenlet:

$$\text{A SCHRÖDINGER-HULLÁMEGYENLET (gömbi polárkoordinátákban)} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + U(r)\psi = E\psi \quad (44-4)$$

(gömbi polárkoordinátákban)

ahol a helyzeti energia egyszerűen

$$U(r) = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{r} \quad (44-5)$$

Nem szabad megijedni ettől a bonyolult egyenlettől, mert ebben az alakjában nem fogjuk alkalmazni. A (44-4) egyenlet teljes megoldása nagyon bonyolult, ezért a megoldásnak csak azokat a lényeges vonásait mutatjuk meg, amelyekből a kvantummechanika fizikai tartalmára tudunk következtetni. Ezek a következők:

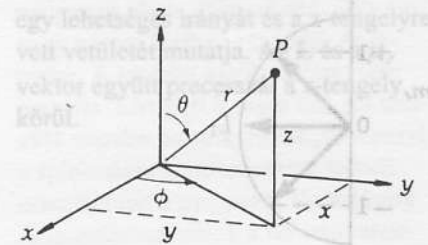
- (1) A hullámegyenlet $\psi(r, \theta, \phi)$ megoldását három függvény szorzata adja; ezek közül az $R(r)$ radiális tényező csak r , a $\Theta(\theta)$ poláris tényező csak θ és a $\Phi(\phi)$ azimutális tényező csak ϕ függvénye³, azaz

³ Az azimut szó csillagászati eredetű, ott a horizont felett, az északi iránytól kelet felé mért szögtávolságot jelenti.



44-3 ábra

Faktormodellel szétbontjuk a kvantummechanika valószínűségi sűrűségét kvantált irányú behatások. Az L_z egy lehetséges irányú behatás az L vektor egy lehetséges irányú behatása. A vektor egy lehetséges irányú behatása a kör.



44-1 ábra

A P pont helyzetét az (x, y, z) derékszögű koordinátákkal vagy az (r, θ, ϕ) gömbi koordinátákkal adhatjuk meg.



44-2 ábra

$L_z = m_l \hbar$ megengedett értékei l körüli különböző értékekre (nem azonos lépésközben). Az m_l egészszámok értékeit l irányonként figyelembe vesszük, így l nagysága $l = \sqrt{l(l+1)} \hbar$.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (44-6)$$

Az egésznek a lényege az, hogy ha olyan egyértékű megoldásokra szorítkozunk, ahol a függvény értéke zérushoz tart, ha $r \rightarrow \infty$, akkor a térbeli polárkoordináták mindegyikéhez önmagától adódik egy kvantumszám (ami a megengedett megoldásokat kijelöli). Ezen állóhullám megoldások mindegyike az atom egy kvantumállapotát képviseli.

- (2) A $[\psi \rightarrow 0, \text{ ha } r \rightarrow \infty]$ határfeltételt kielégítő $R(r)$ radiális függvény csak az n kvantumszám egész: 1, 2, 3 ... értékeinél létezik. Az n szám a főkvantumszám, mivel az elektron energiája csak ettől függ, a következő módon:

$$E_n = -\left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}\right) \frac{1}{n^2} \quad (44-7)$$

Ez azonos a Bohr-modellből kapott energiafüggvénnyel – amint ez várható is volt. Megállapíthatjuk, hogy az energiaszintek tekintetében a Bohr-modell sikeres volt.

- (3) A határfeltételeket kielégítő $\Theta(\theta)$ poláris függvény eredményezi az ℓ orbitális, vagy mellékkvantumszámot, amely az

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

értékeket veheti fel adott n esetén. Az $n = 1$ esetén tehát ℓ csak a 0, $n = 3$ esetén pedig a 0, 1, 2 értéket veheti fel. Orbitális kvantumszámnak azért nevezik, mivel ettől függ az elektronnak a proton körüli pályájához tartozó L pályaimpulzusmomentuma. Az ℓ diszkrét értékei miatt a pályaimpulzusmomentum kvantálva van, a következő szabály szerint:

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \quad (44-8)$$

(Vegyük észre, hogy ez már nem azonos a Bohr-elméletből származó (hibás) $L = n\hbar$ értékkel!)

- (4) A harmadik m_ℓ kvantumszám a $\Phi(\phi)$ azimutális függvényből származik. Ez az ún. mágneses kvantumszám adott ℓ esetén az

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$$

értékeket veheti fel. Az m_ℓ határozza meg az L impulzusmomentum z -irányú komponensét (44-2 ábra) a következő összefüggés szerint:

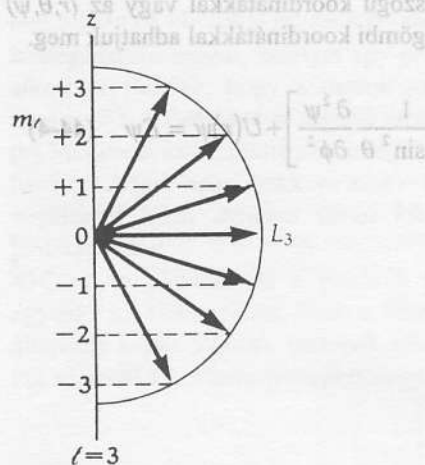
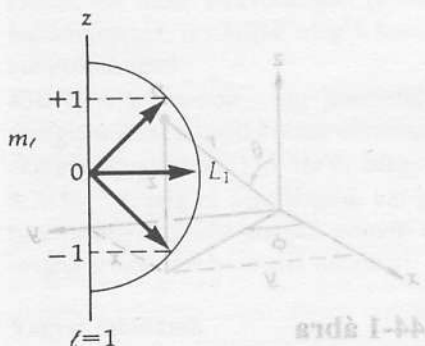
$$L_z = m_\ell \hbar \quad (m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell) \quad (44-9)$$

Az L pályaimpulzusmomentumhoz μ_ℓ mágneses dipólusmomentum tartozik (lásd a 30C-41 feladatot):

$$\mu_\ell = -\left(\frac{e}{2m}\right)L \quad (44-10)$$

Ezért a mágneses dipólusmomentum z -komponense, $(\mu_\ell)_z$ szintén kvantált:

$$(\mu_\ell)_z = -m_\ell \left(\frac{e\hbar}{2m}\right) \quad (44-11)$$



44-2 ábra

$L_z = m_\ell \hbar$ megengedett értékei ℓ két különböző értékére (nem azonos lépésekben). Az m_ℓ egészsámok értékét a z tengelyen tüntettük fel $+\ell$ -től $-\ell$ -ig. L nagysága $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$

Az $e\hbar/2m$ tényező az ún. **Bohr-magneton**.

A BOHR-MAGNETON:
$$\left(\frac{e\hbar}{2m}\right) = 9,27 \times 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2 \quad (44-12)$$

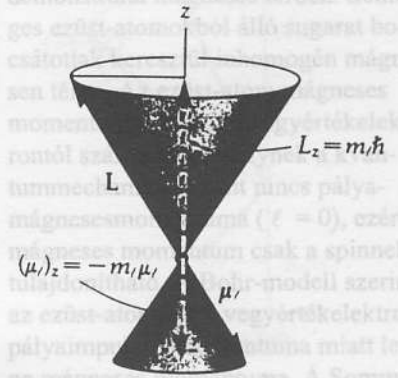
A (μ_z) komponense közvetlenül mérhető mennyiség, ezért fizikai szempontból nagyobb a jelentősége, mint μ_r -nek vagy L -nek.⁴

Azokban az atomi állapotokban, melyekre n és ℓ értéke azonos, de a hullámfüggvényük különböző, L iránya is különböző. Ennek kísérleti bizonyításához helyezük az atomot a $+z$ -tengellyel párhuzamos gyenge mágneses térbe (ezzel kitüntetett irányt adtunk meg a térben) A μ_z z-komponensének mérésével észlelhetjük L diszkrét irányait (44-2 ábra).

A szemléletességet a legjobban a **vektormodell** segíti. Az L impulzusmomentum és a μ_z mágneses momentum szigorúan kapcsolódnak egymáshoz – a mágneses tér viszont forgatónyomatékokat fejt ki μ_r -re. Az eredmény: pörgettyű alakul ki, L és μ_z együtt végez precessziós mozgást a z -tengely körül. A Heisenberg-féle határozatlansági elvből következő $(\Delta L_z)(\Delta \phi) \approx \hbar$ összefüggés miatt azonban lehetetlen megállapítani, hogy adott pillanatban melyik vektor hol található. A vektormoddellel ezt a precessziós mozgást csak mint átlagos, elkent kúpfelületet tudjuk szemléltetni. (44-3 ábra) Más kísérleti adatunk nem lehet, mint a vektorok abszolút értéke és vetületük a z -tengelyre.

44-4 ábra

A Stern-Gerlach kísérlet (1922) a spin-mágneses momentum beállítását demonstrálta mágneses térben. Semleges ezüst-atomokból álló sugárát bo-csátó mágneses térben a mágneses



44-3 ábra

Vektormoddellel szemléltetjük a kvantummechanika vektormennyiségeinek kvantált térbeli beállítását. Az ábra L egy lehetséges irányát és a z -tengelyre vett vetületét mutatja. Az L és a μ_z vektor együtt precesszál a z -tengely körül.

való vonalra bomlik, bizonyítva ezzel a spin-mágneses momentum térbeli orientációját a mágneses tér hatására. A spinmomentumok a tér irányához képest párhuzam vagy antipárhuzam módon állnak be; az inhomogén tér felelő vagy lefelé járítja el – így áll elő a két-vonalas minta.

44-1 PÉLDA

Mekkora az L és a z tengely által bezárt minimális θ szög az $\ell = 3$ esetben?

MEGOLDÁS

A 44-3 ábra alapján,

$$\cos \theta = (L_z)_{\max} / L = \ell \hbar / \sqrt{\ell(\ell+1)} \hbar = 3 / \sqrt{12} .$$

tehát $\theta = 30^\circ$

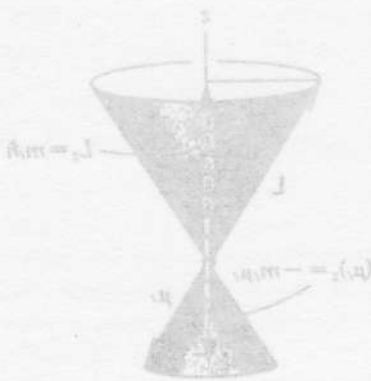
A hullámegyenlet imént ismertett megoldása semmit nem árul el a spektrumvonalak ún. *finomszerkezetéről*. Nagyfelbontású spektrométerben egyes vonalak egymáshoz nagyon közeli két vagy három vonalra bomlanak fel. A következő fejezetben ismertetjük a finomszerkezet magyarázatát, amit S. A. Goudsmit és G. E. Uhlenbeck – a leydeni egyetem két fizikus doktorandusza – 1925-ben adott meg. Ők arra a következtetésre jutottak, hogy az elektronnak saját impulzusmomentuma, „spinje” van, amelyhez mágneses momentum is tartozik. Ez a két mennyiség – éppenúgy, mint az

⁴ Ez a kvantummechanikai bevezetés zavarosnak tűnhet, ha nem tisztázunk előbb bizonyos fogalmakat. Klasszikusan úgy képzeljük, hogy a részecskék valamilyen pályán mozognak, s ehhez, a klasszikus fogalmi rendszer szerint, az L mechanikai impulzusmomentum tartozik. A részecskék töltéssel is rendelkeznek, ezért mozgásukhoz az elektromágnesség elmélete szerint μ mágneses momentum tartozik. A két fogalom nyilvánvalóan szorosan kapcsolódik egymáshoz, és mindkettő kvantált. Ha vigyázunk, hogy a két fogalmat ne keverjük, akkor közelebb jutottunk a kvantummechanika világképének megértéséhez.



44-5 ábra

Az elektron koordinátarendszerében a proton kering az elektron körül. Ez a mozgás olyan körárammal egyenértékű, amely az elektron tartózkodási helyén B mágneses térerősséget hoz létre.



elektromos töltés és a tömeg – az elektron saját, belső tulajdonságai. Szemléletesen ezt úgy lehet elképzelni, hogy az elektron töltéssel bíró gömb, amely saját tengelye körül forog.⁵ Az elektron teljes impulzusmomentuma a hidrogénatomban két részből tevődik össze: az **L** pályamomentumból és az **S** spinmomentumból. Annak a megfigyelésnek az alapján, hogy a finomszerkezetben a vonalak legtöbbször párosával fordulnak elő, Goudsmit és Uhlenbeck arra következtetett, hogy az elektronspinnek a külső mágneses tér irányához képest csak kétféle beállása lehetséges: *paralel* vagy *antiparalel*. Ezzel egy negyedik kvantumszám is megjelenik!

(5) Az elektronspinhez az m_s spin-kvantumszám tartozik, ami megadja a spin-impulzusmomentum z-irányú S_z komponensét.

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \quad (\text{ahol } s = \frac{1}{2}) \quad (44-13)$$

$$S_z = m_s \hbar \quad (\text{ahol } m_s = \pm \frac{1}{2}) \quad (44-14)$$

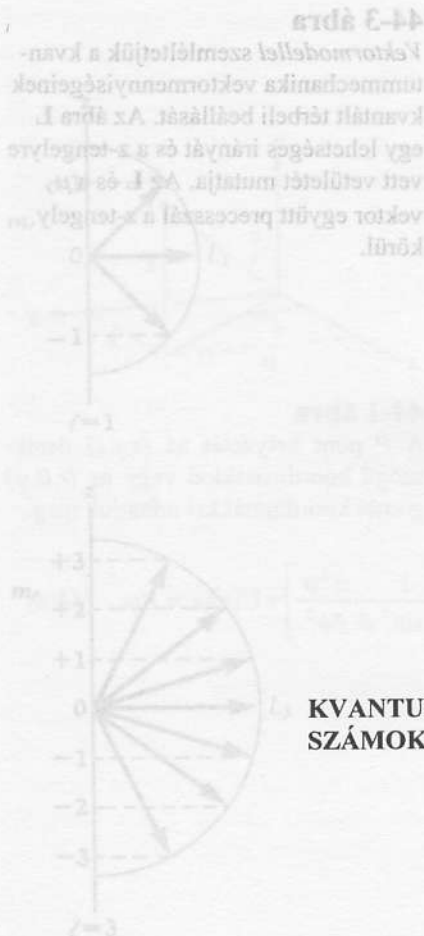
Amikor $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$, akkor azt mondjuk, hogy a spin „felfelé” irányul, amikor pedig $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$, akkor azt, hogy „lefelé”. Éppenúgy, mint a pályamozgás esetében a *spin-mágnesesmomentum* z-komponense kapcsolódik S_z -hez:

$$(\mu_s)_z = -m_s \left(\frac{e\hbar}{m} \right) \quad (\text{ahol } m_s = \pm \frac{1}{2}) \quad (44-15)$$

Ezt a (44-11) képlettel összevetve azt találjuk, hogy az elektronspinhez tartozó mágneses momentum kétszer akkora, mint a pályamomentumhoz tartozó.

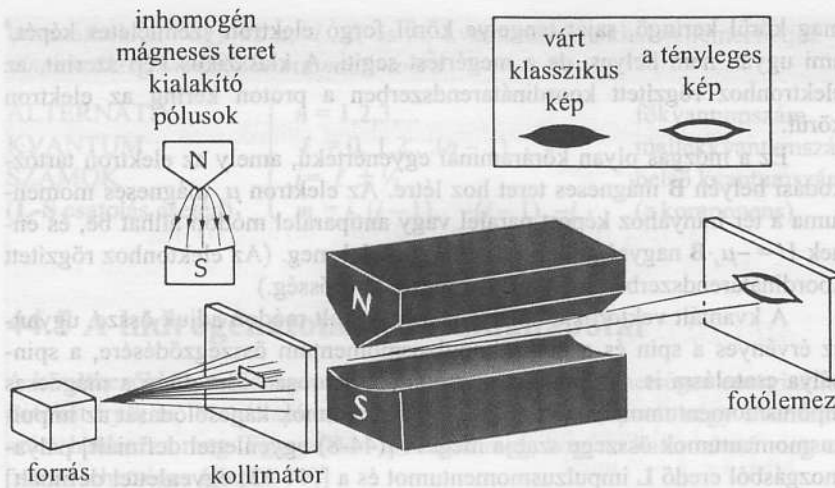
Foglaljuk össze a hidrogénatom megengedett állapotait jellemző négy kvantumszámot. Az első három természetesen módon adódik a proton Coulomb-terében mozgó elektron kvantummechanikai leírásához, míg a negyedik az elektron belső tulajdonságából, a spinből származik.

KVANTUM SZÁMOK	}	$n = 1, 2, 3, \dots$	főkvantumszám	(44-16)
		$\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$	mellék- vagy orbitális kvantumszám	
		$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$	mágneses kvantumszám	
		$m_s = \pm \frac{1}{2}$	spinkvantumszám	



44-2 ábra $L_z = m_\ell \hbar$ megengedett értékei ℓ két különböző értékére (nem azonos lépésekben). Az m_ℓ egészsámok értékét a z tengelyen tüntettük fel $+\ell, \dots, 0, \dots, -\ell$ -ig. L nagysága $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$

⁵ Ezt a forgógömb-modellt – bármennyire is segíti képzeletünket – nem szabad szó szerint venni. Még ha valamilyen módon sikerülne is megjelölni az elektron egy pontját azért, hogy a mozgását követni tudjuk, a határozatlansági elv miatt ez lehetetlen volna. A kvantummechanika szerint az elektron nem forgó gömb!



44.3 Az elektronspin és a finomszerkezet

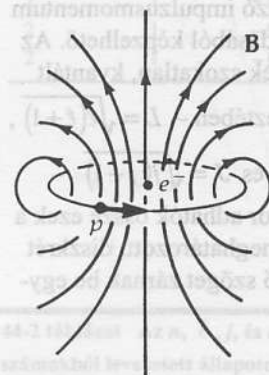
Az atomelmélet fejlődése az 1920-as években felér egy kalandregénnyel. Az évtized első felében csak növekedett a szakadék az elmélet és a kísérleti adatok között. Az egyik alapvető gond a spektrumvonalak *finomszerkezete* volt, a másik pedig az a tény, hogy amikor semleges atomokat bocsátottak át inhomogén mágneses térben, akkor a nyaláb két részre bomlott, amint ezt a 44-4 ábra mutatja. Az addigi elméletek ezt nem tudták megmagyarázni. 1925-ben Goudsmit és Uhlenbeck javaslatai helyes eredményre vezettek. Szerintük: (1) az elektron saját tengelye körül forgó, elektromos töltéssel bíró gömbként viselkedik, amelynek az impulzusmomentuma kvantált; (2) mágneses térben a mágneses dipólusmomentum csak kétféleképpen állhat be: vagy párhuzamos a mágneses térrel vagy ellentétes irányú (*paralel* vagy *antiparalel*). Az elektronnak ez a szemléletes modellje azonban nem illett bele a kvantummechanika kereteibe. A pörgő elektron rejtélyének megoldását 1928-ban P. A. M. Dirac adta meg, aki az elektron relativisztikus hullámmechanikai tárgyalását dolgozta ki. A szemléletes képet előzőleg csak azért fogadták el, mivel következtetései egyeztek a kísérleti tapasztalattal, a relativitáselmélet alkalmazásával azonban az eredmények önmaguktól adódtak. A *Dirac-elmélet, amely csak az elektron töltését és tömegét fogadja el kiindulási adatnak, az elektron összes többi alapvető tulajdonságát – ideértve a spint és az antielektron (pozitron) létezését – megadja!* Az elméleti fizikának ez az egyik legfényesebb győzelme volt – Dirac ezért 1933-ban (Schrödingerrel közösen) Nobel-díjat kapott.

44.4 A spin-pálya csatolás

Az előző pontban kifejtettük, hogy a spektrumvonalak finomszerkezete két mágneses dipólusmomentum kölcsönhatására jön létre; az egyik az elektron spinjéből, a másik a pályamenti (orbitális) mozgásából származik. A két momentum kölcsönhatása, „csatolása” a *spin-pálya csatolás*, vagy *L-S-csatolás*. A tiszta matematikai leírás absztraktsága miatt gyakran használják a

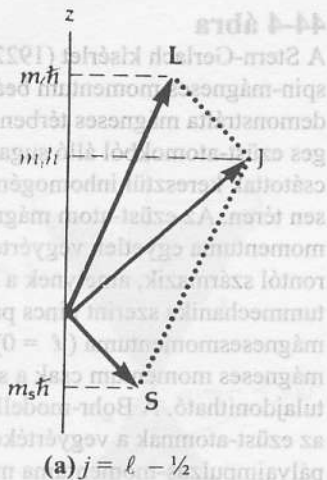
44-4 ábra

A Stern-Gerlach kísérlet (1922) a spin-mágneses momentum beállítását demonstrálta mágneses térben. Semleges ezüst-atomokból álló sugarat bocsátottak keresztül inhomogén mágneses térben. Az ezüst-atom mágneses momentuma egyetlen vegyértékelektrontól származik, amelynek a kvantummechanika szerint nincs pályamágnesesmomentuma ($\ell = 0$), ezért a mágneses momentum csak a spinnek tulajdonítható. A Bohr-modell szerint az ezüst-atomnak a vegyértékelektron pályaimpulzus-momentuma miatt lenne mágneses momentuma. A Sommerfeld által bevezetett iránykvantálás miatt ez az impulzusmomentum a mágneses térrel párhuzamos állású lenne. A kérdés tehát az volt, hogy a mágneses térben átlőtt atomnyaláb egy vagy három foltban csapódik az ernyőre. A kísérlet egyik jóslatot sem igazolta. Ehelyett a sugár két, jól szétváló vonalra bomlik, bizonyítva ezzel a spin-mágnesesmomentum térbeli orientációját a mágneses tér hatására. A spinmomentumok a tér irányához képest paralel vagy antiparalel módon állnak be; az inhomogén tér felfelé vagy lefelé téríti el – így áll elő a kétvonalas minta.

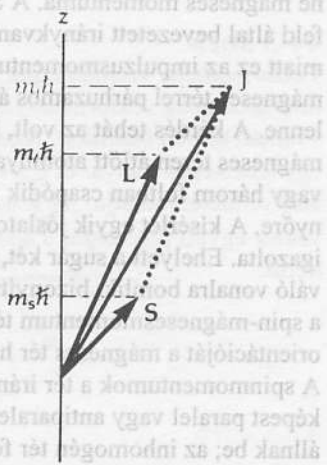


44-5 ábra

Az elektron koordináta-rendszerében a proton kering az elektron körül. Ez a mozgás olyan körárammal egyenértékű, amely az elektron tartózkodási helyén **B** mágneses térerősséget hoz létre.



(a) $j = \ell - 1/2$



(b) $j = \ell + 1/2$

44-6 ábra

L-S-csatolás esetén a **J** teljes impulzusmomentum a pályamenti és a spintől származó impulzusmomentum kétféle összeadásából képzelhető. Az abszolút értékek szokatlan, kvantált értéke következtében $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}$, $S = \sqrt{s(s+1)}$ és $J = \sqrt{j(j+1)}$ - ezért csak akkor adhatók össze ezek a vektorok, ha meghatározott, diszkrét értéket felvevő szöget zárnak be egymással.

mag körül keringő, saját tengelye körül forgó elektron szemléletes képét,⁶ ami ugyan nem helyes, de a megértést segíti. A klasszikus kép szerint, az elektronhoz rögzített koordinárendszerben a proton kering az elektron körül.

Ez a mozgás olyan körárammal egyenértékű, amely az elektron tartózkodási helyén **B** mágneses teret hoz létre. Az elektron μ_s mágneses momentuma a tér irányához képest paralel vagy antiparalel módon állhat be, és ennek $U = -\mu_s \cdot \mathbf{B}$ nagyságú helyzeti energia felel meg. (Az elektronhoz rögzített koordinárendszerben mért a **B** mágneses térerősség.)

A kvantált vektorokat az előzőekben vázolt módon adjuk össze, ugyan-ez érvényes a spin és a pálya impulzusmomentum összegződésére, a spin-pálya csatolásra is. Az impulzusmomentum szorosan összefügg a mágneses dipólusmomentummal, ezért a dipólusmomentumok kapcsolódását az impulzusmomentumok összege szabja meg. A [(44-8) egyenlettel definiált] pályamozgásból eredő **L** impulzusmomentumot és a [(44-13) egyenlettel definiált] **S** spin-impulzusmomentumot vektoriálisan összeadva kapjuk a **J** teljes impulzusmomentumot:

SPIN-PÁLYA (vagy L-S CSATOLÁS):
$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{44-17}$$

A **J** nagysága, akárcsak **L** és **S**, szintén kvantált a következő összefüggés szerint:

$$J = \hbar \sqrt{j(j+1)} \tag{44-18}$$

A 44-6 ábra mutatja, hogyan kapható meg **J** az **L** és **S** vektori összegzésével. Itt *j*-vel az ún. *belső kvantumszámot* jelöltük, amely ℓ és *s* kombinációjával jön létre. Az $s = 1/2$ érték miatt ennek nagysága csak

$$j = \ell \pm \frac{1}{2} \tag{44-19}$$

lehet. A **J** z-tengely menti vetülete ugyanúgy kvantált mint **L**; a kvantált vetület nagysága $m_j \hbar$. A **J** z-irányú komponense tehát:

$$J_z = m_j \hbar \tag{44-20}$$

ahol m_j csak az

$$m_j = j, (j-1), (j-2), \dots, -(j-2), -(j-1), -j \tag{44-21}$$

értékeket veheti fel - összesen tehát $2j + 1$ értéket.

Az **L** és **S** impulzusmomentumok összegezése meghatározza, hogy hogyan kell összeadni a megfelelő dipólusmomentumokat; ezt a 44-6 ábrán láthatjuk. Mindhárom vektor: **L**, **S** és **J** nagysága kvantált, így az általuk bezárt szög sem lehet akármekkora. A dublettek (kettős vonalak) energiaszintjeihez tartozó különbség az $(\ell + 1/2)$ és $(\ell - 1/2)$ azaz a „felfelé” illetve „lefelé” irányuló spinekhez tartozó nívók különbségének felel meg.

Úgy tűnik, mintha a spin-pálya-csatolás figyelembevételével újabb kvantumszámokat vezetünk volna be az elektron állapotának meghatározására. Látni fogjuk, hogy az elektron állapotát vagy az n , ℓ , m_ℓ és m_s kvan-

⁶ Az analógia a Föld-Nap-rendszerre utal: A Földnek Nap körüli mozgásához is tartozik impulzusmomentum, ehhez járul a Föld saját tengelye körüli forgásából származó momentum.

tumszámokkal vagy az $n, \ell, j,$ és m_j kvantumszámokkal jellemezhetjük – nincs szükség további kvantumszámokra.

ALTERNATÍV KVANTUM SZÁMOK (L-S csatolás esetén)	$\left\{ \begin{array}{l} n = 1, 2, 3, \dots \\ \ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1) \\ j = \ell \pm 1/2 \\ m_j = j, (j-1), \dots, -(j-1), -j \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} \text{főkvantumszám} \\ \text{mellékvantumszám} \\ \text{belső kvantumszám} \\ \text{(z komponens)} \end{array} \right\} \quad (44-22)$
--	--	--

44.5 A hidrogénatom kvantumállapotai

A következőkben a hidrogénatom elektronja számára lehetséges energiaállapotokat írjuk le. Megállapítottuk, hogy az elektron állapotát négy kvantumszám határozza meg. Egy példán mutatjuk meg, hogyan határozható meg az összes lehetséges állapot.

44-2 PÉLDA

Soroljuk fel az elektron $n = 1$ és $n = 2$ állapotaiban lehetséges kvantált energiaállapotokat. Végezzük el ezt: (a) az n, ℓ, m_ℓ és m_s és (b) az n, ℓ, j és m_j kvantumszámok segítségével is.

MEGOLDÁS

(a) A kvantumszámok csak a következő értéket vehetik fel:

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

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

$$m_s = \pm 1/2$$

Ezekkel a szabályokkal készítettük el a 44-1 táblázatot. $n = 1$ esetben összesen 2, $n = 2$ esetben összesen 8 állapot lehetséges.

(b) Az $n, \ell, j,$ és m_j négyest használva ezek értékei:

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

$$j = \ell \pm 1/2 \text{ (ahol } j > 0)$$

$$m_j = \pm j, \pm(j-1), \pm(j-2), \dots$$

ugyanannyi; tehát $n = 1$ esetben 2, $n = 2$ esetben 8 állapotot kapunk, amint ezt a 44-2 táblázat szemlélteti.

44-1 táblázat Az n, ℓ, m_ℓ és m_s kvantumszámokból levezetett állapotok

n	ℓ	m_ℓ	m_s
1	0	0	+1/2
1	0	0	-1/2
2	0	0	+1/2
2	0	0	-1/2
2	1	0	+1/2
2	1	0	-1/2
2	1	+1	+1/2
2	1	+1	-1/2
2	1	-1	+1/2
2	1	-1	-1/2



44-2 táblázat Az $n, \ell, j,$ és m_j kvantumszámokból levezetett állapotok

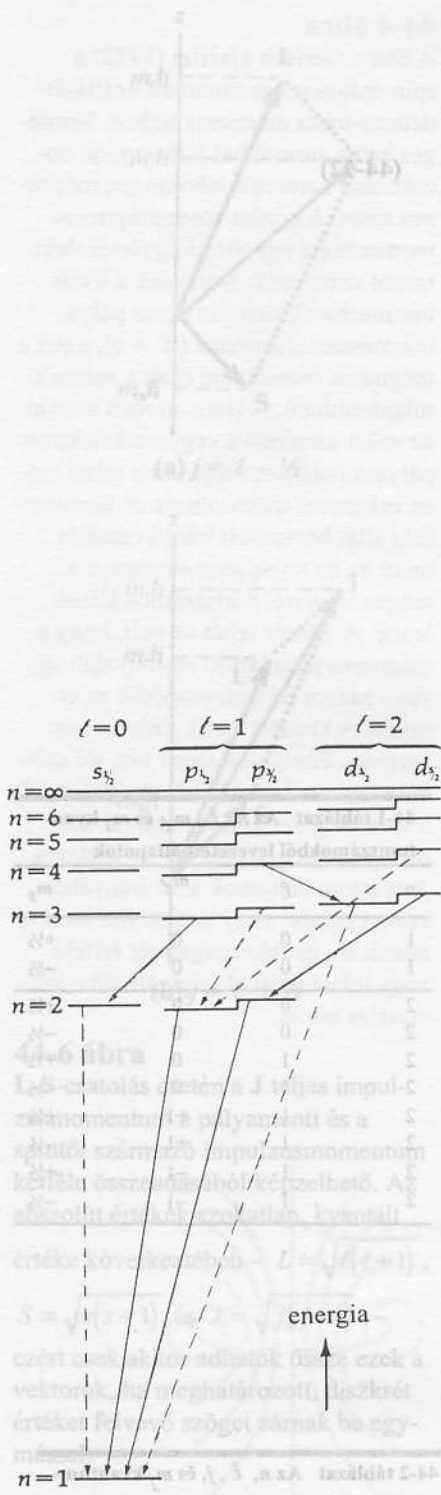
n	ℓ	j	m_j
1	0	1/2	+1/2
1	0	1/2	-1/2
2	0	1/2	+1/2
2	0	1/2	-1/2
2	1	3/2	+3/2
2	1	3/2	-3/2
2	1	3/2	+1/2
2	1	3/2	-1/2
2	1	1/2	+1/2
2	1	1/2	-1/2

Spektroszkópiai jelölés

Gyakran egyszerűbb, ha az állapot meghatározására a kvantumszámok felsorolása helyett **spektroszkópiai jelöléseket** alkalmazunk. Egy példa erre: $3d_{3/2}$, ahol a betűt megelőző szám az n főkvantumszám. A betű maga az ℓ mellékvantumszám helyett áll a következő séma szerint:

ℓ értéke	0	1	2	3	4	5
Betű	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>

Eredetileg az *s, p, d* és *f* betűket a spektrumvonalak vizuális észlelése alapján, azok jellegének megadására használták; a megfelelő angol szó kezdőbetűje szerint: *s=sharp, p=principal, d=diffuse* és *f=fundamental*. Indexben a belső kvantumszámot tüntetjük fel. Lássunk erre néhány példát.



44-7 ábra

A hidrogén energiaszint-diagramja a finomszerkezet figyelembevételével. Folytonos vonallal néhány megengedett átmenetet adtunk meg, míg a szaggatott vonalak tiltott átmeneteket jelölnek, azaz olyanokat, melyek megsértik a $\Delta \ell = \pm 1$ kiválasztási szabályt. (Lásd a 7. sz. lábjegyzetet.) A finomszerkezeti felhasadás a rajzon erősen el van túlozva.

44-3 PÉLDA

Az alább felsorolt elektronállapotok között vannak nem megengedettek is; melyek azok?

- (a) $1p_{3/2}$ (b) $1s_{1/2}$ (c) $2p_{5/2}$ (d) $4d_{3/2}$ (e) $5f_{5/2}$ (f) $6f_{3/2}$

MEGOLDÁS

Csak (b), (d) és (e) a megengedettek, mivel ezeknél $j = \ell \pm 1/2$ és $\ell < n - 1$ (a) hibás, mivel $\ell > n - 1$ (c) hibás, mert $j > \ell + 1/2$ és (f) hibás $j < \ell - 1/2$ miatt.

A héj jelölés

A spektroszkópiai jelölésekben nem alkalmazzák, de a röntgensugárással kapcsolatban használják a főkvantumszám helyett a következő nagybetűket:

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

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

44.6 A hidrogén energiaszint-diagramja

A 43. fejezetben láttuk, hogy a hidrogénatom Bohr-elméletében egyetlen kvantumszám, az n főkvantumszám szerepel, amely az energiaállapotot határozza meg. Ennek alapján rajzoltuk meg a 43-10 ábrán látható egyszerű energiaszint-diagramot. A spin-pálya-csatolással kiegészített hullámmechanikai elmélet finomítja az energiaszinteket, így a diagram is lényegesen bonyolultabbá válik; ennek egy részletét mutatja a 44-7 ábra. Itt erősen eltúlozva tüntettük fel az energia függését a spin-pálya kölcsönhatástól. A valóságban a $3p_{3/2}$ szint $3p_{1/2}$ szint feletti magassága csak kb. 1/1000-ed része a $3p_{1/2}$ és a $3s_{1/2}$ nívók közötti energiakülönbségnek.

Egy magasabb és egy alacsonyabb energiaállapot között nem valósulhat meg minden átmenet, csak az ún. „megengedett” átmenetek, amelyek bizonyos kiválasztási szabályoknak tesznek eleget. Itt arra kell gondolni, hogy amikor az atom két állapot energiakülönbségének megfelelő energiát veszít, akkor fotonot bocsát ki, és a foton egységnyi impulzusmomentumot is magával visz.⁷

⁷ Minden fotonnak \hbar nagyságú impulzusmomentuma van. (Ennek klasszikus analógiája a cirkulárisan polarizált elektromágneses hullám.) A „megengedett” átmeneteket szabályozó kiválasztási szabályok az impulzusmomentum-megmaradás törvényének érvényesülését biztosítják.

KIVÁLASZTÁSI SZABÁLYOK

$$\Delta \ell = \pm 1$$

„megengedett” átmenetek

$$\Delta m_\ell = 0, \pm 1$$

Itt nem részletezett hatások következtében ritkán előfordulnak a kiválasztási szabályok által „tiltott” átmenetek is, de az impulzusmomentum megmaradásának törvénye azokban is érvényes.

44.7 A hidrogén-atom hullámfüggvényei

A (44-4) hullámegyenlet minden megoldásában szerepel egy kezdetben határozatlan együttható például a legalacsonyabb (1s) állapotra a megoldás alakja:

$$\psi = Ae^{-(r/a)}$$

ahol A tetszés szerinti állandó. Kimutatjuk, hogy a **Bohr-modell** szerinti alapállapothoz tartozó pályasugár: a Bohr-sugár:

$$\text{A BOHR-SUGÁR} \quad a \equiv \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2} = 0,0529 \text{ nm} \quad (44-23)$$

Azt, a már 43-6 pontban tárgyalt műveletet, amikor az A állandónak megfelelő értéket adunk, **normálisnak** nevezzük. (A hidrogén hullámfüggvényei háromdimenziósak, míg a 43-6. pontban egydimenziós esetet tárgyaltunk.) A ψ fizikai jelentése az, hogy segítségével meghatározható, hogy hol tartózkodik valószínűleg az elektron a maghoz képest (ellentétben a Bohr-elmélettel, amely szerint az elektron *alapállapotban* a magtól pontosan 0,0529 nm távolságra található.) A P **valószínűségi sűrűségi függvényt** most is a

$$P = |\psi|^2 = \psi\psi^* \quad (44-24)$$

összefüggéssel határozzuk meg, ahol ψ komplex függvény is lehet.* A hidrogén 1s alapállapotára a hullámegyenlet megoldása: $\psi = Ae^{-(r/a)}$, ezért

$$P = |\psi|^2 = \psi\psi^* = A^2 e^{-(2r/a)} \quad (44-25)$$

Annak a **valószínűsége**, hogy az elektront az dV térfogatban találjuk:

A ψ ÁLLAPOTÚ
RÉSZECSCKE \mathcal{P}
MEGTALÁLÁSI

$$\mathcal{P} = \int |\psi|^2 dV \quad (44-26)$$

VALÓSZÍNŰSÉGE AZ $\int dV$
TÉRFOGATBAN:

Nyilvánvaló, hogy annak a \mathcal{P} valószínűsége, hogy az elektront $r = 0$ és $r = \infty$ között *bárhol* megtaláljuk 1. Az alapállapot hullámfüggvénye a mag körül szimmetrikus, ezért a valószínűség nem függ a θ és ϕ koordinátáktól. A dV térfogatelemnek tehát $4\pi r^2$ felületű, dr vastagságú gömbhéjat választhatunk, amellyel:

$$\mathcal{P} = \int_0^\infty A^2 e^{-(2r/a)} 4\pi r^2 dr = 1$$

Az integrál kiszámítása után $4\pi A^2 (a^3/4) = 1$

A-ra megoldva: $A = (\pi a^3)^{-1/2}$

* A komplex számokban $i = \sqrt{-1}$ szerepel. Egy szám*-gal jelölt komplex konjugáltjában i -t $-i$ helyettesíti; ha $\psi = Ae^{i\phi}$, akkor $\psi^* = Ae^{-i\phi}$. A $\psi\psi^* = A^2 e^{i\phi} e^{-i\phi} = A^2 e^0 = A^2$ szorzat mindig valós szám.

Ezt behelyettesítve az (1s) alapállapot *normált hullámfüggvényére* azt kapjuk, hogy

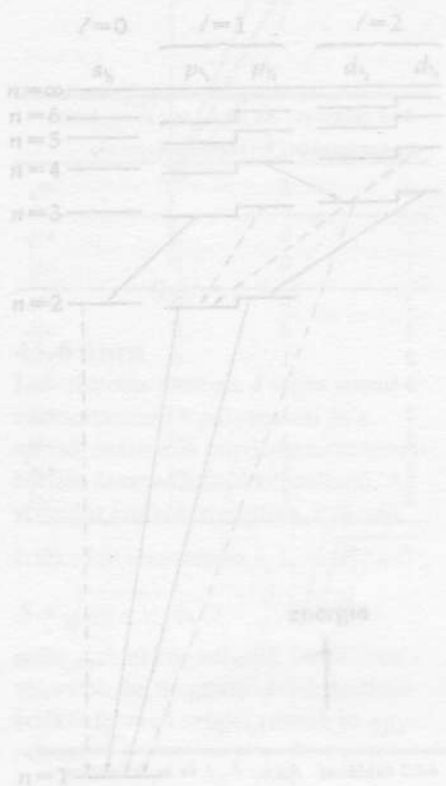
$$\psi = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-(r/a)} \quad (44-27)$$

A hidrogén két legalacsonyabb állapotának normált hullámfüggvényei a 44-3. táblázatban találhatóak. Az a állandó azonos a hidrogén alapállapotához tartozó Bohr-pályasugárral. Megjegyezzük, hogy az 1s és 2s állapotban a hullámfüggvény nem függ θ -tól és ϕ -tól, azaz ezekben a hullámfüggvény maga körül gömbszimmetrikus.

44-3 táblázat A hidrogénatom normált állapotfüggvényei *

	n	ℓ	m_ℓ	ψ
K – héj	1	0	0	
L – héj	2	0	0	
		1	0	
		1	+1	
		1	-1	

*ahol $a = \epsilon_0 \hbar^2 / \pi m e^2 = 0,0529 \text{ nm}$, a Bohr-rádiusz és $i = \sqrt{-1}$.



44-7 ábra
A hidrogén energiaszint-diagramja a finomszerkezet figyelembevételével. Folytonos vonallal néhány megengedett átmenetet adtunk meg, míg a szaggatott vonalak tiltott átmeneteket jelölnek, azaz olyanokat, melyek megsértik a $\Delta \ell = \pm 1$ kiválasztási szabályt. (Lásd a 7. sz. lábjegyzetet.) A finomszerkezeti felhasadás a rajzon erősen el van tolozva.

Hol van az elektron?

A következő kérdésünk: mi annak a valószínűsége, hogy az alapállapotú hidrogénatomban az elektront a magtól r távolságban leíró, kis Δr környezetben megtaláljuk? Az alapállapot hullámfüggvényének gömbszimmetriája következtében a (44-26) egyenletben szereplő térfogatelem $dV = 4\pi r^2 dr$ – az alapállapot hullámfüggvényét megtaláljuk a 44-3 táblázatban; ezért

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

Az integrált nem kell kiszámítanunk, hiszen feltételeztük, hogy r értéke a Δr kis környezetben állandó, így:

$$\mathcal{P} = \left(\frac{4r^2}{a^3} \right) e^{-(2r/a)} \Delta r \quad (44-28)$$

Ebben az esetben a $P(r)$ *radiális valószínűségsűrűség*:

$$P(r) = \left(\frac{4r^2}{a^3} \right) e^{-(2r/a)} \quad (44-29)$$

ezért:

$$\mathcal{P} = \int P(r) dr \quad (44-30)$$

Lényeges, hogy megkülönböztessük a P *valószínűségsűrűség-függvényt* a $P(r)$ *radiális valószínűségsűrűség-függvénytől*. A $P\Delta V$ annak a valószínűsége, hogy az elektront egy kis ΔV térfogatelemben, míg $P(r) \Delta r$ annak a valószínűsége, hogy a Δr kis *radiális* környezetben találjuk meg.

44-4 PÉLDA

Határozzuk meg azt a (protontól számított) r távolságot, amelynek környezetében az elektron a legnagyobb valószínűséggel található.

MEGOLDÁS

Az elektron legvalószínűbb tartózkodási helye ott van, ahol a radiális valószínűsége-sűrűség-függvénynek maximuma van, tehát olyan r értéknél, amelyre nézve

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0$$

$$\frac{d}{dr} \left[\left(\frac{4r^2}{a^3} \right) e^{-2r/a} \right] = 0$$

Az állandókat kiküszöbölve: $\frac{d}{dr} [r^2 e^{-2r/a}] = 0$

$$2re^{-2r/a} - \left(\frac{2r^2}{a} \right) e^{-2r/a} = 0$$

ahonnan: $r = a$

Alapállapotban, tehát ha $n = 1$, a magtól számított legvalószínűbb távolság a Bohr-sugár. Meg kell azonban jegyezni, hogy ez *nincs* teljesen összhangban a Bohr-moddal, amely pontosan megállapítja a pályasugarat, míg a kvantummechanika csak azt mondja meg, hogy mi a valószínűsége annak, hogy az elektront a magtól bizonyos távolság környezetében megtaláljuk. Még jobban kiténik ez a következő példából.

44-5 PÉLDA

Mi a valószínűsége annak, hogy a hidrogén alapállapotában az elektront a magtól az $n = 1$ -nek megfelelő Bohr-sugárnál kisebb távolságra találjuk meg?

MEGOLDÁS

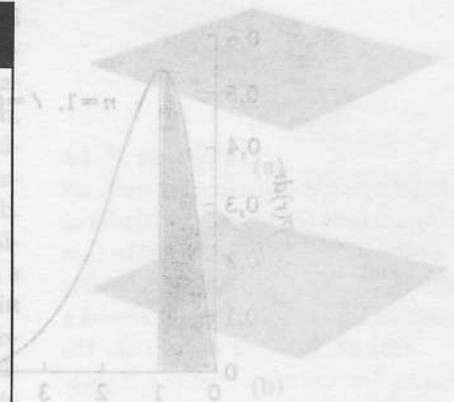
Az elektron megtalálási valószínűségét a (44-30) egyenlettel határozhatjuk meg:

$$\mathcal{P} = \int_0^a P(r) dr$$

A $P(r)$ értékét a (44-29) egyenletből behelyettesítve azt kapjuk, hogy

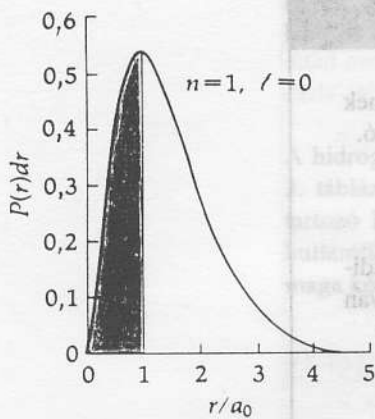
$$\mathcal{P} = \left(\frac{4}{a^3} \right) \int_0^a r^2 e^{-2r/a} dr = 1 - 5e^{-2} = 0,323$$

Tehát az a valószínű, hogy elektron az idő egyharmad részében található a Bohr-sugárán belül. A Bohr-modellben az idő egyáltalán *nem* szerepel.

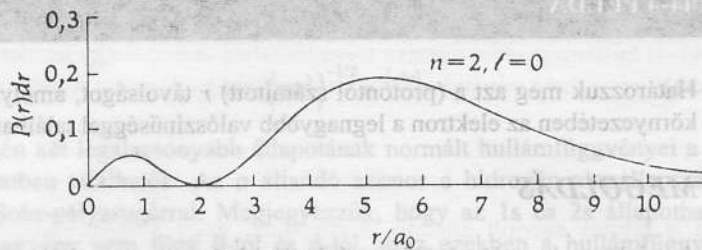


44-10 ábra

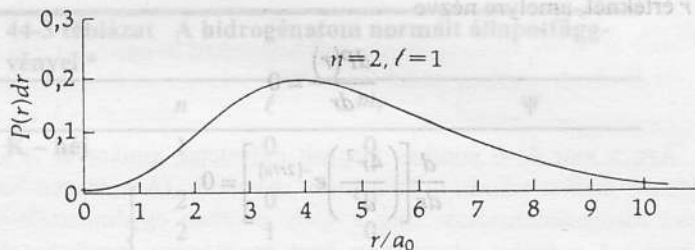
A hidrogén-atom egymástól különböző állapotjainak (n=1, 2, 3) valószínűségieloszlása. A csomópontok koncentrikus körök, vagy olyan egyenes vonalak, amelyek a magon mennek keresztül. A valódi háromdimenziós eloszlás úgy képzelhető el, hogy a rajzot a magon átmenő vízszintes vonal körül megforgatjuk. A csomópontok ekkor gúmbócok vagy köpek lesznek. Ezekben a gerjesztett állapotokban a hidrogénatom sokkal nagyobb, mint a legalsó, n=1 állapotban. A magtól távolabbra a valószínűség is nagyobb, mint a legalsó, n=1 állapotban. A valószínűség a magtól távolabbra is nagyobb, mint a legalsó, n=1 állapotban. A valószínűség a magtól távolabbra is nagyobb, mint a legalsó, n=1 állapotban.



(a) 1s állapot ($n = 1, \ell = 0$). A beárnyékolt részből látszik, hogy az elektron kb. 32% valószínűséggel tartózkodik a klasszikus Bohr-rádiuson (a_0) belül (a görbe csúcsa), és kb. 68% a valószínűsége annak, hogy távolabb legyen a magtól.



(b) 2s állapot ($n = 2, \ell = 0$).

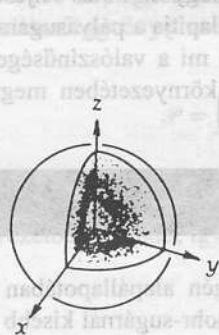


(c) 2p állapot ($n = 2, \ell = 1$).

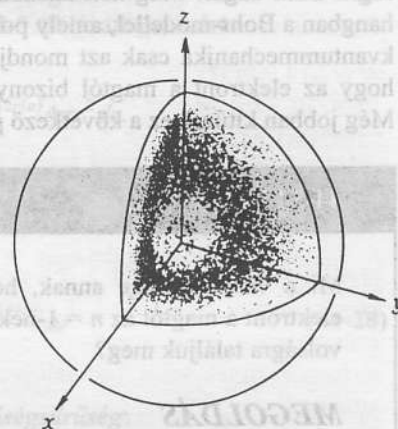
44-8 ábra

A hidrogén három legalacsonyabb állapotának $P(r)$ radiális valószínűségi-sűrűség-függvénye.

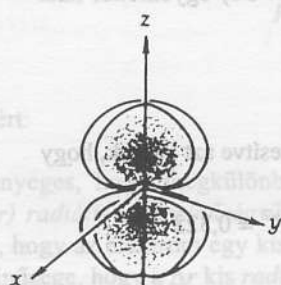
A könnyebb megértés céljából készítettük a 44-8 ábrát, amely az előbbi két példához kapcsolódva a hidrogén 1s alapállapotára mutatja a $P(r)$ radiális valószínűségi-sűrűség-függvény grafikonját. A 44-4 példa eredménye az volt, hogy a görbe maximuma az $n = 1$ Bohr-sugárnál, azaz $r = a_0 = 0,0529$ nm-nél van (44-8a ábra). Az árnyékolt rész a görbe alatti terület 32,3%-a; az idő ilyen hányadában van az elektron a maghoz közelebb, mint a Bohr-sugár.



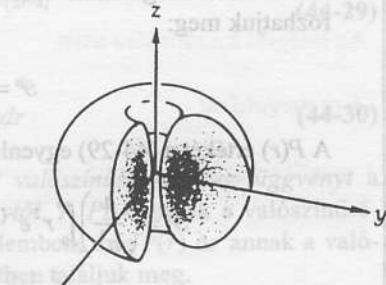
(a) $n = 1, \ell = 0$



(b) $n = 2, \ell = 0$



(c) $n = 2, \ell = 0, m_\ell = \pm 1$



(d) $n = 2, \ell = 1, m_\ell = 0$

44-9 ábra

A hidrogénatom 1s, 2s és 3s állapotbeli valószínűségi-sűrűségének egyik szemléltetési módja. Az eloszlás határait bizonyos mértékig önkényesen húztuk meg; annak a valószínűsége, hogy az elektront a felhő határán kívül találjuk meg, kisebb mint 10%. A mag minden esetben a koordináta-rendszer origójában van. Mennél sűrűbb a felhő, annál valószínűbb, hogy az elektront ebben a környezetben megtalálhatjuk.

Viszonylag könnyű a hidrogénatom Bohr-modelljének megfelelő, jól meghatározott pályákat ábrázolni, ezzel szemben a kvantummechanikai modellben nemcsak a háromdimenziós képet kell feltüntetni, de az elektron valószínű tartózkodási helyét is. Az ábrázolás egyik módja a 44-9 ábra szerinti, ahol a valószínűségi „felhők” keresztmetszete látható. A felhő sűrűsége arányos a megtalálás valószínűségével. A felhők határának megrajzolása meglehetősen önkényes – úgy van meghúzva, hogy az elektron azon kívül kb. 10%-nál kisebb valószínűséggel tartózkodik. Ne keverjük össze a valószínűségi sűrűség ábrázolását a *radiális* valószínűség sűrűségével. Nézzük például a 44-9a ábrát. A felhő itt közepén a legsűrűbb, ennek ellenére az elektron itt kevés ideig tartózkodik, mivel ha r értéke kicsi, akkor a hozzá tartozó térfogatelem kisebb mint nagy r értéknél. A 0,0529 nm-en kapott nagy valószínűség a nagy térfogati valószínűség és a nagyméretű térfogatelem kombinációjának az eredménye. Az ábrázolás egy másik módját a 44-10 ábrán mutatjuk. A felhősűrűséget a mag síkjában vett keresztmetszeten megjelenő dombok magassága képviseli.

44.8 A Pauli-féle kizárási elv és az elemek periódusos rendszere

Ebben a pontban azt tárgyaljuk, hogy hogyan oszlanak meg az elektronok a lehetséges energiaállapotok között többelektronos atomokban. Az elektronok lehetséges legalacsonyabb energiaállapotához kötődnek többek között az elemek kémiai és elektromos tulajdonságai. A Mengyelejev által 1870-ben a kémiai tulajdonságok alapján megalkotott periódusos rendszert ezért fizikai alapon tudjuk értelmezni.

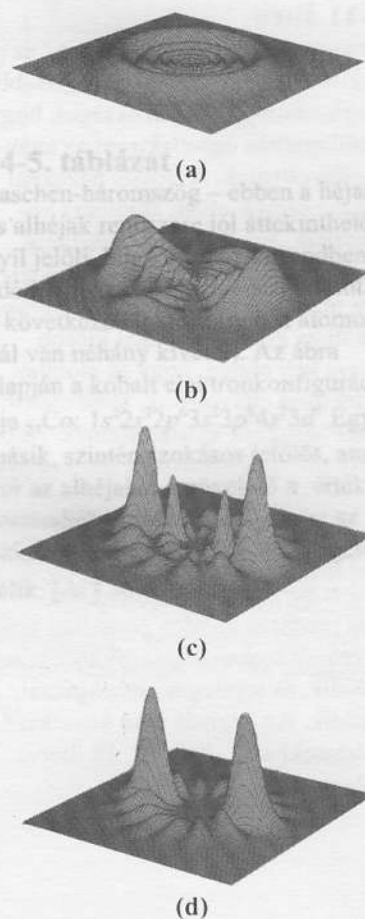
Építsük fel az atomokat elektronok hozzáadogatásával (és természetesen az elektromos semlegesség megőrzése céljából, vigyünk be megfelelő számú pozitív töltést is). Kezdjük az $1s^1$, azaz alapállapotú hidrogénnel; a felső index itt az elektronok számát jelenti az $1s$ állapotban. Az elektronok – miközben bevisszük őket az atomba – a legalacsonyabb energiaállapotot igyekeznek elfoglalni. A hélium képződésekor például a két elektron az $n = 1$, $\ell = 0$ állapotban van, ellentett spinnel. A hélium alapállapotát $1s^2$ -vel jelöljük. A lítiumra áttérve, nincs már több $n = 1$ állapotunk, ezért a harmadik elektron az $n = 2$ héjra kerül. A lítium alapállapotának jele $1s^2 2s^1$. További elektronok hozzáadásával a 44-4. táblázatban feltüntetett alapállapotokhoz jutunk.

Kitűnik, hogy az elektronok nem mindig a legalacsonyabb energiaállapotokat keresik, hiszen akkor mind $1s$ állapotban lennének. A 44-2. táblázatból láthatjuk, hogy $n = 1$ állapotban csak két elektron, $n = 2$ állapotban pedig nyolc elektron lehet. A 44-1 példában már kiderítettük, hogy az $n = 1$ állapotban (a K -héjon) csak két lehetséges állapot van, az $n = 2$ állapotban (L -héjon) csak nyolc. Wolfgang Pauli 1925-ben állapította meg a lehetséges energiaállapotok és az alapállapot konfigurációja közötti kapcsolatot, mely szerint:

A PAULI-FÉLE KIZÁRÁSI ELV:

Egy atomban nem lehet két olyan elektron, amelynek mind a négy – n , ℓ , m , m_s vagy n , ℓ , j , m_j – kvantumszáma azonos.

Ezt a szabályt később sikerült *levezetni* a kvantumelmélet egy finomított változata alapján, de a maga idején igen nagy segítséget jelentett az atomok tulajdonságainak és a periódusos rendszer szabályainak megértésében. A következő példa mutatja, hogy hogyan kell az egyes héjakon az állapotok számát megállapítani.



44-10 ábra

A hidrogénatom egymástól különböző impulzusmomentummal bíró, erősen gerjesztett ($n = 8$) állapotainak valószínűségeloszlása. A csomóvonalak koncentrikus körök, vagy olyan egyenes vonalak, amelyek a magon mennek keresztül. A valódi háromdimenziós eloszlás úgy képzelhető el, hogy a rajzot a magon átmenő vízszintes vonal körül megforgatjuk. A csomófelületek ekkor gömbhéjak vagy kúpok lesznek. Ezekben a gerjesztett állapotokban a hidrogénatom sokkal nagyobb, mint a legalacsonyabb energiájú állapotokban. A magtól a rajz széléig mérhető távolság 380-szorosa az $n = 1$ -hez tartozó Bohr-sugárnak.

44-4 táblázat Az elemek konfigurációja alapállapotban

Elem	Elektronszám	Alapállapot*	<i>n</i> értéke
H	1	1s ¹	K héj
He	2	1s ²	(<i>n</i> = 1)
Li	3	1s ² 2s ¹	L héj (<i>n</i> = 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 héj (<i>n</i> = 3)
Mg	12	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²	
Al	13	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ¹	

* A belső, lezárt héjakra gyakran rövidített jelölést használnak, pl. a lítium jele [He] 2s¹, az alumíniumé [Ne] 3s²3p¹. A zárójelben található szimbólum a lezárt héjat jelöli.

44-6 PÉLDA

Határozzuk meg az *n* = 3 héj elektronjainak a számát.

MEGOLDÁS

Éppen úgy, mint a 44-1 példában soroljuk fel *n* = 3 esetében a kvantumállapotokat

Az *l* = 2 esetében *m_l* öt értéket vehet fel, páronként *m_s* ellentett értékével, azaz összesen tíz *l* = 2, ill. 3d¹⁰ állapot van:

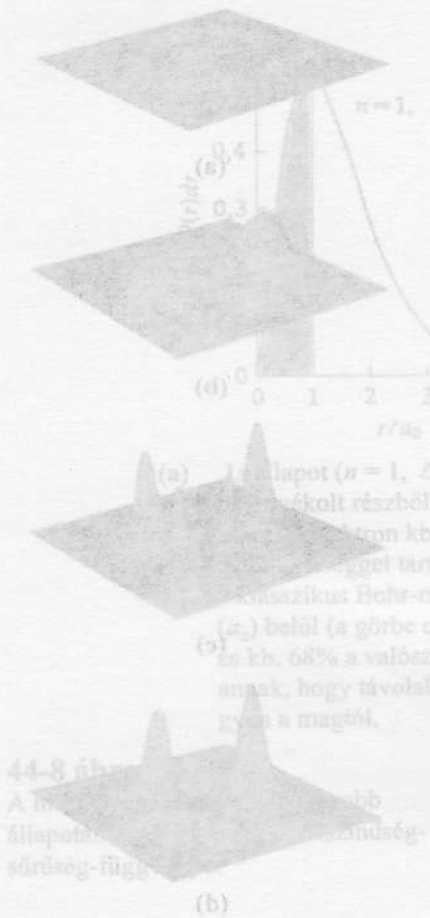
Az *l* = 1 esetben három *m_l* van, páronként *m_s* ellentett értékével, azaz összesen hat *l* = 1, ill. 3p⁶ állapot van:

Az *l* = 0 esetben csak egy *m_l* érték lehet, itt is két ellentett *m_s* értékkel; összesen két *l* = 0, ill. 3s² állapot:

A betöltött *n* = 3 héj konfigurációja tehát: 3s²3p⁶3d¹⁰ – ez összesen tizennyolc állapot.

A 44-3 táblázat alapján úgy tűnhet, mintha egyszerűen először be kellene tölteni az *n* = 2 héjat, majd az *n* = 3 héjat, és így tovább folyamatosan. A helyzet nem ilyen egyszerű, mivel az energia értéke nem csak *n*-től hanem *l* -től is függ, (és természetesen az *L-S*-csatolástól is). Egyes magasabb héjak energiaállapotai kezdik átfedni a belsőkéit, így megtörik azt a szabályt, hogy sorban töltsük be az egyes elektronállapotokat. Ez világosan látszik a 44-5 táblázatból. A kvantummechanikával ezeket a kivételeket is meg tudjuk magyarázni. Az atom alapállapotú konfigurációjában az elektronok a lehetséges legalacsonyabb energiaállapotban helyezkednek el, de anélkül, hogy megsérténék a Pauli-féle kizárási elvet.

Betöltött héjban *S* = 0, *L* = 0 és *J* = 0; a betöltött héjakban tehát az elektronok kombinációjának eredménye a zérus impulzuszómomentum és a zérus mágneses momentum. Az atom kémiai tulajdonságait elsősorban a kül-



44-10 ábra
A hidrogénatom egymástól különböző impulzuszómomentummal bíró, erősen gerjesztett (*n* = 8) állapotainak valószínűségeloszlása. A csomópontok koncentrikus körök, vagy olyan egyenes vonalak, amelyek a magon mennek keresztül. A valódi háromdimenziós eloszlás úgy képzelhető el, hogy a rajtot a magon átmenő vízszintes vonal körül megforgatjuk. A csomópontok láthatóak ekkor gömbök vagy kúpok formájában. Ezekben a gerjesztett állapotokban a hidrogénatom sokkal nagyobb, mint a legalacsonyabb energiájú állapotokban. A magon a gerjesztett állapotoknál a valószínűség eloszlása sokkal nagyobb, mint a legalacsonyabb energiájú állapotokban. A magon a gerjesztett állapotoknál a valószínűség eloszlása sokkal nagyobb, mint a legalacsonyabb energiájú állapotokban. A magon a gerjesztett állapotoknál a valószínűség eloszlása sokkal nagyobb, mint a legalacsonyabb energiájú állapotokban.

44-5 táblázat Héjak

Röntgen jelölés	K	L	M	N	O	P
n	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						...

ső elektronjai határozzák meg.⁹ Emiatt hasonló a kémiai jellege azoknak az atomoknak, amelyeknél a konfiguráció „betöltött héj plusz egy elektron”, mivel a kémiai tulajdonságok elsősorban a belső héjaktól távol elhelyezkedő, lazán kötött „plusz” elektrontól származnak. Ezek az atomok külső elektronjukat könnyen átadják más atomoknak, és +1 töltésű ionokat képeznek, míg a másik atomból -1 töltésű ion lesz. Ezt a csoportot az igen reakcióképes *alkálifémek* (lítium, nátrium, kálium, rubídium, cézium és francium) alkotják. A *halogéneket* a „betöltött héj mínusz egy elektron” csoport alkotja (fluor, klór, bróm, jód és asztácium) – ezek hajlamosak arra, hogy egy extra elektron felvételével betöltötté tegyék az elektronhéjukat. Az atomok összekapcsolódásának, a kémiai kötésnek egyik típusa az *ionos kötés*. A nátriumklorid úgy jön létre, hogy a nátriumatom átadja 3s elektronját a klóratomnak, amely ezzel feltölti a 3p alhéjat, és Na^+Cl^- képződik. A két iont a kölcsönös Coulomb-vonzás tartja össze. Léteznek más típusú kémiai kötések; ilyen az, ahol az atomokhoz közösen tartozik egy vagy több elektron: a *kovalens kötésben* két vagy több atom megosztja – többé vagy kevésbé egyenlő arányban – egy vagy több elektront. A H_2 hidrogénmolekula példája a tipikusan kovalens kötéssel összekapcsolt molekulának. Utoljára említjük a nemesgázokat (hélium, argon, kripton, xenon és radon), amelyek egyáltalán nem mutatnak hajlandóságot arra, hogy felvegyenek vagy elveszítsenek egy elektront, ezért normális körülmények között nem képeznek más atomokkal molekulákat.¹⁰ (lásd a 44-11 ábrát)

⁹ Egyes fizikusok fölényesen azt mondják vegyész barátaiknak, hogy az egész kémia benne van a Schrödinger-egyenletben, ami persze túlzás, bár van némi valóságalapja. A vegyész válasza általában az, hogy a Schrödinger-egyenlet kizárólag csak az egy elektront tartalmazó atomok esetében oldható meg pontosan! Máskor közelítő módszereket kell alkalmazni. Az igazság az, hogy minden tudományban (így a kémiában is) közelítésekkel élnek – abszolút bizonyosságot csak egyes, nem természettudományos területeken kívánnak meg.

¹⁰ A „nemes” gáz elnevezés abból adódik, hogy ezek az anyagok „elzárkóznak” attól, hogy más, kevésbé előkelő atomokkal egyesüljenek!

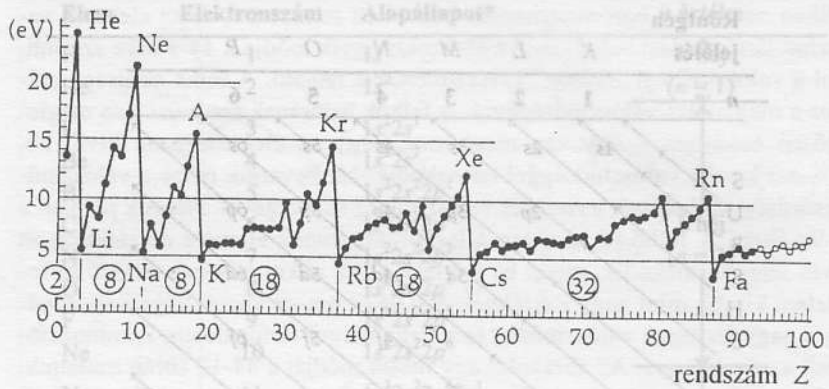
44-5. táblázat

Paschen-háromszög – ebben a héjak és alhéjak rendszere jól áttekinthető. A nyíl jelöli, hogy milyen sorrendben adódik hozzá az előző energiaszinthez a következő elektron (nehéz atomoknál van néhány kivétel). Az ábra alapján a kobalt elektronkonfigurációja $_{27}\text{Co}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$. Egy másik, szintén szokásos jelölés, amikor az alhéjakat a növekvő n érték sorrendjében tüntetik fel – azaz az előző példában a két utolsót megcserélik: $[\text{Ar}] 3d^7 4s^2$.

44-11 ábra

Egy atom ionizációs energiája az az (elektronvoltban kifejezett) legkisebb energia, amely ahhoz szükséges, hogy alapállapotban egy elektront az atomból eltávolítsunk. A nemes gázoknál látható csúcsok olyan atomokra vonatkoznak, amelyek elektronhéja teljes. A következő hozzáadott elektron a magtól távolabbi, eggyel magasabb héjra kerül. Itt sokkal kisebb energia kell ahhoz, hogy az atomból az elektront eltávolítsuk; ebbe a csoportba tartoznak az alkálifémek. Ahogy egyre több elektront (és természetesen megfelelő számú protont) adunk az atomhoz, az elektronok kötése egyre erősebb lesz; addig nő, míg az adott héj (alhéj) megtelik. A periódusos rendszer minden periódusa tehát egy erősen reakcióképes alkálifémmel kezdődik, és semleges nemesgázzal végződik. Az egymás után következő periódusokban 2, 8, 8, 18, 18 illetve 32 elem van.

ATOMOK IONIZÁCIÓS ENERGIÁJA

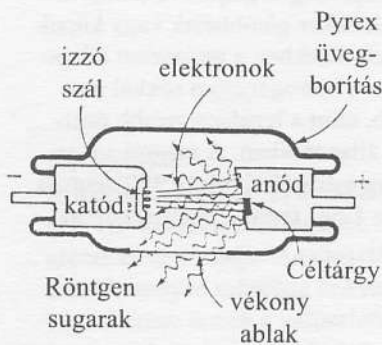


44.9 A röntgensugarak

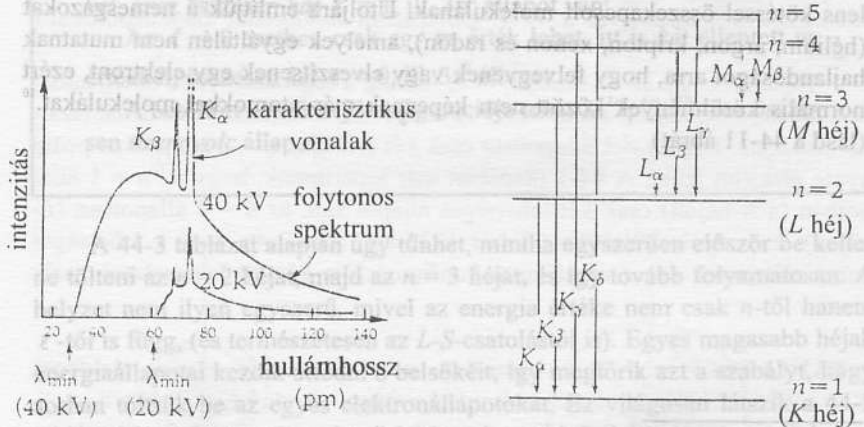
Amikor nagyenergiájú elektronok fém-céltárgyba ütköznek, **röntgensugárzás** keletkezik, azaz olyan fotonok jönnek létre, amelyek hullámhossza nagyon rövid: 0,001 és 10 nm között van. A 44-12 ábrán modern röntgenső vázlatos rajza látható, tipikus röntgenspektrummal. Kétféle folyamat játszódik le, amikor az elektron a céltárgyba ütközik. Az elektronok gyors lefékezésével a **folytonos** hullámhossz-tartományba eső **fékezési sugárzás** jön létre. (Eredeti német nevén, melyet az angolnyelvű irodalom is átvett: Bremsstrahlung.) Ennek jól meghatározott rövidhullámhosszú határa van λ_{\min} , amely a V csőfeszültségtől, tehát az elektronok K kinetikus energiájától függ. Az energiamegmaradás törvénye alapján:

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

$$Ve = hf_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}} \quad (44-31)$$



a) röntgenső



b) fém-céltárgy röntgenszínképe kétféle gyorsító feszültségnél

c) a spektrum egyes sorozatait arról a héjról nevezik el, amelyre az elektron a hiány betöltésére viszszaugrik

44-12 ábra

Röntgensugarak

Látható, hogy a λ_{\min} határhullámhossz nem függ az anód anyagától, csak a gyorsító feszültségtől.

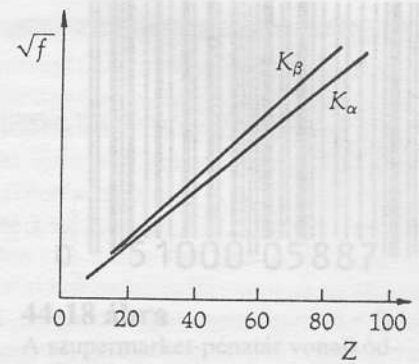
A **karakterisztikus vonalas spektrum** éles vonalak alakjában rakódik rá a folytonos sugárzásra. A vonalak akkor jönnek létre, amikor a beérkező elektronok energiája elég ahhoz, hogy egy belső héjról kilökjön egy elektront, és ezáltal elektronhiányt idézzen elő a K , L vagy más héjkon. Egy külső elektron ide ugorhat, és betöltheti a hiányt, miközben az energiakülönbség a kisugárzott foton energiájaként jelenik meg. Amikor az elektron a L -héjról kerül a K -héjra a K_{α} -vonal keletkezik, amikor az M -héjról a K -héjra, akkor a K_{β} és így tovább. Van tehát L -sorozat, M -sorozat, stb.; a sorozatok neve arra a héjra utal, amelyikre az elektron átugrik, és nem arra, ahonnan érkezik. A vonalak „karakterisztikusak”, tehát jellemzők a céltárgyat képező elemre. A K -elektronok közel vannak a maghoz, ezért nagyon érzékenyek a Z e magtöltésre. A magasabb héjak elektronjai kisebb magtöltést „éreznek” a belső héjak semlegesítő hatása miatt: a töltés egy része „ármélykolva” van.

1913-ban H. G. J. Moseley angol fizikus (1887-1915) vizsgálta a karakterisztikus röntgenspektrumot; különböző elemeket használva céltárgyként. A K_{α} -vonalak frekvenciájának f négyzetgyökét ábrázolta a Z rendszám függvényében, és érdekes módon egyenes vonalat kapott (44-13 ábra). (A rendszámot Moseley jellemzőbbnek tartotta az atomra, mint az atomsúlyt.) A *Moseley-diagramból* kiderült, hogy néhány elemet fel kell cserélni a szomszédjával, ha azt akarjuk, hogy rá essenek az egyenes vonalra. A magyarázat az, hogy a periódusos rendszert – még Moseley munkája előtt – az *atomsúlyok* alapján állították össze, így egyes elemek az őket alkotó izotópok különböző gyakorisága miatt (45.2 pont) az atomsúlyon alapuló sorrendben felcserélődtek példának hozható fel a nikkell, amely a táblázatban a kobalt elé került. A Moseley-diagramból vált világossá, hogy a kobalt rendszáma a kisebb, azaz az elemek elrendezéséhez a periódikus táblázatban a Z rendszám a mérvadó. A cserével néhány más eltérés is eltűnt, így a sorrend jobban megfelelt az ismert kémiai tulajdonságoknak. A táblázat hézagait új elemek felfedezésével sikerült betölteni, ez igazolta a K_{α} -vonalakból levont következtetéseket. Moseley egyszerű módszere alapján sikerült megállapítani az 57 – 71 rendszám között elhelyezkedő ritkaföldfémek helyét, illetve sorrendjét; ami a hasonló kémiai tulajdonságaik miatt addig nem sikerült.



44-14 ábra

Harry G. J. Moseley (1887-1915). Kitűntetéssel végezte el az oxfordi egyetemet, közvetlenül ezután Manchesterben, Rutherford laboratóriumában kezdett el dolgozni – ugyanabban az évben, amelyikben Bohr az atommodelljét megalkotta. Moseley munkája azért volt különösen értékes, mert ez volt az első kísérleti kapcsolat a kémikusok periódusos rendszere és a fizikusok új atommodellje között. Moseley találemény kísérletező volt, és rendkívül keményen dolgozott. Egy példa erre: amikor azt a problémát akarta megoldani, hogy mennyire nyelődnek el a röntgensugarak a vákuumcső falában, lyukat fűrt az üvegen keresztül, és



44-13 ábra

A Moseley-diagrammon a frekvencia négyzetgyökét, \sqrt{f} -et ábrázoljuk a Z rendszám függvényében; az ábrán a céltárgyelem K -sorozatának két vonalát tüntettük fel. Később Z helyett $(Z - 1)$ függvényében készítették el a diagrammot – ami szintén egyenes vonal [Lásd még a 44C-38 feladatot is.]

leltári nyilvántartásuk. Egyes üzletek naponta cserélik a készletek állását, ezért, hogy a piaci helyzetről tájékozódni tudjanak, így jöttek rá például, hogy a cukorkák fogyasztása hirtelen megnőtt, ha az arut a pénztár közelében helyezték el, vagy pedig amikor a taccs-chip arut leszállították, a babcsomag forgalma is nőtt. Követni lehet így az újsághirdetéseket, vagy az üzletben elhelyezett feliratok használatát is. A bemutatott vonalközlő az első

ökörbéltől készített hártával fedte be. A cső sokszor összetört, de mégis működött! Moseley Ausztráliába utazott, hogy ott a British Association for the Advancement of Science konferenciáján kutatásainak eredményeiről beszámoljon. Megérkezése napján, 1914-ben, üzent hadat Anglia Németországnak. Hazatérve, néhány héttel később, felajánlotta szolgálatait az angol kormányának. Dolgozhatott volna kutató laboratóriumban is, de ő inkább a műszaki csapatoknál vállalt aktív szolgálatot. Csodálatos karrierje derékbátort: 28 éves korában Gallipolinál elesett.

44-11 ábra

Egy atom ionizációs energiája az E_2 (elektronvillanó kífajeztu) legkisebb energiáig, amelyhez szükséges, hogy alapállapotban egy elektront az atomból eltávolítsunk. A más gazoknál látható csúcsok olyan atomokra vonatkoznak, amelyek elektronszerkezete teljes. A következő hozzáadott elektron energiája kisebb, mint az előzőé, mert az elektront eltávolítjuk az atomból.

44-15 ábra

He-Ne-gázlézer. A két végén a W-ablakok a Brewster-szög alatt dőlnek, azért, hogy a nemkívánatos polarizációjú sugarakat a lézeren kívülre verjék vissza.* A másik polarizációjú komponens majdnem teljesen (100%-ban) áthatol az ablakokon. (Abban az esetben, ha az ablakok a nyálábra merőlegesek lennének, a sugárzásnak igen nagy – mintegy 4%-a veszne el minden egyes reflexiókor.) Az M hororú tükrök mintegy százszor verik vissza a sugarakat mindkét irányban, miközben a jobb oldali tükr minden alkalommal egy kis hányadot ($\approx 1\%$ -ot) átenged; ebből lesz a kilépő nyáláb.

(*Ez nem jelenti azt, hogy a lézer elveszíti az energia felét. Egyszeri áthaladás után a csövön keresztül a Brewster-reflexió eltávolítja ezt a komponenszt, így erre nem fordítódik már energia a csőben.)

44.10 A lézer

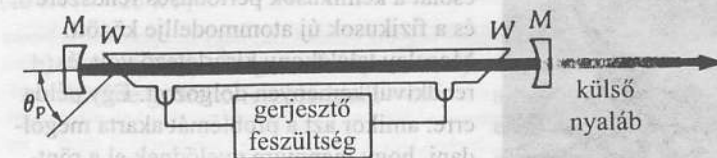
A lézer (laser) elnevezés a „Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation” (fény-erősítés a sugárzás gerjesztett emissziójával) angol kifejezés kezdőbetűiből keletkezett. Einstein már 1916-ban megsejtette ezt a hatást (és publikálta a rákövetkező évben). Vegyünk egy atomot, amely képes az E_2 gerjesztett állapotból az E_1 alacsonyabb állapotba átmenni, miközben $hf = (E_2 - E_1)$ energiájú fotont emittál. Tételezzük fel, hogy amikor az atom még a gerjesztett állapotban van, akkor elhalad mellette egy pontosan hf energiájú foton. Ez a foton indukálhatja, hogy az atom gerjesztettsége megszűnjön oly módon, hogy az éppen hf energiájú fotont bocsát ki. A leglényegesebb ebben a folyamatban, hogy most már két azonos energiájú fotonunk van, amely az eredeti fotonnal azonos irányba halad – azonos polarizációval. Láncreakció jöhet létre, melynek során a két foton újabb gerjesztett atomokat készít emisszióra. A fény koherens (38.2 pont), és igen nagy intenzitású.

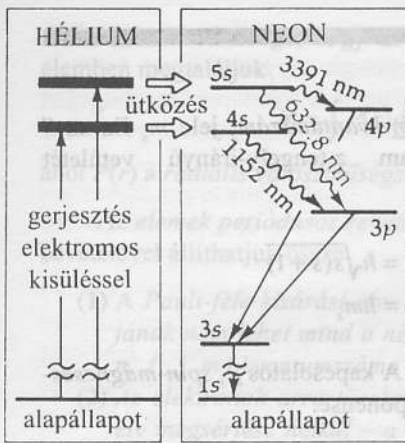
A jelenség kulcsa az, hogy több atom legyen E_2 állapotban, mint E_1 -ben. Az E_1 állapotú atom rezonancia folytán elnyeli a hf energiájú fotont és E_2 állapotba kerül. Így a foton eltűnik, ami nem kívánatos. Termikus egyensúlyban lévő atomok esetén az egyes energiaállapotokban található atomok N számát a Boltzmann-closzlásfüggvény határozza meg: $N = Ce^{-E/kT}$, ahol E az állapot energiája, k a Boltzmann-állandó és T az abszolút hőmérséklet (C állandó). Két állapothoz tartozó betöltési számok (populációk) aránya normális esetben:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-(E_2 - E_1)/kT} \quad (44-32)$$

A magasabb energiaállapotok populációja kisebb. Fel kell borítanunk a normális viszonyokat, populációinverziót kell létrehozunk, azért, hogy az indukált emisszióval bekövetkező fotonképződés gyakoribb legyen, mint a fotonok abszorpciója. A populáció inverziót csak akkor tudjuk fenntartani, ha az atomokat folytonosan „pumpáljuk” a gerjesztett állapotba; ez természetesen metastabil¹¹ állapot, amely elősegíti, hogy a fordított eloszlás hosszabb ideig fennmaradjon. A pumpálás többféleképpen történhet: intenzív villanófénnyel (pulzáló rubinlézer), elektromos kisüléssel (argonlézer), kémiai reakcióval (CO_2 -lézer), vagy atomi ütközésekkel (He-Ne-lézer). A 44-15 ábrán látható nagyon elterjedt hélium-neon-lézer a gázalakú elemek keverékét tartalmazza. A pumpálás a gázon keresztül történő elektromos kisüléssel valósul meg; a pumpálás magasabb szintre gerjeszti a héliumatomokat, ez a két szint viszont nagyon közel van a neon két gerjesztett metastabil állapotához (44-16 ábra). A gerjesztett héliumatomok rugalmatlanul ütköznek az alapállapotú neonatomokkal, és átadják ezeknek belső energiájukat. Most a neon kerül a metastabil $5s$ és $4s$ szintre – ez populációinverziót jelent az alacsonyabb $4p$

¹¹ Az atom gerjesztett állapotának átlagos élettartama durván 10^{-8} s. Bizonyos metastabil állapotok átlagosan $\approx 10^{-1}$ s-ig is megmaradnak bomlás nélkül, mert az alacsonyabb állapotba való átmenet „tiltott” (44.6. pont, 7. sz. lábjegyzet)

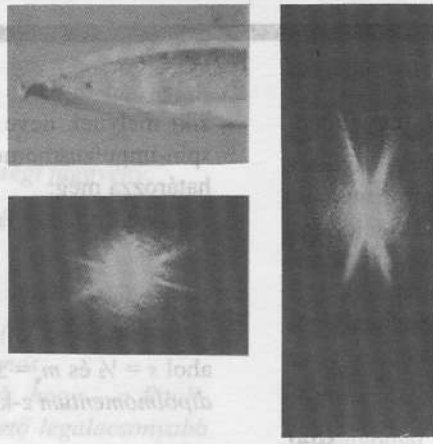




~~~~~ gerjesztett átmenet  
 ————— spontán átmenet

#### 44-16 ábra

A He-Ne-gázlézer fő energiaszintjei.



#### 44-17 ábra

A bal felső ábra egy injekciós tű erősen nagyított fényképe – a végén kis horog látszik. Lézerfényvel megvilágítva a tűhegy az alatta lévő diffrakciós képet adta. Egy hibátlan tű a jobb oldali diffrakciós mintát eredményezi – ez lehetővé teszi a gyártási folyamat közben a gyors, automatikus minőségellenőrzést.

és  $3p$  állapotokhoz viszonyítva. (Az  $5s \rightarrow 4s$  átmenet tiltott.) Az indukált emisszióval a fő átalakulás a két infravörös (1152 és 3391 nm) és a közismert vörös (632,8 nm) vonalat eredményezi. Két *felső* szint közötti indukált emisszió nagyon előnyös: a  $p$ -állapot azonnal átmegy  $3s$ -állapotba, és fennmarad a populációinverzió. Ha az alacsonyabb állapot alapállapot volna, akkor gyorsan betöltődne, mivel ennek legnagyobb a betöltöttsége. Ezen felül könnyen idézhetünk elő populációinverziót anélkül, hogy a nagy populációjú alapállapot félig-betöltöttségét kellene megőrizni.

A lézertechnika csodálatos fejlődésének vagyunk tanúi, és képtelenség lenne a teljesség igényével felsorolni a most használatos legintenzívebb, legkisebb méretű vagy az egészen különleges célokra alkalmazott lézerfajtákat. Lézerekkel tapogatták le a Holdat az árapály-jelenség tanulmányozásához, lézerekkel végeznek retina-ponthegeesztést, készítenek TV- és hi-fi-lemezeket; képesek bitek tízmilliárdjait tárolni (ez – egyenként egy Encyclopaedia Britannica-kötet méretű – 250 darab könyv tartalmának felel meg). Vezérelnek lézerekkel esztergagépet és rakétát, használják sebészeti kés helyett, és azonnal be is hegesztik vele a vágott sebet; készítenek hologramot, kis deutérium-trícium-gömb felrobbantásával fúziós reakciót indítanak el, megváltoztatják a géneket, száloptika segítségével egyszerre többszáz telefon és TV-összeköttetést létesítenek, és még rengeteg más, különféle célra tudják hasznosítani a lézereket.



#### 44-18 ábra

A szupermarket-pénztár vonalkód-leolvasóján He-Ne-lézer keskeny nyalábja tapogatja le az árucikket azonosító UPC (Universal Product Code = általános árucód) mintáját. Fotocella azonosítja a világos és sötét vonalak reflexióját, és az információt számítógépbe továbbítja. Amennyiben a szám megtalálható a kép memóriájában, a leolvasó sípoló jelet ad, kinyomtatja az árura vonatkozó információt, az árat, majd a tételt bevezeti az üzlet leltári nyilvántartásába. Egyes üzletek naponta elemzik a készletek állását, azért, hogy a piaci helyzetről tájékoztatást kapjanak. Így jöttek rá például, hogy a cukorkák fogyasztása hirtelen megnőtt, ha az árut a pénztár közelében helyezték el, vagy pedig amikor a taco-chip árat leszállították, a bab-szósز forgalma is nőtt. Követni lehet így az újsághírdetések, vagy az üzletben elhelyezett feliratok hatásosságát is. A bemutatott vonalkódon az első zérus élelmiszerüzletet jelöl, a következő öt vonal jelenti a gyártó céget (Campbell soup Co.) az után következő öt az áru specifikációját: (10 3/4 oz. tömegű, mérsékelt sótartalmú paradicsomleves-sűrítmény). Az utolsó számjegy adja a súlyt vagy térfogatot.

## Összefoglalás

Az időtől független Schrödinger-egyenlet (egydimenziós) alakja:

$$\left[ -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \Psi = E\Psi, \quad (\text{S1})$$

ahol  $E$  a hidrogénatom teljes energiája,  $U$  pedig a Coulomb-erőtől származó potenciális energia:

$$U = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{e^2}{r} \quad (\text{S2})$$

A gömbszimmetria miatt kényelmesebb a háromdimenziós hullámeqyenletet az  $r$ ,  $\theta$ ,  $\phi$  gömbi polárkoordinátákkal felírni. Az a követelmény, hogy a megoldás egyértékű legyen, és  $r \rightarrow \infty$  esetén zérushoz tartson, csak olyan megoldásokat „enged meg”, amelyekre az  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$  és  $m_s$  négy kvantumszám jellemző.

Az  $n$  főkvantumszám az  $E_n$  teljes energiával kapcsolatos:

### A HIDROGÉN- ATOM MEGEN- GEDETT ENERGIÁI:

$$E_n = -\left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}\right) \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

A mellék (orbitális) kvantumszám,  $\ell$ , az elektron mag körüli pályájára vonatkoztatott  $L$  impulzusmomentumához tartozik:

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

A mágneses kvantumszám,  $m_\ell$  az impulzusmomentum  $z$ -tengely menti vetületét határozza meg:

$$L_z = \hbar m_\ell$$

Az impulzusmomentumhoz, illetve annak  $z$ -vetületéhez  $\mu$  mágneses dipólmomentum tartozik:

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

és  $\mu_z = -\left(\frac{e}{2m}\right) L_z = -\left(\frac{e\hbar}{2m}\right) m_\ell$

Az  $e\hbar/2m$  állandó neve Bohr-magneton; értéke:

$$\text{BOHR-MAGNETON:} \quad \left(\frac{e\hbar}{2m}\right) = 9,27 \times 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$$

Az elektron viselkedése hasonlít egy, a saját tengelye körül forgó testéhez – ehhez újabb kvantumszám tarto-

zik; melynek neve spin-kvantumszám, jele  $m_s$ . Ez az  $S$  spin-impulzusmomentum  $z$ -tengely-irányú vetületét határozza meg:

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

$$S_z = \hbar m_s$$

ahol  $s = 1/2$  és  $m_s = \pm 1/2$ . A kapcsolatos  $\mu_x$  spin-mágneses dipólmomentum  $z$ -komponense:

$$(\mu_x)_z = m_s \left(\frac{e\hbar}{m}\right)$$

Az atomi elektron kvantumállapota tehát az  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$  és  $m_s$  kvantumszám-negyessel adható meg:

|                                             |                        |
|---------------------------------------------|------------------------|
| $n = 1, 2, 3, \dots$                        | főkvantumszám,         |
| $\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$              | orbitális kvantumszám, |
| $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ | mágneses kvantumszám,  |
| $m_s = \pm 1/2$                             | spinquantumszám.       |

A pályamenti mozgáshoz és a spinhez kapcsolódó mágneses dipólusmomentum kölcsönhatásából ered a spin-pálya vagy más nével L-S-csatolás. Ez a csatolás kissé módosítja az energianívókat; így áll elő a hidrogénszínkép finomszerkezete. További következménye ennek az, hogy az elektron állapotának leírásához egy másik, az előzővel egyenértékű kvantumszám-negyest is használhatunk:

|                                   |                                        |
|-----------------------------------|----------------------------------------|
| $n = 1, 2, 3, \dots$              | főkvantumszám,                         |
| $\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$    | orbitális kvantumszám,                 |
| $j = \pm 1/2$                     | belső-kvantumszám,                     |
| $m_j = \pm j, \pm(j-1), \pm(j-2)$ | $j$ -hez tartozó mágneses kvantumszám. |

A 44-3 táblázat (1044. oldal) a hidrogénatom néhány hullámfüggvényét sorolja fel, amelyeket a

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

összefüggéssel normalunk; radiális  $\psi(r)$  függvényre  $dV = 4\pi r^2 dr$

A  $P$  valószínűsűrsűrűségi függvény:

$$P = |\psi|^2$$

Annak a  $\mathcal{P}$  valószínűsége, hogy az elektront a  $dV$  térfogatelemben találjuk:

$$\mathcal{P} = \int P dV$$



Annak a valószínűsége, hogy az elektront a  $dr$  radiális elemben megtaláljuk

$$\mathcal{P} = \int P(r) dr$$

ahol  $P(r)$  a radiális valószínűsűrűségi függvény.

Az elemek periódusos rendszerét két elv figyelembevételével állíthatjuk össze:

- (1) A Pauli-féle kizárási elv: egy atom két elektronjának nem lehet mind a négy ( $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$ ,  $m_s$ , vagy  $n$ ,  $\ell$ ,  $j$ ,  $m_j$ ) kvantumszáma azonos:
- (2) Az elektronok arra törekednek, hogy – a Pauli-elv megsértése nélkül – a lehető legalacsonyabb energiaszinteket foglalják el.

**Spektroszkópiai jelölés.** Ezt a  $4d_{5/2}$  példán mutatjuk be.

A betű előtt álló szám az  $n$  főkvantumszámnak, az index  $j$ -nek felel meg, maga a betű pedig  $\ell$  értékének a következő kulcs szerint:  $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$  és  $5$ ; megfelelnek az  $s, p, d, f, g$  és  $h$  betűknek.

Még egy példa:  $1s^2 2s^2 2p^1$  alapállapotú konfigurációt jelöl, ahol a felső index adott  $n$ ,  $\ell$  állapothoz tartozó elektronok számát jelenti.

**Röntgensugarak.** Amikor nagyenergiájú elektronok céltárgyba ütköznek, az atom belső héjain elektron-

hiányt idéznek elő. Ha a hiányt külső elektronok töltik be, akkor röntgensugárzás keletkezik. Az *éles vonalából álló karakterisztikus spektrum* jelölésére az első szintnek megfelelő betűt használják, ahová az átmenet történik, így jön létre a  $K$ -sorozat,  $L$ -sorozat, stb. A *folytonos* vagy *fékezési sugárzás* a becsapódó elektronok lefékeződése következtében áll elő, és a *rövidhullámhosszú* oldalon éles határa van. Az ennek megfelelő  $\lambda_{\min}$  hullámhossz akkor emittálódik, amikor az elektron  $K$  kinetikus energiája teljes egészében egy foton  $hf_{\max} = hc/\lambda_{\min}$  energiájává alakul át. Moseley bizonyította be, hogy az atom röntgenszínképe az elemre jellemző „ujjlenyomat”. Amikor a  $\sqrt{f_{K\alpha}}$  mennyiséget a  $[Z - 1]$  (és nem az atomsúly) függvényében ábrázolta, egyenes vonalat kapott; ez a *Moseley-diagram*.

A *lézerekben* egy gerjesztett metastabil állapotból alacsonyabb állapotba történő indukált átmenettel nagyintenzitású, koherens fénynyalábot lehet előállítani. „Pumpálással” idézik elő a két állapot *inverz* populációját, így érik el, hogy az indukált átmenet a gerjesztett magasabb állapotból az alacsonyabb állapotba gyakoribb lesz, mint az alacsonyabb állapot fotonabszorpciója.

## Kérdések

1. Miért feltétlenül  $[L]^{-3/2}$  dimenziójú a három dimenzióban elhelyezkedő rendszert leíró  $\psi$  hullámfüggvény?
2. Mi annak az oka, hogy az atom hullámmechanikai modellje alapján az elektron helye és sebessége bizonytalan, míg az impulzusmomentum értéke pontosan megadható?
3. Miért független  $\phi$ -től a 44-3 táblázatban felsorolt hullámfüggvények mindegyikére  $|\psi|^2$  vagy  $(\psi\psi^*)$  értéke?
4. Minek tekinthető a hullámmechanikai modell alapján a hidrogén-atom elektronja: ponttöltésnek, töltött gömbnek vagy a mag körüli elkent töltésnek, esetleg másnak?
5. Vizsgáljuk meg Bohr feltételezéseit, amelyek alapján a hidrogén-atom modelljét levezette. Ezek közül melyek egyeztethetők össze a klasszikus elmélettel, és melyek nem?
6. Egy dolgozatban a következő (hibás) megállapítást találtuk: a nátrium konfigurációja alapállapotban  $1s^2 2s^2 2p^6 2d^1$ . Miért hibás ez?
7. Mi történne, ha a 44-2 ábrán látható Stern-Gerlach-kísérletben (semleges atomok helyett) egyszerűen ionizált ezüstatomokkal végeznénk a kísérletet? Ez a kísérlet megmutatja, hogyan áll be az elektronok mágneses momentuma a térben a mágneses térerősség hatására; miért nem elektronnyalábbal végezték a kísérletet (semleges ezüstatomok helyett)? Miért kell inhomogén mágneses tér és nem homogén?
8. Gondoljunk a Schrödinger-egyenletre; mit jelent a „megengedett megoldás” kifejezés?
9. Fogalmazzuk meg, miben áll a különbség a hidrogénatomnak a Schrödinger-elméletből, illetve a Bohr-elméletből kialakított képe között?
10. Az elektron spin-impulzusmomentumának és a mágneses momentumának vektorirányítása miért ellentétes?
11. A háromdimenziós térben egy vektor leírásához három paraméter – például három derékszögű komponens – megadása szükséges. Hogyan lehetséges, hogy a hidrogénatomban az elektron impulzusmomentum-vektorának leírásához két kvantumszám is elég?
12. Adjuk meg a következő fogalmak definícióját, és határozzuk meg, hogy mi a különbség közöttük: (a) *hullámfüggvény*, (b) *valószínűsűrűség-függvény*, (c) *radiális valószínűsűrűség-függvény*.
13. Magyarázzuk meg, hogy miért nehezebb eltávolítani egy elektront az argonatómból ( $Z = 18$ ), mint a káliumatomból ( $Z = 19$ ) annak ellenére, hogy az utóbbinak több pozitív töltése van?
14. Miért szükségeszerű, hogy alapállapotban a héliumatom két elektronjának a spinje ellentétes legyen?
15. 5 eV szükséges ahhoz, hogy a káliumatomból egy elektront eltávolítsunk. Vajon egy második elektron eltávolításához több, kevesebb vagy kb. ugyanannyi energia kell?
16. Az első öt alkálifém-atom közül a lítiumnak a legnagyobb az ionizációs energiája (5,39 eV). Az osz-



lopban lefelé haladva ez az érték folyamatosan csökken; a legkisebb a céziumé (3,89 eV). A két atom közül melyik reakcióképesebb kémiailag és miért? Az atomszerkezet ismeretében magyarázzuk meg a monoton csökkenést a Z-érték növekedésével.

## Feladatok

### 44.3 Elektronspin és finomszerkezet

#### 44.4 Spin-pálya-csatolás

**44A-1** Az  $m_l$  mágneses kvantumszám hatását tanulmányozhatjuk, ha az atomot mágneses térbe helyezzük (energianívók Zeeman-felhasadása). Hány nívóra válik szét az  $\ell = 3$  állapot? Vázlatosan ábrázoljuk a  $\mu$  mágneses momentum orientációit a mágneses térerősség  $+z$  tengellyel párhuzamos irányához képest.

**44B-2** A kvantummechanika törvényei minden testre – kicsinyre és nagyra – vonatkoznak. Határozzuk meg a Földnek a Nap körüli pályájára vonatkoztatott kvantumszámát. Mekkora a (joule-ban kifejezett) energiaváltozás, ha a Föld áttér egy szomszédos megengedett állapotba?

**44B-3** Mágneses térben az elektron  $\mu_s$  mágneses momentuma a ( $z$ -tengellyel párhuzamos) térirányhoz képest „paralel” vagy „antiparalel” állást foglalhat el. A valóságban a térirány és  $\mu_s$  által bezárt  $\theta$  szög véges (nem  $0^\circ$ ), azért mert a vektort a  $z$ -irányra kell vetíteni. Határozzuk meg a két  $\theta$ -értéket.

**44B-4** A következő állandók gyakran szerepelnek az elméleti atomfizikában:

$$\text{Bohr-rádiusz: } a_0 \equiv \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}$$

$$\text{Compton-hullámhossz: } \lambda_c \equiv \frac{h}{m_e c}$$

$$\text{Klasszikus elektronsugár: } r_e \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e c^2}$$

$$\text{Finomszerkezeti állandó: } \alpha \equiv \frac{e^2}{2\varepsilon_0 hc}$$

Számítsuk ki SI-rendszerbeli egységekben ezek numerikus értékét.

**44B-5** A hidrogénatomban az elektron teljes  $\mathbf{J}$  impulzusmomentumának értékei  $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ . A  $\mathbf{J}$ -nek a  $z$ -tengely irányába eső vetülete  $J_z = m_j \hbar$  értékű lehet. Határozzuk meg  $\mathbf{J}$  és a  $+z$ -tengely által bezárt szög megengedett értékeit  $J = (5/2)$ -re.

**44B-6** A hidrogén elektronjának  $\mathbf{L}$  pályaimpulzusmomentuma  $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ .  $\mathbf{L}$   $z$ -irányú lehetséges ve-

17. A röntgenspektrumban az  $L$ -sorozatnak vagy a  $K$ -sorozatnak a hullámhossza nagyobb?

18. Egyes kvantummechanikai vektorok megengedett térbeli orientációját *térbeli kvantálásnak* nevezzük. Mit kvantálunk ebben az esetben?

tületei  $L_z = m_l \hbar$ . Határozzuk meg  $\mathbf{L}$  és a  $+z$ -tengely megengedett szögeinek nagyságát  $\ell = 2$ -re.

### 44.5 A hidrogénatom kvantumállapotai

#### 44.6 A hidrogén energiaszint-diagramja

#### 44.7 A hidrogénatom hullámfüggvényei

**44B-7** Soroljuk fel a 44-2 példában vázolt módon  $n = 4$ -re a hidrogénatom összes kvantumállapotát.

**44A-8** A hidrogénatom  $\ell = 3$  állapotaiban melyek  $n$ ,  $m_l$  és  $m_s$  lehetséges értékei?

**44B-9** A csillagközi térben az atomos hidrogén éles spektrumvonala, az ún. **21 cm-es sugárzás** keletkezik; a csillagászok ezt tartják legalkalmasabbnak a csillagok közötti hidrogénfelhők detektálására. A csillagközi por elmosódottá teszi a látható tartományba eső hullámhosszakat, ezért az előbb említett sugárzás, amely a rádióhullámok tartományába esik, nagyon hasznos. Az elektronállapotok közötti energiaátmenetet, melytől ez a sugárzás ered, nem lehet egy meghatározott  $n$ -nel jellemezni. Az a helyzet, hogy az  $n = 1$  alapállapotban az elektron és a proton spinje *paralel* vagy *antiparalel* lehet; a két állapot energiája kissé különböző. a) Mi a feltétele a magasabb energiájú állapotnak? b) A pontos hullámhosszérték 21,11 cm. Mi a két állapot energia-különbsége? c) A gerjesztett állapot átlagos élettartama  $10^7$  év. Számítsuk ki a gerjesztett állapot energiájának bizonytalanságát.

**44B-10** A hidrogén alapállapotára – a (44-26) egyenletben alkalmazott közelítés felhasználásával – becsüljük meg annak valószínűségét, hogy az elektron a magtól  $(1 \pm 0,01) a$  távolságtartományban található. Az  $a$  a Bohr-rádiusz ( $n = 1$ ).

**44B-11** A hidrogén alapállapotára – a (44-28) egyenletben alkalmazott közelítés felhasználásával – becsüljük meg a két valószínűség hányadosát, ha (1) az elektron a  $\Delta r = (1 \pm 0,01) a$  távolságra, és (2)  $\Delta r = (4 \pm 0,01) a$  távolságra található a magtól, ahol  $a$  a Bohr-rádiusz ( $n = 1$ ).

### 44.8 A Pauli-féle kizárási elv és az elemek periódusos rendszere

**44A-12** Azonosítsuk a következő elemeket elektronkonfigurációjuk alapján:  $1s^2 2s^2 2p^1$  és  $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^6$ .

**44B-13** A 44-4. táblázat segítségével írjuk fel annak az elemnek alapállapotú konfigurációját, amelynek „utolsó” elektronja  $4p^2$  állapotú. Melyik ez az elem?

**44B-14** Egy atom  $M$ -héja betöltött, és nincsenek további elektronjai. (a) Azonosítsuk az atomot. (b) Hány elektron van az egyes alhéjakban?

**44B-15** Bizonyítsuk be, hogy az  $n$ -edik héjhoz tartozó kvantumállapotok száma  $n^2$ .

**44B-16** Az atomok mérete nagyjából azonos. (a) Bizonyításul becsüljük meg az alumíniumatom átmérőjét, amelynek molttömege  $27 \text{ g/mol}$  és sűrűsége  $2,70 \text{ g/cm}^3$  és az uránatomét, melynek molttömege  $238 \text{ g/mol}$ , sűrűsége  $18,9 \text{ g/cm}^3$ . (b) Mit fejez ki ez az eredmény a belső héjak elektronjai hullámfüggvényeivel kapcsolatban, ha a sorban egyre nagyobb atomtömegű atomok felé haladunk? (Vigyázzunk: a moltérfogat durván  $D^3 N_A$ -val arányos, ahol  $D$  az atomátmérő és  $N_A$  az Avogadro-féle szám.)

#### 44.9 Röntgensugarak

##### 44.10 A lézer

**44A-17** Az ezüst  $K_\alpha$ -vonalának hullámhossza  $56,3 \text{ pm}$ . Mekkora az a minimális gyorsító feszültség, amelynél – ezüst anódot alkalmazva – ez a vonal éppen megjelenik a spektrumban?

**44A-18** Számítsuk ki a  $45 \text{ kV}$ -on üzemelő röntgenszőrő fékező sugárzásának rövidhullámhosszú határát.

**44B-19** Egy, a Bohr-modell szerint elképzelt, meglehetősen nagy rendszámú atomban hidrogénszerű pályán  $K$ -héjhoz tartozó elektron mozog a  $Ze$  magtöltés, és az elektronoktól eredő  $(-e)$  elektrontöltéstől származó Coulomb-erő hatására. Alkalmazzuk erre az esetre a 43. fejezetben található (43-12) egyenletet, és vezessük le a következő összefüggést a  $K_\alpha$ -röntgenvonal  $f$  frekvenciája és a  $Z$  atomszám között (Moseley-törvény). (A belső elektronok árnyékoló hatását nem vesszük figyelembe):

$$\sqrt{f} = \left[ \frac{e^2}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{3m}{32h^3}} \right] Z$$

**44B-20** A röntgensövet, mellyel a 44-12b ábra grafikonját kaptuk,  $15,5 \text{ kV}$  feszültségen járattuk. Rajzoljuk fel szabadkézzel a röntgenspektrumot, és húzzuk meg a  $\lambda_{\min}$  határt.

**44B-21** Tipikus foton halad He-Ne-lézer tengelye mentén – az indukált emisszió erősítési tényezője  $\sim 0,7\%$ /méterenként. Átlagosan hány foton keletkezik, ha az eredeti foton a cső  $1 \text{ m}$ -es hosszán  $200$ -szor halad végig?

**44B-22** Nagyteljesítményű impulzusütemű lézer  $4 \text{ ns}$  idő alatt  $30 \text{ kJ}$  energiát ad le. (a) Mekkora egy impulzusban a teljesítmény? (b) Milyen nagy az egy impulzus alatt megtett út fizikai hossza? (c) Milyen nagy az abszorbeáló céltárgy által felvett teljes energia?

**44B-23** Impulzusütemű rubinlézer  $694,4 \text{ nm}$ -es fényt bocsát ki. Az impulzus tartama  $14 \text{ ps}$ , energiája  $3 \text{ J}$ . Számítsuk ki (a) az impulzus térbeli fizikai hosszát, (b) az impulzus fotonjainak számát. (c) A körkeresztmetszetű nyaláb átmérője  $0,6 \text{ cm}$ ; hány foton van a nyaláb egy köbmilliméterében?

**44B-24** Szemsebészetben alkalmazott Nd:YAG-lézer  $1 \text{ ns}$ -os,  $3 \text{ mJ}$  energiájú impulzusokkal működik – a fényt a retinán  $30 \mu\text{m}$  átmérőjű folttra koncentrálnak. (a) Számítsuk ki (SI-egységben) a retina egységnyi felületére jutó teljesítményt. [Ennek a mennyiségnek a neve (spektrális) besugárzásintenzitás.] (b) Mennyi energia esik egy molekuláris méretű, kb.  $0,6 \text{ nm}$  átmérőjű folttra?

#### Vegyes feladatok

**44C-25** A Stern-Gerlach-kísérletben  $M$  tömegű,  $\mu$  mágneses momentumú ezüstatomok nyalábja  $v$  legvalószínűbb sebességgel tesz meg  $x$  távolságot  $dB/dz$  gradiensű mágneses térben. A mágneses teret elhagyva a nyaláb két részének távolsága  $d$ . Az adatok felhasználásával vezessük le összefüggést  $d$ -re. Gondoljunk arra, hogy a kvantummechanika szerint a  $\mu$  vektor a tér irányával  $\theta$  szöget zár be (lásd a 44B-3 feladatot).

**44C-26** Klasszikusan gondolkozva, tekintsük az elektront állandó  $m_c$  tömegű,  $r_c$  sugarú, tengelye körül forgó gömbnek (l. a 44B-4 feladatot). Tudjuk, hogy a spinimpulzus-nyomaték  $s_z = \frac{1}{2} \hbar$ . Ennek alapján számítsuk ki az egyenlítőn egy pont sebességét.

**44C-27** Egy elképzelt egyelektronos atom  $160 \text{ nm}$ ,  $120 \text{ nm}$ ,  $100 \text{ nm}$  és  $90 \text{ nm}$  hosszúságú sugárzást bocsát ki; a sorozathatár  $80 \text{ nm}$ . (a) Annak a feltételezésnek az alapján, hogy a sugárzás a legalacsonyabb energiájú ( $n = 1$ ) állapotba történő átmenetből származik, számítsuk ki az atom három legalacsonyabb szintjének az energiáját. (b) Bizonyítsuk be, hogy az energiaszintek nem írhatók le az  $E_n = E_1/n^2$  összefüggéssel. (c) Számítsuk ki az  $n = 3$  állapotból az  $n = 2$  állapotba történő átmenetnek megfelelő sugárzás hullámhosszát.

**44C-28** Egy elektron a (klasszikus) Bohr-féle legkisebb sugarú körpályán kering. A proton az origóban nyugalomban van; a körpálya az  $xy$ -síkban fekszik. A mozgás olyan irányú, hogy az elektron impulzusmomentuma  $-z$  irányú. Az elektronhoz rögzített koordináta-rendszerben a proton mozog körpályán az elektron körül. Számítsuk ki a proton körmozgásából az elektron helyén keletkező mágneses tér  $\mathbf{B}$  nagyságát és irányát. (b) Mikor lesz az  $U = -\mu_s \mathbf{B}$  mágneses potenciális energia pozitív (feltételezve, hogy  $U \equiv 0$  a  $90^\circ$ -os helyzetre),  $j = \ell + \frac{1}{2}$  vagy  $j = \ell - \frac{1}{2}$  esetben? (Útmutatás: gondoljunk arra, hogy a spin-mágnesesmomentum iránya hogyan áll az impulzusmomentum irányához képest. Vegyük figyelembe, hogy az elektron töltése negatív.) (c) Számítsuk ki (elektronvoltban) a két közeli dublettállapot energia-különbségét.



**44C-29** Egy elem alapállapotú konfigurációja  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ . (a) Melyik ez az elem? (b) Megadjuk ennek az elemnek néhány gerjesztett állapotú konfigurációját; állapítsuk meg, a 7. sz. lábjegyzetben előírt kiválasztási szabályok betartásával, melyikből lehetséges direkt átmenet az alapállapotba:  $[ ] 3p^6 4p^1$ ,  $[ ] 3p^5 4s^2$ ,  $[ ] 3p^6 4d^1$  és  $[ ] 3p^5 4p^2$ ?

**44C-30**  $0,3 \text{ T}$  erősségű mágneses térbe helyezett alapállapotú hidrogénatomra (a) számítsuk ki (elektronvontban) a tér és az elektronspin  $E = -\mu \cdot \mathbf{B}$  mágneses kölcsönhatási energiáját. (b) Milyen nagy a spinmágneses momentum paralel és antiparalel állása közötti energiakülönbség? (c) Számítsuk ki annak a beérkező fotonnak a hullámhosszát, amely „rezonancia”-átmenetet indukál a paralel állásból antiparalel állásba (l. a 44B-3 feladatot).

**44C-31** Legyen a hidrogén gerjesztett állapotban. (a) Mutassuk ki, hogy a  $3p \rightarrow 2s$  átmenetnél két nagyon közeli vonalból álló fimonszerkezet áll elő. (b) Hány vonalból áll a finomszerkezet a  $4d \rightarrow 3p$  átmenet esetén? Adjuk meg a két szint közötti összes tiltott átmenetet. (Nézzük meg előbb a 44-4 ábrát és a 7. sz. lábjegyzetben közölt kiválasztási szabályokat.)

**44C-32** A hidrogénben az elektronnak a magtól számított átlagos vagy közepes távolsága  $r_{\text{atl}} = \int_0^\infty r P(r) dr$ .

Számítsuk ki a hidrogén alapállapotára, az  $n = 1$ -hez tartozó Bohr-rádiusszal kifejezett  $r_{\text{atl}}$  értékét. (Figyelmesen tanulmányozzuk ehhez a G-III. függelék 1. egyenletét.)

**44C-33** Bizonyítsuk be, hogy a 44-3 táblázatban közölt,  $n = 2$ ,  $\ell = 0$  és  $m_\ell = 0$  állapothoz tartozó hullámfüggvény normált, azaz  $\int |\Psi|^2 dV = 1$ , ahol  $dV = 4\pi r^2 dr$ .

**44C-34** Alapállapotú hidrogénre,  $r = a$  esetében számítsuk ki (a)  $\psi$ , (b)  $|\psi|^2$  és (c)  $P(r)$  értékét. Mi ezeknek a fizikai tartalma?

**44C-35** Alapállapotú hidrogén hullámfüggvénye független a  $\theta$  polárszögtől és a  $\phi$  azimutszögtől. Behelyettesítéssel mutassuk meg, hogy a 44-3 táblázatban az  $1s$  alapállapot hullámfüggvénye kielégíti a (44-4) Schrödinger-egyenletet.

**44-36** Mi a valószínűsége annak, hogy az  $1s$ -állapotú hidrogén elektronját a magtól  $2,50 a$ -nál nagyobb távolságra találjuk meg?

**44C-37** A hidrogén  $2p$  állapotát a 44-3 táblázatban található  $\Psi_{2,1,0}$ ,  $\Psi_{2,1,+1}$ ,  $\Psi_{2,1,-1}$  függvény írja le. Mindhárom

függvényhez tartozó energiaállapot azonos. Tételezzük fel, hogy az elektron az idő egyharmadában írható le mindegyik hullámfüggvénnyel. Az energiaállapot  $P$  valószínűsége ekkor:

$$|\Psi_{2,1}|^2 = \frac{1}{3} |\Psi_{2,1,0}|^2 + \frac{1}{3} |\Psi_{2,1,+1}|^2 + \frac{1}{3} |\Psi_{2,1,-1}|^2$$

(a) Számítsuk ki  $|\Psi_{2,1}|^2$ -et; vegyük figyelembe, hogy az eredmény a gömbszimmetria miatt független  $\theta$ -tól és  $\phi$ -tól. (b) Határozzuk meg a  $P(r)$  radiális valószínűsűrűségi függvényt. (c) Számítsuk ki a  $2p$  állapotban a legvalószínűbb radiális távolságot, felhasználva a  $dP(r)/dr = 0$  feltételt. Az eredményt  $a$ -val, az  $n = 1$  állapothoz tartozó Bohr-rádiusszal fejezzük ki.

**44C-38** Helyesnek fogadva el a Bohr-féle atommodell, bizonyítsuk be, hogy a Moseley-diagram egyenes akkor is, ha nem vesszük figyelembe az árnyékoló hatást: ha  $\sqrt{f}$ -et akár  $Z$ , akár  $(Z - 1)$  vagy  $(Z - k)$  függvényében rajzoljuk fel, akkor minden esetben egyenes vonalat kapunk ( $k = \text{állandó}$ ).

**44C-39** (a) Határozzuk meg a („pumpálás nélküli”) normális populációarányt a neon két gerjesztett állapotára ( $N_{3s}/N_{4s}$ ), melyektől a He-Ne-lézer  $632,8 \text{ nm}$ -es vörös fénye származik. A lézerben a gáz hőmérséklete  $27^\circ\text{C}$ . (b) A fénykibocsátáshoz populációinverzióra van szükség, tehát arra, hogy  $N_2 N_1 > \frac{1}{2}$  legyen. Milyen hőmérsékleten lesz az (egyensúlyi állapotban lévő) gázra  $N_2 N_1 > \frac{1}{2}$ ?

**44C-40** Folyamatos üzemű nagyteljesítményű  $\text{CO}_2$ -lézer  $10,6 \mu\text{m}$  hullámhosszú fénye  $200 \text{ kW}$  teljesítményű (ez néhány másodperc alatt át tud lyukasztani egy kb.  $2,5 \text{ cm}$  vastagságú acéllemezt). (a) Határozzuk meg a keresztmetszet egy négyzetmilliméterre jutó teljesítményt, ha a nyaláb átmérője  $4 \text{ mm}$ . Bocsássuk át a nyalábot  $6 \text{ cm}$  fókusz távolságú ideális lencsén. A 39-12 ábrán látható a képsíkban létrejövő gyűrűs diffrakciós kép, amelynek központi foltjában koncentrálnodik az energia  $84\%$ -a. Számítsuk ki (b) a központi folt átmérőjét és (c) ennek egy négyzetmilliméterre jutó átlagos teljesítményt.

**44C-41** A populációinverziót néha szokás *negatív abszolút hőmérsékletű* állapotoknak is nevezni. (a) Fejtsük ki, hogy mit jelent ez a kifejezés. (b) Mennyi lesz az ekvivalens negatív hőmérséklet kelvinben a  $N_2/N_1 = 1,09$  arányú inverz populációra  $514,5 \text{ nm}$ -es fényt sugárzó argon-lézer esetében.



- 42A-21 128 MeV  
 42B-23 A válasz adott.  
 42B-25 A válasz adott.  
 42C-27 A válasz adott.  
 42C-29 A válasz adott.  
 42C-31 38,3 m  
 42C-33 A válasz adott.  
 42C-35 A válasz adott.  
 42C-37 b)  $2,27 \times 10^{-13} \text{ J/m}^3$   
 42C-39 A válasz adott.  
 42C-41 288 keV  
 42C-43 A válasz adott.  
 42C-45 A válasz adott.  
 42C-47 A válasz adott.  
 42C-49 A válasz adott.

**XLIII. Fejezet**

- 43A-1 A válasz adott.  
 43B-3 A válasz adott.  
 43B-5 A válasz adott.  
 43B-7 A válasz adott.  
 43A-9  $1/9,12 \times 10^4$   
 43A-11 0,173 nm  
 43A-13 10,2 fm  
 43A-15  $\frac{1}{4}$   
 43B-17 a) 0,158 nm b)  $47,2^\circ$   
 43B-19 5,71 V  
 43B-21 A válasz adott.  
 43B-23  $1,03 \times 10^{-3}$   
 43B-25 956 pm  
 43B-27 a)  $5,86 \times 10^{-30} \text{ m}$  b) 5,79 cm  
 43B-29 A válasz adott.  
 43C-31 a)  $r_n = (4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2) n^2$   
 b)  $E_n = -(6,80 \text{ eV})/n^2$  c) 243 nm, 182 nm  
 43C-33 A válasz adott.  
 43C-35 A válasz adott.  
 43C-37 A válasz adott.

**XLIV. Fejezet**

- 44A-1 7  
 44B-3  $54,7^\circ$  és  $125,3^\circ$   
 44B-5  $32,3^\circ, 59,5^\circ, 80,3^\circ, 99,7^\circ, 120,5^\circ, 147,7^\circ$   
 44B-7 32 állapot  
 44B-9 b)  $9,42 \times 10^{-25} \text{ J}$  c)  $3,34 \times 10^{-49} \text{ J}$

- 44B-11 25,2  
 44B-13 Ge;  $[\text{Zn}]3d^{10}4s^24p^2$

- 44B-15 A válasz adott.  
 44A-17 22,0 kV  
 44B-19 A válasz adott.  
 44B-21 3,04 foton  
 44B-23 a) 4,20 mm b)  $4,53 \times 10^{33}$   
 c)  $3,81 \times 10^{31}$   
 44C-25  $d = (\mu \cos\theta)(dB/dz)(x/v)^2(1/M)$   
 44C-27 a)  $E_1 = -15,5 \text{ eV}, E_2 = -7,75 \text{ eV}, E_3 = -5,16 \text{ eV}$   
 c) 479 nm  
 44C-29 a) Kálium b)  $[ ]3p^64p^1, [ ]3p^54p^2$   
 44C-31 b)  $3; 4d_{5/2} - 3p_{1/2}$   
 44C-33 A válasz adott.  
 44C-35 A válasz adott.  
 44C-37 a)  $(1/96\pi a^5)r^2 e^{-r/a}$   
 b)  $(1/24a^5)r^4 e^{-r/a}; 4a$   
 44C-39 a)  $1,18 \times 10^{-33}$  b) 32 800 K  
 44C-41 b) -325 000 K

**XLV. Fejezet**

- 45A-1 13,7  
 45A-3 5,68  
 45A-7 27,9 perc  
 45B-9 1 curie  
 45B-11  $1,78t_0$   
 45B-13 0,565 cm  
 45B-15  $1,71 \times 10^{14} (!)$   
 45B-17 A válasz adott.  
 45B-19 1,37 MeV  
 45B-21 A válasz adott.  
 45A-23 38,8 keV  
 45B-25 a) 0,144 MeV b) 0,288 MeV  
 45C-27 3785 év  
 45C-29 a) 86 s;  $8,1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$   
 45C-31 A válasz adott.  
 45C-33 1,61 W  
 45C-35 A válasz adott.  
 45C-37 A válasz adott.  
 45C-39 a) 0,931 MeV, 5,49 MeV, és 12,86 MeV  
 b) 24,7 MeV c) 27,7 MeV  
 45C-41 A válasz adott.  
 45C-43 0,247 GeV mindkét részecske esetén  
 45C-45 7,8 cm