

# Rotátor

Adott ponttól (origó) fix távolságban szabadon mozgó tömegpont. A mozgás az  $r$  sugarú gömbfelületen történik, és csak mozgási energia van:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta\psi = E\psi$$

Mivel  $r$  állandó, érdemes gömbi polár koordinátákat használni. Laplace-operátor:

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

Csak a szögek szerinti deriváltak adnak nullától különböző értékeket:

$$\frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} \right) + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\psi = 0$$

Beszorozva  $r^2$ -el, és beírva a  $\Theta = m_0 r^2$  tehetetlenségi nyomatékot (forgó mozgás):

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{2\Theta}{\hbar^2} E\psi = 0$$

A szögek szerinti függés két külön függvény szorzataként írható:  $\psi(\theta, \phi) = F(\theta)G(\phi)$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial\theta^2} G + \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial F}{\partial\theta} G + \frac{1}{\sin^2\theta} F \frac{\partial^2 G}{\partial\phi^2} + \frac{2\Theta}{\hbar^2} EFG = 0 \quad \frac{\partial F}{\partial\theta} = F' \quad \frac{\partial G}{\partial\phi} = G'$$

# Rotátor energia sajátértékei

Beszorozva  $\sin^2\theta/FG$ -vel, és rövidítve jelölve a  $\theta, \phi$  változók szerinti deriváltakat:

$$\frac{F''}{F} \sin^2\theta + \cos\theta \sin\theta \frac{F'}{F} + \frac{2\Theta}{\hbar^2} E \sin^2\theta + \frac{G''}{G} = 0 \quad \frac{\partial F}{\partial \theta} = F' \quad \frac{\partial G}{\partial \phi} = G'$$

Az egyenlet utolsó tagja csak  $\phi$ -től függ, a többi része pedig csak  $\theta$ -tól. Az egyenlet csak akkor teljesül bármilyen szög értékekre, ha a két rész egyenként állandó:

$$\frac{G''}{G} = -m^2 \quad \text{ahonnan} \quad G'' + m^2 G = 0$$

A megoldás alakja:  $G = e^{im\phi}$

A szöget  $2\pi$ -vel megnövelve ugyanabba a pontba jutunk, így a függvény értéke ugyanaz kell legyen:  $e^{im(\phi+2\pi)} = e^{im\phi} e^{im2\pi} = e^{im\phi} \rightarrow e^{im2\pi} = 1 \rightarrow m: \text{ egész szám}$

Az  $F$ -re felírt egyenletet is megoldva és összevonva a gömbfüggvényeket kapjuk:

$$\psi_{lm} = N_{lm} \sin^{|m|}\theta P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}$$

Az energia sajátértékekre pedig:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2\Theta} l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$$

Ezek a diszkrét energiaszintek eredményezik a kétatomos molekulák rotációs színképét.

Példa:

Ha a sósav-molekulában a H és Cl atomok közötti átlagos távolság  $1,3 \cdot 10^{-10}$  m, akkor milyen hullámhosszú fotont bocsát ki az első gerjesztett forgási állapotból az alapállapotba átmenő molekula?

A H-atom egy proton, tömege  $1,67 \cdot 10^{-27}$  kg, a Cl-atom tömege pedig  $5,81 \cdot 10^{-26}$  kg.

# Pálya impulzusmomentum

Ahogy a haladó mozgás kinetikus energiája kifejezhető a lendülettel (impulzus), a forgó mozgás kinetikus energiája kifejezhető a perdülettel (impulzusmomentum):

$$T = \frac{p^2}{2m_0} \quad \rightarrow \quad T = \frac{L^2}{2\Theta}$$

Ezért az  $L^2$  operátor sajátfüggvényei szintén a gömbfüggvények lesznek, a sajátértékek pedig a rotátor energia sajátértékei  $2\Theta$ -val szorozva:

$$L^2\psi = \lambda\psi \quad \rightarrow \quad \lambda = \hbar^2 l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

A perdület nagysága tehát:  $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$  Bohr-modell szerint volt:  $|\vec{L}| = n\hbar$

A perdület  $z$ -komponensére:  $L_z\psi = \lambda\psi \quad \rightarrow \quad -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = \lambda\psi \quad \rightarrow \quad \frac{\partial\psi}{\partial\phi} = i\frac{\lambda}{\hbar}\psi$

Ennek megoldása:  $\psi_m = A_m e^{im\phi}$  ahol  $m = \frac{\lambda}{\hbar}$  egész szám.

A perdület  $z$ -komponensének lehetséges értékei tehát:  $\lambda = m\hbar$

ahol  $m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$

# Íránykvantálás

Láttuk tehát, hogy a perdületvektor hossza és annak z-komponense (vagy egyéb komponensei) is kvantált:

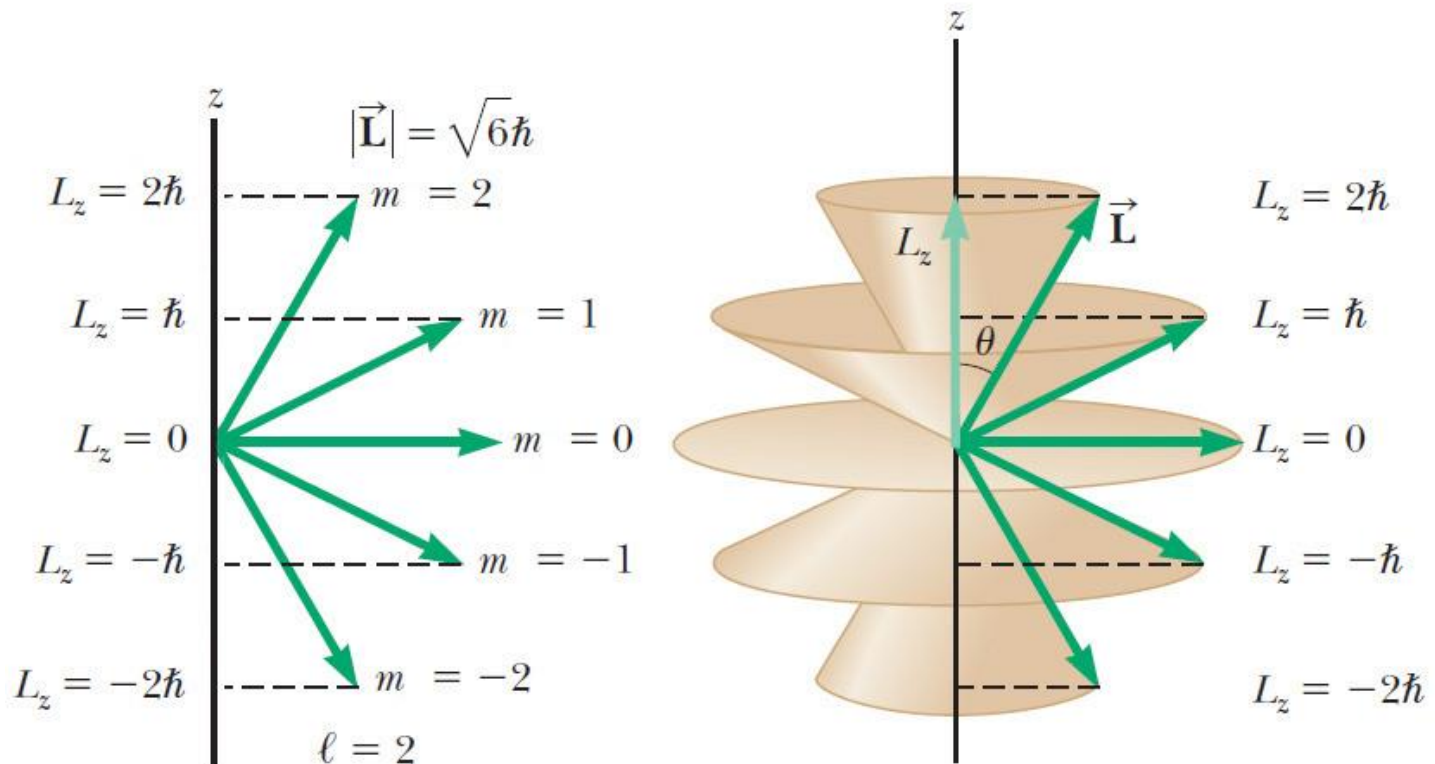
$$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

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

$$\lambda = m\hbar$$

$$m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$$

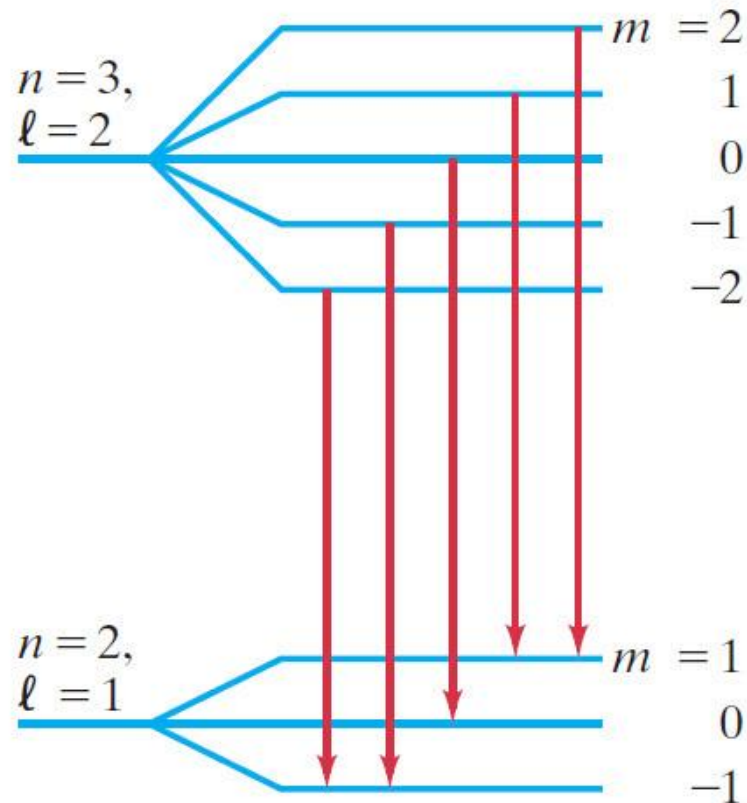
Ez azt jelenti, hogy a perdületvektor iránya ( $\theta$  szög) sem lehet tetszőleges.



# Zeeman-effektus

Kísérlet: Mágneses térben a spektrum vonalai felhasadnak egymáshoz közel lévő vonalakra. Ez azt jelenti, hogy az atomi energiaszintek felhasadnak mágneses térben.

Ilyenkor az atomban az elektron energiája már nem csak az  $n$  főkvantumszámtól, hanem az  $m$  mágneses kvantumszámtól is függ. Innen az elnevezés.



Példa:

Határozza meg a hidrogén atomban az elektron pálya impulzusmomentumának lehetséges értékeit, és annak  $z$  irányú vetületeit, ha  $n = 4$ !

# Spin

Az elektron a pálya impulzusmomentum mellett rendelkezik saját impulzusmomentummal is. Ezt nevezik spinnek.

Kísérlet: Felfedezték, hogy a hidrogén spektrális vonalai még mágneses tér hiányában is valójában egymáshoz közel lévő két vagy több vonalból állnak. A különbséget az elektron saját perdületével (spin) és a spin-pálya kölcsönhatással magyarázták (**finomszerkezet**).

A spin kvantumszámot a Schrödinger-egyenlet nem adja meg, annak létezését Dirac későbbi módosítása magyarázta meg relativisztikus effektusként.

A spin nagysága:

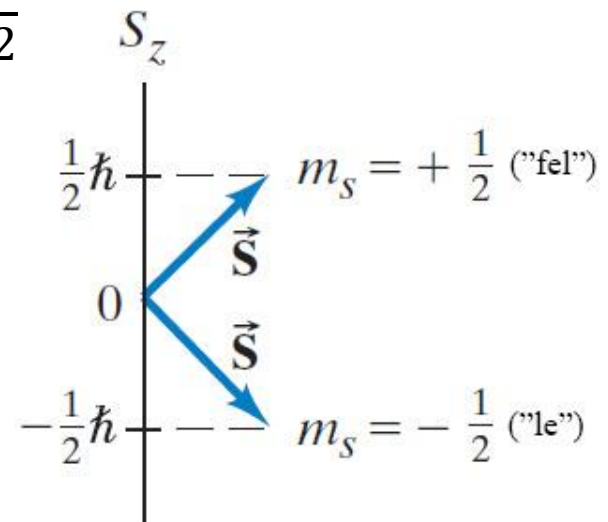
$$|\vec{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad \text{tehát } s = \frac{1}{2}$$

A spin  $z$  irányú vetülete pedig mindig kétféle érték lehet:  $-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}$

$$S_z = m_s \hbar$$

Tehát az  $m_s$  spinkvantumszám:

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





# Kiválasztási szabály

Mivel a kibocsátott/elnyelt foton spinje  $\hbar$  értékű (**bozon**, vagyis egész spinű részecske), csak olyan átmenetek engedélyezettek, amelyeknél  $\Delta l = \pm 1$  és  $\Delta m = 0, \pm 1$ .

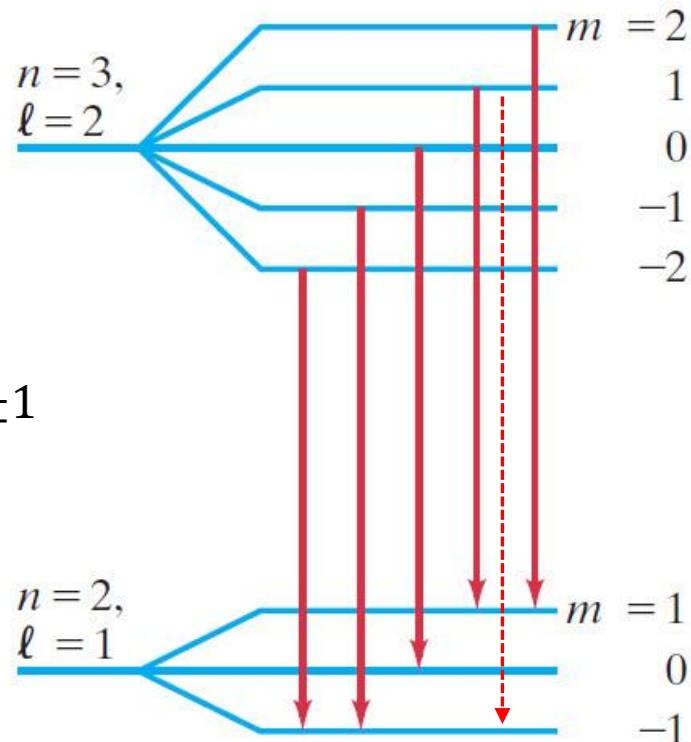
Az elektron a **fermionok** közé tartozik: feles spinű részecske.

A megengedett átmenetek sokkal nagyobb valószínűségűek a tiltott átmenetekhez képest, de azoknak sem nulla a valószínűsége.

Emiatt a megengedett átmenetek spektrális vonalai sokkal fényesebbek.

**perdületmegmaradási törvény**

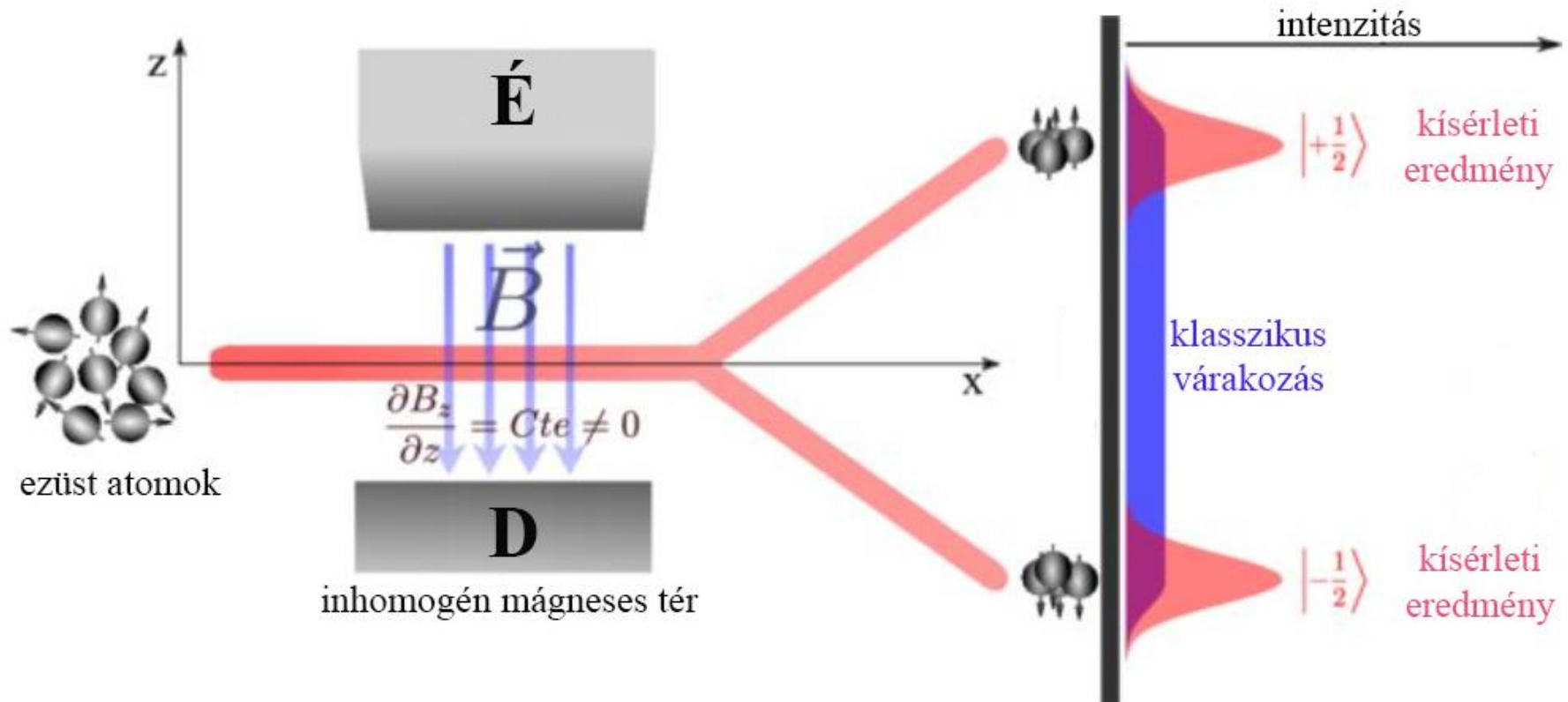
$$\Delta l = \pm 1 \text{ és } \Delta m = 0, \pm 1$$



# Stern-Gerlach kísérlet

Az inhomogén  $z$  irányú mágneses térben a random orientációjú ezüst atomokat eltérítve klasszikusan folytonos eloszlást vártak az ernyőn.

Eredmény: mindössze két fényes folt (1922)



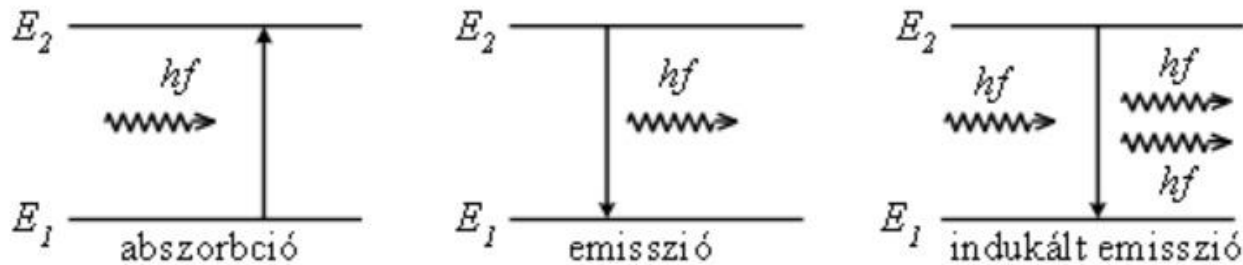
# Atomok gerjesztett állapota - Indukált emisszió

A megfelelő energiájú foton elnyelésével az atom gerjesztett állapotba kerül, az adott elektron magasabb energiájú pályára ugrik át. Ez az **abszorpció** folyamata.

A gerjesztett állapot élettartama kb.  $10^{-8}$  s, de vannak metastabil állapotok is, ahol kb.  $10^{-3}$  s.

Ezután **spontán emisszió** révén az elektron alacsonyabb energiájú állapotba ugrik át egy megfelelő energiájú foton kibocsátása mellett:  $E_2 - E_1 = hf$

Einstein 1916-ban megjósolt egy harmadik típusú folyamatot, az **indukált emissziót**.



## Indukált emisszió:

Az indukált emisszió esetében a legerjesztődés és az emisszió nem spontán történik, hanem azt a gerjesztett atom mellett elhaladó ugyanolyan energiájú foton váltja ki (**indukálja**).

Az emittált foton ugyanabban az irányban halad, mint az indukáló foton, frekvenciája, fázisa és polarizációs síkje is ugyanaz, tehát a két foton **koherens**.

# Lézer működése

**LASER: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation**  
(fényerősítés indukált emisszióval)

Az indukált emisszió segítségével lehetővé válik a fény erősítése.

Működés: Energia bepumpálással eléri, hogy több elektron legyen a gerjesztett, mint az alacsony energiaszinten (**populáció inverzió**). Ekkor több indukált emisszió lesz, mint abszorpció, tehát a fény erősödik.

Tulajdonságok: monokromatikusság (azonos frekvencia), kismértékű divergencia, nagyfokú koherencia, nagy felületi teljesítménysűrűség (lencsével fokozható), nagy spektrális teljesítménysűrűség (mivel csak egy frekvencia van).

Lézerek alkalmazásai:

- megmunkálás, fúrás, ponthegesztés,
- műtéti beavatkozás, szemsebészet
- gén sebészet,
- vonalkód leolvasás,
- Cd lemezjátszó lézer olvasófej,
- interferencián alapuló hosszúság, és sebességmérés,
- iránykitűzés,
- holográfia

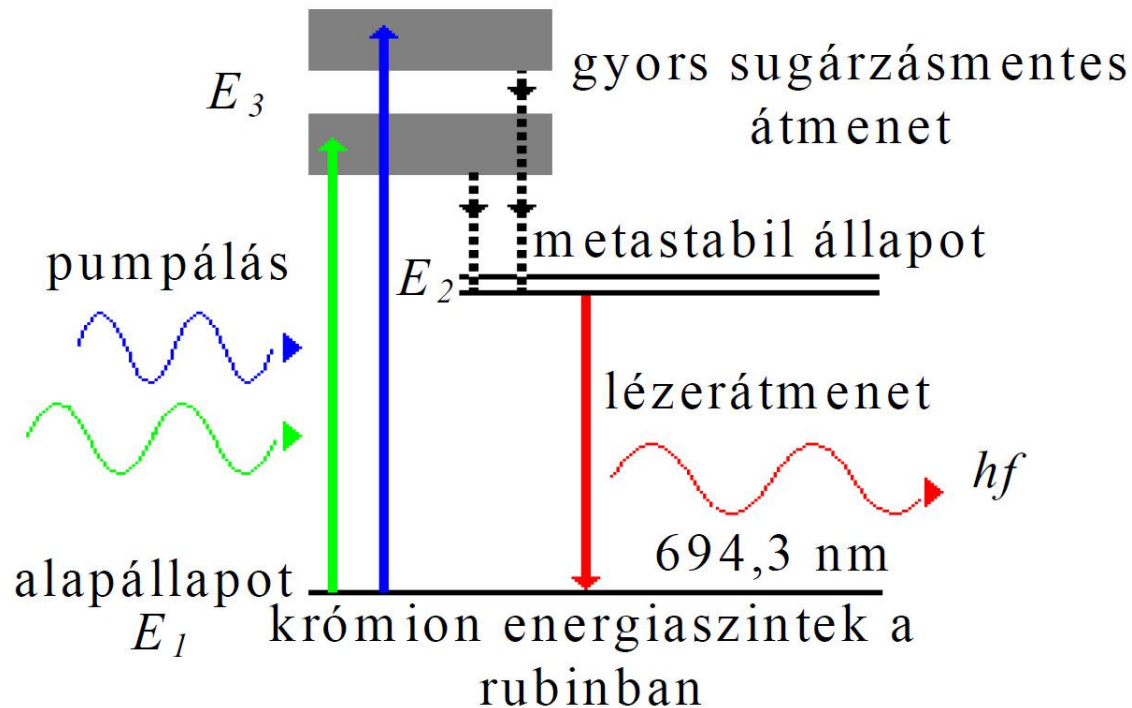


# Rubinlézer (szilárdtest lézer)

Lézeranyag: 0,05 %  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ -dal szennyezett  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -ból mesterségesen növesztett egykristályból csiszolt henger.

Működés: az  $E_3$  nívót nagyintenzitású fényimpulzussal gerjesztik.

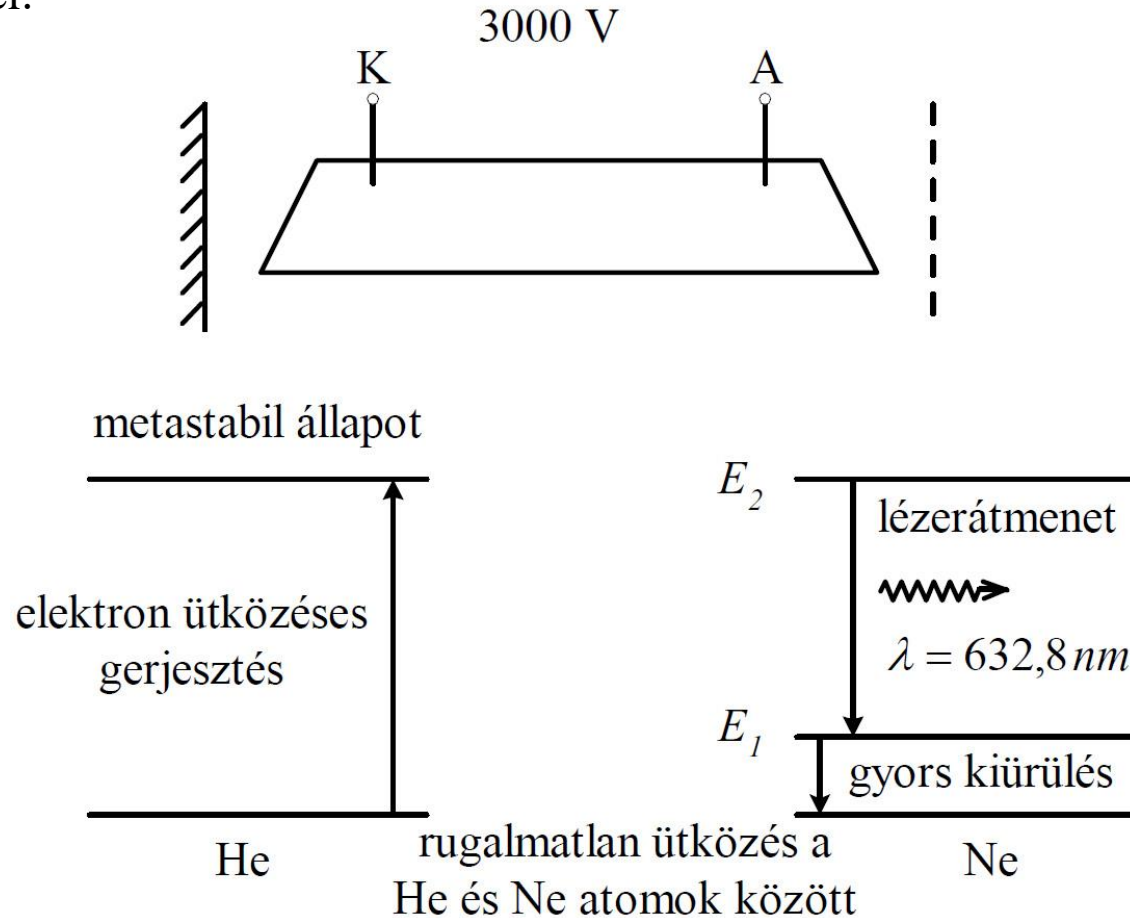
Innen ún. sugárzásmentes átmenet vezet az  $E_2$  nívóra  $10^{-7}$  s alatt. Mivel az  $E_2$  egy metastabil nívó és élettartama  $\sim 10^{-3}$  s, így létrejön a populáció inverzió. Az  $E_2$  és  $E_1$  közötti lézerátmenet során  $\lambda = 694,3$  nm-es sugárzás jelenik meg. A rubinlézer impulzusüzemű lézer.



# Hélium-neon gázlézer

Lézeranyag: 1 mbar nyomású He-Ne gázkeverék, amiben a gázok aránya: He : Ne = 9 : 1.

Működés: a He atomokat 3000 V feszültséggel felgyorsított elektronok gerjesztik. A He és Ne atomok közötti rugalmatlan ütközés ún. másodfajú gerjesztést okoz:  $\text{He}^* + \text{Ne} \rightarrow \text{He} + \text{Ne}^*$   
Az  $E_2$  és  $E_1$  energiaszintek között folyamatos populáció inverzió valósul meg, ezért ez egy folytonos üzemű lézer.



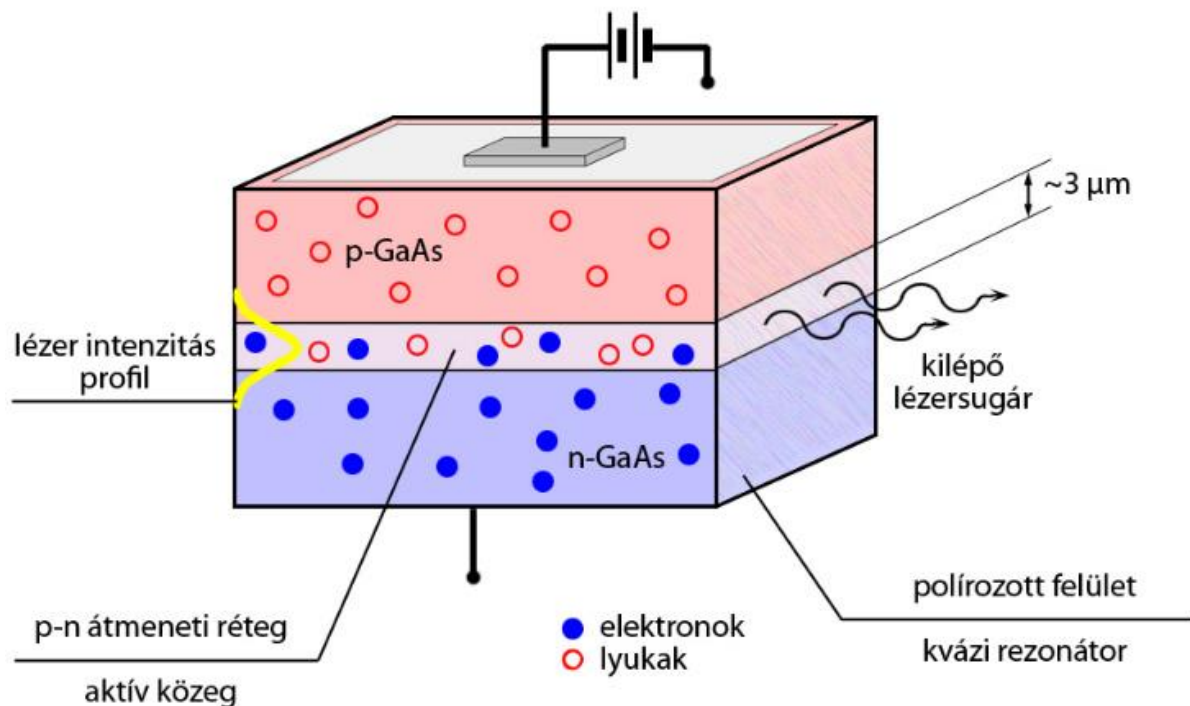
# Félvezető lézer

## Félvezető lézer:

Egy félvezető  $p$ - $n$  átmenete is felhasználható lézersugárzás előállítására.

Ez szintén folytonos üzemmódú lézer.

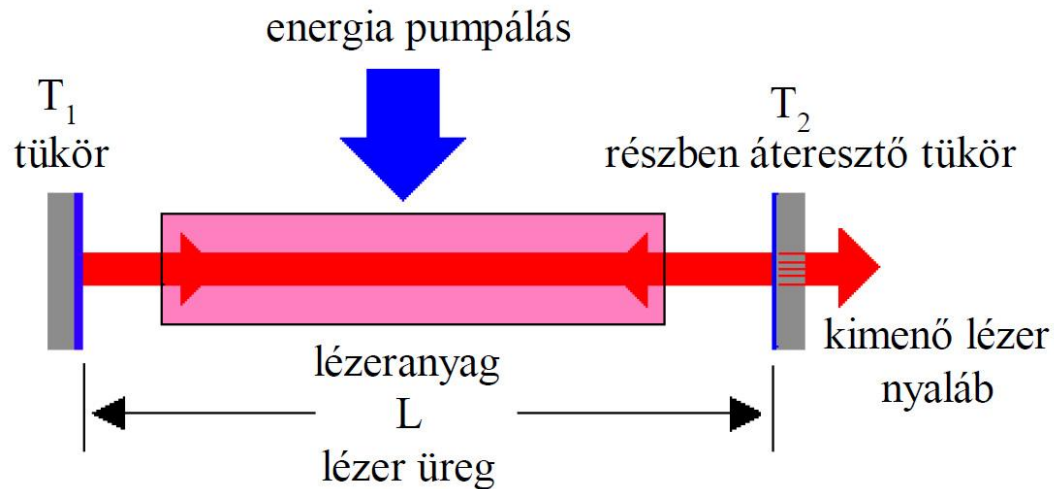
Előnye a kis méret, hátránya a nagy nyaláb divergencia.



# Tükörrezonátor

A lézerekben az intenzitás növelésére és a nyalábminőség javítására ún. tükörrezonátort alkalmaznak. A  $T_1$  és  $T_2$  tükröket olyan távolságra helyezik el egymástól, hogy állóhullám alakuljon ki:

$$L = n \frac{\lambda}{2}$$



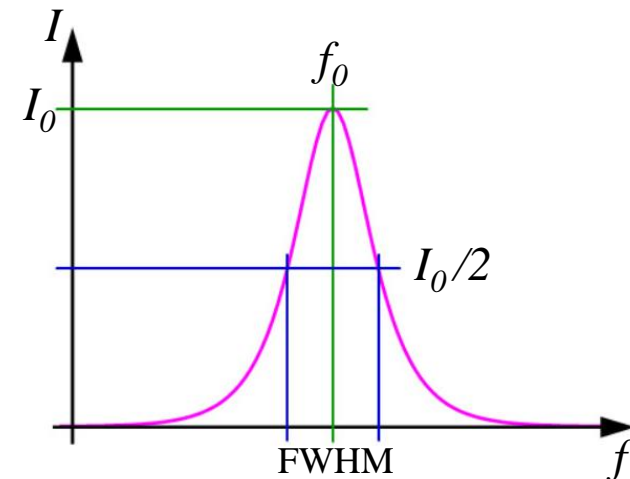
A lézerfény egy tengelyirányban kibocsátott, és spontán emisszióból származó fotonnal indul.

Ez sokszorozódik fel a tükörrezonátorban az indukált emisszió révén.

A rossz irányban haladó fotonok kiszóródnak a lézernyalábbból.

A tükörrezonátor miatt  $\text{FWHM} \approx 10^3$  Hz félértékszélesség.

(Ez kisebb, mint a természetes vonalszélesség).





## Házi feladat 9:

1. Bizonyítsa be a perdület  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  definíciója alapján (a koordináták és lendület komponensek operátorait alkalmazva), hogy a perdület  $z$ -komponensének operátora gömbi polár koordinátákkal felírható a használt alakban:

$$L_z \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi}$$

2. Határozza meg a hidrogén atomban az elektron pálya impulzusmomentumának lehető legnagyobb értékét, és annak  $z$  irányú vetületeit, ha  $n = 6$ !
3. Egy 3mW teljesítményű He-Ne lézer 632nm hullámhosszú fénysugarat bocsát ki, amelynek átmérője 1mm. Mekkora a fotonok sűrűsége a nyalámban?