

A mikrorészecskék kettős természete, de Broglie-hipotézis.....	1
Hullámcsomag	2
Kétréses kísérlet	3
A Heisenberg-féle határozatlansági reláció	4
A kvantummechanika alapjai.....	9
A kvantummechanika alapelvei (alapaxiómái).....	9
Az operátorok konkrét alakja és a Schrödinger-egyenlet	12
Stacionárius állapotok és az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet	14
A Schrödinger-egyenlet megoldása konkrét rendszerekre.....	15
Szabad részecske 1 dimenzióban:	15
Végtelen mély potenciálgödör	17
Potenciállépcső egy dimenzióban	18
Alagúteffektus.....	19
Az impulzusmomentum	22
A pályaimpulzusmomentum	22
A spin	25
A mágneses momentum	26
Az egyelektronos atom kvantummechanikai modellje	28
Az iránykvantáltság bizonyítékai	29
Kvantumstatisztikák.....	31
Azonos részecskék:	31
A klasszikus-, a Bose-Einstein- és a Fermi-Dirac statisztika.....	32
A többelektronos atomok	37
A periódusos rendszer.....	39
A lézer (utolsó ZH anyagának egy kis része)	41
Indukált emisszió	41
A lézer működése.....	42

A mikrorészecskék kettős természete, de Broglie-hipotézis

Az elektromágneses sugárzásnál számos esetben jelentkezett a kísérletek értelmezésénél a részecske-hullám kettősség, vagyis hogy a fény hullámként és részecskék áramaként is viselkedhet. **De Broglie** 1924-ben vetette fel azt, hogy a **közönséges anyagi részecskéknek is ilyen kettős természetet kellene tulajdonítani**, vagyis pl. az elektron, proton, stb. hullámként is felfoghatók. Feltételezte, hogy a fotonokra levezetett lendület (I) hullámhossz (λ) kapcsolat általános érvényű, azaz a részecskékhez rendelhető hullám hullámhossza:

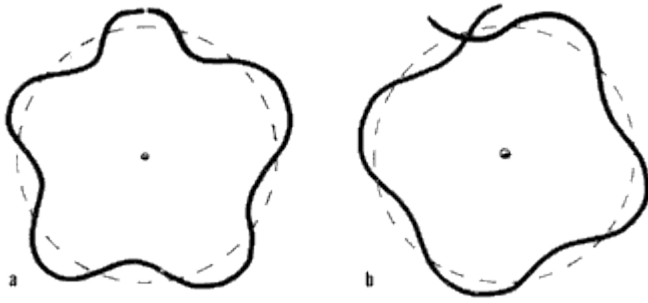
$$\boxed{\lambda = \frac{h}{I}} \text{ vagy } \lambda = \frac{h}{p}$$

ahol $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ a Planck állandó. A képlet tehát minden részecskére érvényes, függetlenül attól, hogy van-e nyugalmi tömege (pl. elektron), vagy nincs (foton).

A képlet első alkalmazásaként tekintsük a hidrogén atomot, amely egy proton körül keringő elektron. Stacionáris esetben az elektron egy állóhullámnak felel meg, tehát a pálya hossza (a kör kerülete) egész számú többszöröse a hullámhossznak:

$$n\lambda = 2\pi r$$

Ezt láthatjuk a bal oldali a ábrán. A jobb oldali b ábrán ez nem teljesül, a hullám nem önmagába záródik, ez nem lehet stacionárius állapot. Megjegyezzük, hogy az $n\lambda = 2\pi r$ feltétel teljesül klasszikus rendszerekre is, pl. megütött acélkarikán kialakuló állóhullámokra.



A fenti $\lambda = \frac{h}{I} = \frac{h}{mv}$ képletet behelyettesítve: $\frac{nh}{mv} = 2\pi r$, átrendezve kapjuk a Bohr-féle feltételt az impulzusmomentumra: $L = mvr = n\hbar$. Tehát a de Broglie-hipotézis megmagyarázta a Bohr-féle kvantumfeltételt.

A sors fintoraként kiderült, hogy a Bohr-féle feltétel nem igaz, így a de Broglie féle levezetése sem lehet helyes. Az alapötlet és a hullámhosszra vonatkozó $\lambda = \frac{h}{p}$ képlet viszont igaz és ez egy nagy – talán a legfontosabb – lépés volt a kvantummechanikához vezető úton.

Példa: Ha egy elektront U potenciálkülönbségen felgyorsítunk, akkor v sebességre tesz szert:

$eU = \frac{1}{2} m v^2$, $v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$, ennek megfelelően a lendülete $I = mv = m\sqrt{\frac{2eU}{m}} = \sqrt{2eUm}$, a de Broglie hullámhossza pedig:

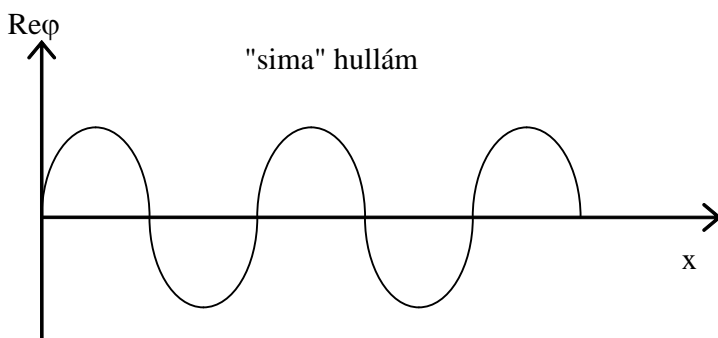
$$\lambda = \frac{h}{I} = \frac{h}{\sqrt{2eUm}}$$

Az univerzális állandókat felhasználva, ha például az elektront gyorsító feszültség $U = 150$ V, akkor a hozzá rendelhető hullámhossz $\lambda = 10^{-10}$ m.

A kísérletek szerint is az elektron mozgásakor kiterjedt hullámként viselkedik, egy tárgyba történő becsapódáskor pedig részecskéként, tehát **kettős természetet** mutat. Protonokkal és más mikrorészecskékkel is kimutattak **interferencia** jelenségeket. A hullám-részecske kettősség nemcsak az elektromágneses sugárzás esetén, hanem a mikrorészecskékénél is kimutatható.

Hullámcsomag

Nem egyetlen síkhullámot rendelünk a részecskéhez, hanem hullámcsomagot.

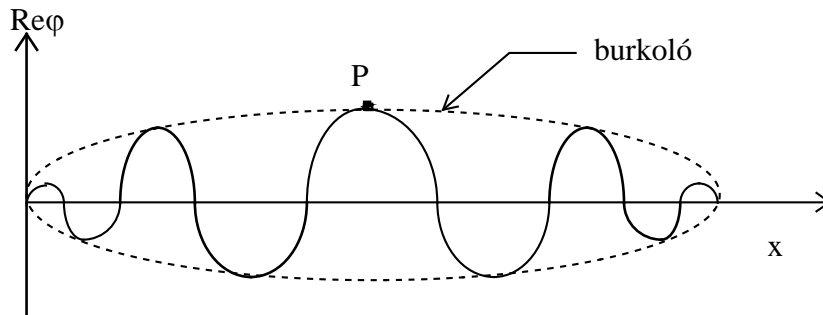


$$\varphi = Ae^{i(\omega t - kx)}$$

A hullámtanból ismert, hogy két igen közeli frekvenciájú hullám összetevése lebegést eredményez. Végtelen sok szinuszhullámból véges hosszúságú hullámvonulat (véges számú lebegés) is felépíthető.

$$\varphi = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{i(\omega(k)t - kx)} dk = C e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}$$

ahol a második tényező egy átlagos frekvenciájú és hullámhosszú sima hullám



sok sima hullám integrálása esetén ilyen görbealakot kapunk

$$C = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{i[(\omega(k) - \omega_0)t - (k - k_0)x]} dk \Leftarrow \text{burkoló}$$

Vizsgáljuk meg a burkoló egy pontjának (P pont) sebességét!

P-re nézve: $(\omega(k) - \omega_0)t - (k - k_0)x = \text{állandó}$

$$x = \frac{\omega_k - \omega_0}{k - k_0} t - \frac{\text{állandó}}{k - k_0} \quad v_p = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega(k) - \omega_0}{k - k_0} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\frac{dE}{\hbar}}{\frac{dP}{\hbar}} = \frac{dE}{dP} = v$$

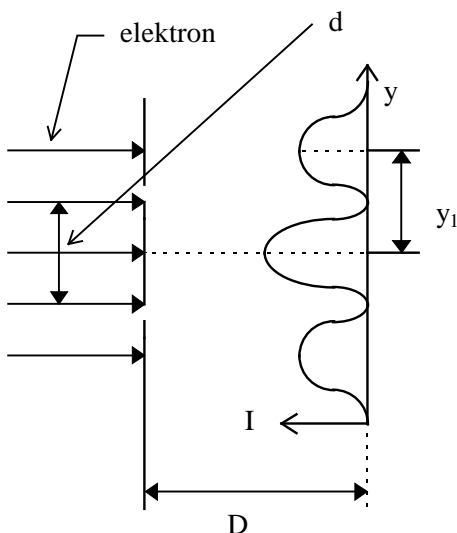
mert: $v = \frac{E}{h} \quad \omega = 2\pi v = \frac{E}{\hbar} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} p = \frac{p}{\hbar}$

A klasszikus fizika szerint: $E = \frac{p^2}{2m}$

$$\frac{dE}{dp} = \frac{2p}{2m} = v$$

Kétréses kísérlet

(fényre: Young 1801, elektronra: Jöhnson 1961). Kísérleti bizonyíték az elektron hullámtermészetére

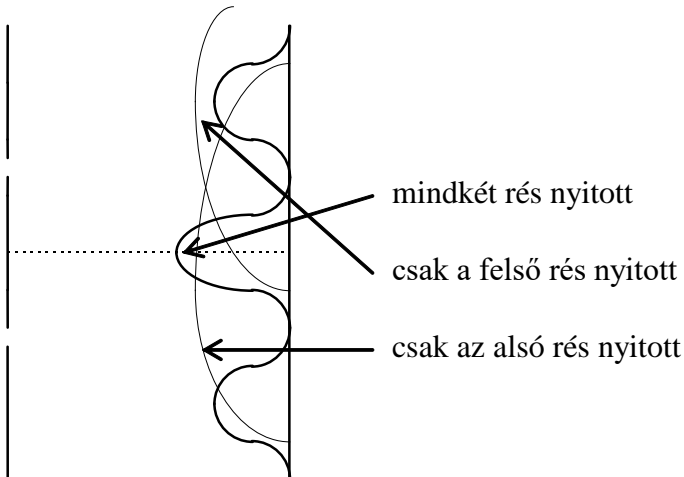


/ a rések távolsága $1\mu\text{m}$ /

$$\Delta s = \frac{y_1 d}{D} = n\lambda \quad (\text{itt } n=1)$$

$$y_1 = \frac{D}{d} \lambda \quad y_1, D, d \text{ ismeretében } \lambda \text{ számítható.}$$

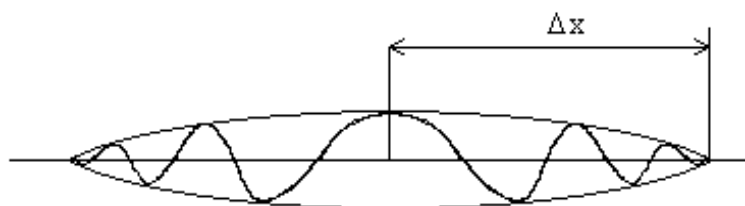
A kísérlet kis energiás elektronokkal végezhető. Az eredmény teljesen hasonló.



Az intenzitás eloszlása alapvetően különbözik, ha egyszerre csak egy-egy rés van nyitva, illetve ha egyszerre mindkettő. Ha mind a két rés nyitva van, akkor értelmetlen a kérdés, hogy az elektron melyik résen jött át. **Az elektronnak hullámtermészete van. Az elektron-hullám mind a két résen egyszerre halad át. Az elektronnak a két résen áthaladt „részei” interferálnak egymással. Detektáláskor az elektront mindig egészben detektáljuk. Ebben a kísérletben az elektron hullám is (a réseken való áthaladáskor) és részecske is (detektáláskor). A foton és az elektron ebben a kísérletben teljesen hasonlóan viselkedik!**

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

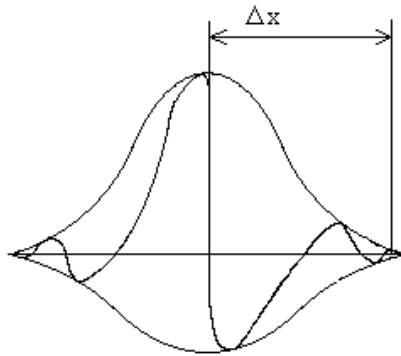
A hullámcsomagtól fogunk eljutni idáig.



Δx : a részecske helyzetének bizonytalansága.

Δ precízebb jelentése: a kérdéses fizikai mennyiség SZÓRÁSA, azaz

$\Delta x = \sqrt{\overline{(x - \bar{x})^2}}$, a középértéktől való eltérések négyzete átlagának a gyöke.



$\Delta x_1 > \Delta x_2$ / ez a 2. részecske jobban lokalizált, mint az előző lapon lévő 1. részecske /

Δk_1 kicsi hullámszám-tartományból felépíthető

Δk_2 nagy hullámszám-tartomány szükséges a felépítéshez

$\Delta k_1 < \Delta k_2$

$\Delta k_1 \cdot \Delta x_1 \cong \Delta k_2 \cdot \Delta x_2 \cong 1$ → Fourier analízissel a hullámtanból nyerhető összefüggés

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 1$$

Ha felhasználjuk a foton lendületére levezetett összefüggést: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, azt kapjuk, hogy

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

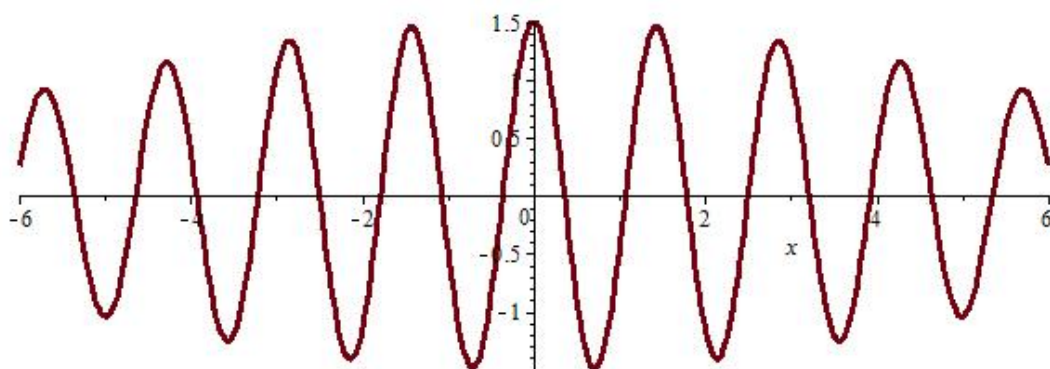
Jól lokalizált részecske → Δx kicsi → Δk nagy → Δp nagy

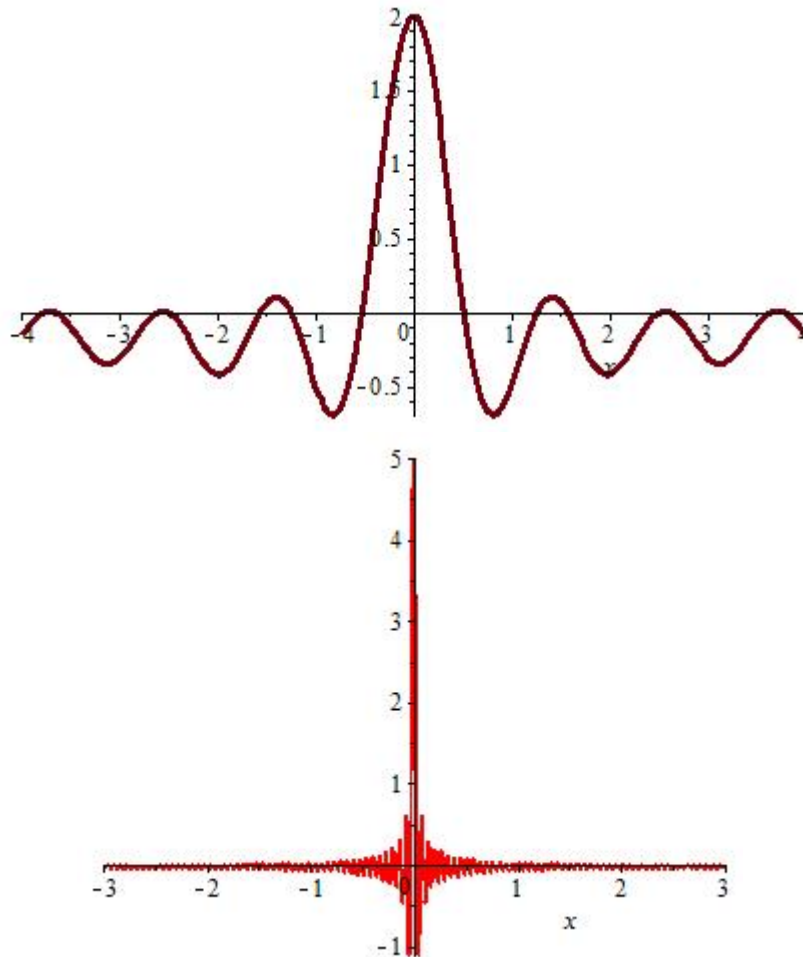
Jól lokalizált részecske: $\Delta x \approx 0 \Rightarrow \Delta p \rightarrow \infty$

Nem lokalizált részecske:

$$k = k_0 \Rightarrow \Delta k = 0 \Rightarrow \Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x \rightarrow \infty$$

Közbülső eset, mindkét szórásvéges (gyakorlatban a részecskék ilyenek): $\Delta x \Delta p_x \approx \hbar / 2$





Az egzakt levezetés eredménye:

$$\left. \begin{aligned}
 \Delta x \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\
 \Delta y \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\
 \Delta z \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \\
 \Delta E \Delta t &\geq \frac{\hbar}{2}
 \end{aligned} \right\} \underline{\text{Heisenberg féle határozatlansági összefüggések}}$$

$$\left. \begin{aligned}
 (x, p_x) \\
 (y, p_y) \\
 (z, p_z) \\
 (E, -t)
 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{egymáshoz kanonikusa konjugált változók:} \\ \text{egyszerre nem mérhetők terszőleges pontossággal} \end{array}$$

A határozatlansági reláció igen szépen mutatja, hogy a makrofizikai fogalmak a mikrovilág leírására csak korlátozottan alkalmasak. Egy fizikai mennyiség mérési pontosságának nem lesz elvi határa, ha a kísérleti körülményeket meg tudjuk úgy választani, hogy a mért mennyiség konjugált párja a mérés során határozatlan marad. Ekkor viszont ez utóbbi mennyiség mérésekor nem azért lesz nagy a szórás, mert nem jók a műszereink (az egy gyakorlati probléma lenne, amin elvileg lehetne javítani), hanem mert a mennyiségnek nem létezik határozott értéke.

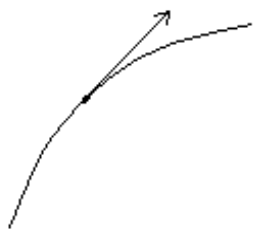
Visszatérés a kétréses kísérlethez:

- egyik rés nyitva: $\Delta x \approx 0 \rightarrow \Delta p_x \rightarrow \infty$ (azaz a szórási képből nem határozható meg a hullámhossz)
- mindkét rés nyitva: Δx nagy $\rightarrow \Delta p_x$ kicsi (azaz a szórási képből meghatározható a hullámhossz)

A határozatlansági relációk néhány következménye:

1. Trajektóriák kérdése:

Klasszikus fizikában:



Egyszerre ismert r és v /ezáltal p /
tehát van trajektória.

A) mákszem

$$m = 10^{-6} \text{ kg}$$

$\Delta x \approx 10^{-6} \text{ m}$ - helyét μm pontossággal tudjuk meghatározni

$$\Delta x \cdot m \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2} \approx 10^{-34}, \text{ átrendezve:}$$

$$\Delta v_x \approx \frac{10^{-34}}{10^{-6} \cdot 10^{-6}} = 10^{-22} \rightarrow \text{a mákszem sebességét } 10^{-22} \frac{\text{m}}{\text{s}} \text{ pontossággal tudjuk meghatározni}$$

Azonban ez nem igazi megszorítás, mert nincs olyan műszer, amivel ilyen pontosan lehetne sebességet mérni. Tehát a mákszemnek van trajektóriája.

B) Elektron

$$\Delta x \cong 10^{-10} \text{ m} \text{ és } m \cong 10^{-30} \text{ kg}, \text{ ezért } \Delta v_x \cong \frac{10^{-34}}{10^{-10} \cdot 10^{-30}} = 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

A H atomban az elektron sebessége ebbe a nagyságrendbe esik a klasszikus fizika szerint.

Az atomban az elektronnak nincs trajektóriája. Az atomi elektronra a bizonytalanság olyan mértékű, hogy nem mondhatjuk, hogy pl. az elektron az éppen az atommagtól x irányban van, sebessége pedig y irányba mutat (ez esetben impulzusmomentuma nem lehetne nulla), hanem úgy fogjuk fel, hogy az elektron felhőként körülveszi az atommagot, pl. gömb alakban.

3, Zérusponti energia:

Határozatlansági képlet:

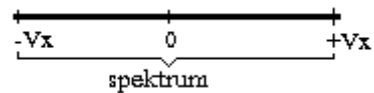
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \cdot m \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x}$$

Kérdés, hogy a kinetikus energiának minél kell nagyobbak lennie.

Megjegyzés: a különböző részecskéknek különböző sebességük van, tehát van spektruma.



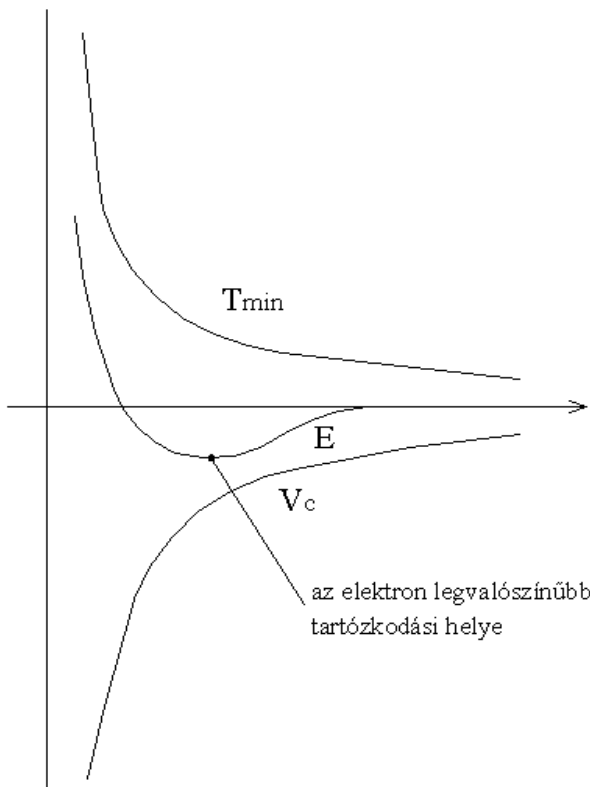
Mi lehet az x koordináták szórása ?

$$\Delta v_x \sim v_x$$

A szórás nagyságrendileg többnyire egyezik a középértéktől való maximális eltéréssel, de ettől kisebb.

A kinetikus energia 1 dimenzióban: $T_{\text{kin.}} = \frac{1}{2} m v_x^2 = \frac{1}{2} m \Delta v_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$

4.) Hidrogén atom:



$$V_c = -k \frac{e^2}{r} \text{ Coulomb-energia}$$

$$T_{\text{min}} = \frac{\hbar^2}{8mr^2}$$

„kvantumos nyüzsgés” energiája: ennél kisebb energiával nem rendelkezhet a csapdában a részecske

$$E = V_c + T_{\text{min}}$$

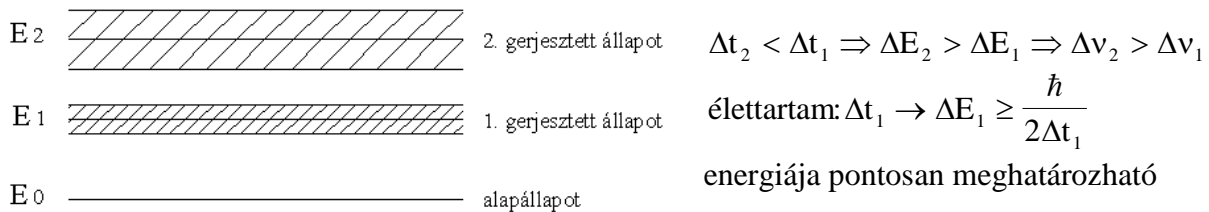
5.)

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \text{ a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés minden kanonikusan konjugált}$$

változó párra fennáll.

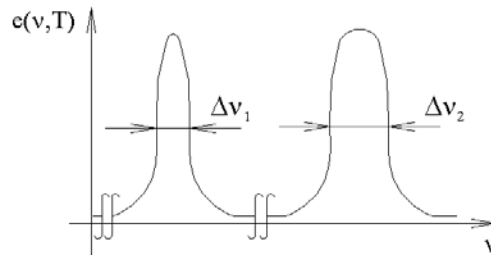
E és $-t$ is kanonikus konjugált. Jelentése : a teljes energia (E) rövid idejű méréssel nem határozható meg tetszőleges pontossággal.

Példa: gerjesztett állapot élettartama.



A gerjesztett állapotokon rövid ideig tartózkodik az e^- , utána visszamegy az alapállapotra.
 A gerjesztett állapot energiája nem lehet pontosan meghatározott,
 Az alapállapot energiája pontosan meghatározott.
 Következmény a spektrumokra:

$E = h\nu$
 $\Delta \nu_1 = \frac{\Delta E_1}{h} \geq \frac{\hbar}{h^2 \Delta t_1} = \frac{1}{4\pi \Delta t_1}$
 pl.: $\Delta t_1 \approx 10^{-8} \text{ s}$
 $\Delta \nu_1 \approx 10^7 \text{ Hz}$



Szélesebb spektrumvonal rövidebb átlagos élettidejű gerjesztett állapothoz tartozik.

A kvantummechanika alapjai

A kvantummechanika alapelvei (alapaxiómái)

I. A kvantum mechanikai rendszerek állapotát $\Psi(\vec{r}, t)$ komplex értékű reguláris függvény írja le. Ennek a függvénynek a neve hullámfüggvény, vagy állapotfüggvény. Az állapotfüggvény tartalmazza a rendszerből nyerhető összes információt.

Reguláris függvény tulajdonságai: folytonos, korlátos, négyzetesen integrálható.

A reguláris függvény közé nem tartozik a $\Psi \equiv 0$ függvény.

Négyzetesen integrálható:

$$\int_{\text{Teljes térre}} |\Psi|^2 dV < C \quad |\Psi|^2 = \Psi^* \cdot \Psi$$

(A * a komplex konjugáltat jelenti)

A hullám függvény közvetlen fizikai jelentéssel nem bír, de abszolút értékének négyzete a részecske tartózkodási valószínűség sűrűség függvénye lehetne.

V_1 térfogatban való tartózkodás valószínűsége:

$$P(V_1) = \int_{V_1} |\Psi|^2 dV = \int_{V_1} \Psi^* \cdot \Psi dV$$

Megjegyzés: Schrödinger úgy gondolta, az elektron egy elkent, felhőhöz hasonlítható dolog, aminek tényleges sűrűsége a $|\Psi|^2$ függvény. Azonban, a kísérletek azt mutatják, hogy az elektront inkább úgy kell elképzelni, mint egy pontszerű részecskét, ami véletlenszerűen "ugrál ide-oda", sok helyen tartózkodik egyszerre bizonyos valószínűségekkel. Ha egy részecskének az elhelyezkedését vizsgáljuk a teljes térre nézve, akkor $P(\text{teljes térre})=1$.

$$\int_{\text{Teljes térre}} |\Psi|^2 dV = 1$$

=> a hullám függvény egyre normált

$$\int_{\text{Teljes térre}} |\Psi|^2 dV = \|\Psi\|^2 = 1 \quad (\text{norma négyzet})$$

Skaláris szorzás értelmezése:

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int_{\text{teljes térre}} \Psi_1^* \cdot \Psi_2 dV$$

(eredménye egy konkrét szám, amely persze függhet az időtől)

Tulajdonságai:

$$\begin{aligned} (\Psi_1, \Psi_2)^* &= (\Psi_2, \Psi_1) \\ (\Psi_1 + \Psi_2, \Psi_3) &= (\Psi_1, \Psi_3) + (\Psi_2, \Psi_3) \\ (C \cdot \Psi_1, \Psi_2) &= C^* \cdot (\Psi_1, \Psi_2) \\ (\Psi_1, C \cdot \Psi_2) &= C \cdot (\Psi_1, \Psi_2) \\ \int_{\text{i.t.}} |\Psi|^2 dV = 1 &\Leftrightarrow (\Psi_1, \Psi_1) = 1 \end{aligned}$$

II. Szuperpozíció elve: Ha a ψ_1 és ψ_2 a rendszer lehetséges állapotait írják le, akkor a

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$$

lineáris kombináció is lehetséges állapot, ahol c_i tetszőleges komplex számok.

Ezt az elvet az interferencia jelensége követelte meg és a Schrödinger-egyenlet linearitásában nyilvánul meg, lásd később. A fenti képlettel kapott Ψ állapotot aztán újabb és újabb ψ_3, ψ_4, \dots állapotokkal kombinálva is lehetséges állapotot kapunk, tehát nem csak kettő, hanem tetszőleges számú állapot szuperpozíciója is lehetséges állapot. A szuperpozíció elvében a mikrorészecskék hullám-tulajdonsága nyilvánul meg. A kétréses kísérletben pl. nyaláb különböző résen áthaladt „részei” egymással szuperponálódnak és interferencia-kép jön létre.

Fontos, hogy mindez nem azt jelenti, hogy a valószínűségi sűrűségek (tehát a $|\Psi|^2$ -k) összeadódnának, hiszen akkor nem jöhetne létre kioltás.

III. A fizikai mennyiségek önadjungált (hermitikus) operátorokkal írhatók le.

Operátorok jelölése: \hat{O} (Pl.: $\hat{p}, \hat{L}, \hat{E}$)

Az operátorok függvényhez függvényt rendelnek (hasonlóan ahhoz, amikor a vektorokat mátrixszal szorozva másik vektort kapunk: az is egy operátor).

$$\text{pl.: } x \text{ szerinti deriválás: } \hat{O} = \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{O}\Psi_1 = \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} = \Psi_2$$

Lineáris operátorok:

$$\hat{L}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) = C_1 \hat{L}(\Psi_1) + C_2 \hat{L}(\Psi_2)$$

A fizikai mennyiségeket mindig lineáris operátorok írják le. (Lineáris operátor pl. a deriválás, nem lineáris pl. a négyzetre emelés.) A linearitás a szuperpozíció elve miatt szükséges.

Hermitikusság: skalárszorzásnál egy hermitikus/önadjungált operátort az első tagra, vagy a második tagra alkalmazva, a szorzás eredménye nem változik. Képlettel:

$$(\hat{H}\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1, \hat{H}\Psi_2)$$

Műveleti szabályok operátorokkal:

$$\begin{aligned}(\hat{O}_1 + \hat{O}_2)\Psi_1 &= \hat{O}_1\Psi_1 + \hat{O}_2\Psi_1 \\ (\hat{O}_1\hat{O}_2)\Psi_2 &= \hat{O}_1(\hat{O}_2\Psi_2)\end{aligned}$$

(Szorzásban az operátorok általában nem cserélhetők fel, a művelet nem kommutatív.)

Kommutátor: Azt jellemzi, hogy mennyire nem felcserélhető a két operátor:

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = \hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1$$

Felcserélhető operátorok kommutátora zérus.

IV. A fizikai mennyiségekhez rendelt operátor sajátértékei megegyeznek a fizikai mennyiségek mérésekor lehetséges értékekkel.

Ha egy operátor hat egy függvényre, annak általában megváltozik az alakja, mint ahogyan egy vektornak is megváltozik az iránya, ha egy mátrixszal megszorozzuk. Előfordul azonban, hogy a függvény csak egy számmal szorozódik meg az operátor hatására (ez a vektor nyújtásának felel meg). Ez esetben a vektort az adott operátor sajátvektorának, a számot a hozzá tartozó sajátértéknek nevezzük.

Sajátérték egyenlet : (k a sajátérték) $\hat{O}\varphi = k\varphi$

$$\text{Pl: } \hat{O} = \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{O}e^{2x} = \frac{\partial e^{2x}}{\partial x} = 2e^{2x} \rightarrow k = 2$$

Egy operátor sajátértéke mindig függ attól, hogy milyen függvényre hat. Egy gyakorlati példa: ha az energia operátort alkalmazzuk a Hidrogénre, nem ugyan azt az eredményt mérjük, mintha pl. Uránra alkalmoznánk. Tehát az energia operátornak más a sajátértéke itt, mint ott.

Tétel: A hermitikus operátorok sajátértékei valósak.

Biz:

$$(\hat{H}\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1, \hat{H}\Psi_2)$$

$$\hat{H}\varphi = h\varphi$$

$$(h\varphi, \varphi) = (\varphi, h\varphi)$$

$$h^*(\varphi, \varphi) = h(\varphi, \varphi)$$

$$h^* = h$$

Tehát h csak valós lehet, mert egy szám és a konjugáltja csak akkor egyezik meg, ha nincs imaginárius része. Így teljesül az a gyakorlati követelmény, hogy a mérőműszerek mindig valós értékeket mérjenek.

V. Egy fizikai mennyiség méréssel kapható átlagértékét a(z):

$$\bar{O} = (\psi, \hat{O}\psi) \quad \text{skaláris szorzat adja. (Ez is axiómaként van kimondva)}$$

Figyelembe véve a skaláris szorzat jelentését: $\bar{O} = \int_{\text{teljes térré}} \psi^* \hat{O}\psi \, dV$

pl.:

$$\bar{x} = \int_{\text{teljes térré}} \psi^* x \psi dV = \int_{\text{teljes térré}} x \psi^* \psi dV$$

analógia: tömegközéppont x koordinátája(klasszikus mechanika):

$$\bar{x} = \int x \rho dV$$

$\psi^* \psi$ tartózkodási valószínűség sűrűség

ρ tényleges sűrűség

ez fontos különbség a kvantummechanika és a klasszikus mechanika között.

Egy fizikai mennyiség értékének határozatlansága azzal jellemezhető, hogy mennyivel tér el várhatóan az átlagértéktől a mért érték. Ezt a valószínűség-számításban szórásnak hívják: $\Delta O = \sqrt{(\hat{O} - \bar{O})^2}$

Δ : szórás

Állítás:

Ha két operátornak szimultán sajátfüggvényekből álló bázisa van, akkor a két operátor felcserélhető. Ez az állítás visszafelé is igaz. Mi a szimultán saját függvény?

Legyen két operátor: \hat{O}_1 és \hat{O}_2

ϕ akkor szimultán sajátfüggvénye, ha:

$$\hat{O}_1 \phi = c_1 \phi$$

$$\hat{O}_2 \phi = c_2 \phi$$

Be kellene látnunk, hogy ebből következik a felcserélhetőség: $\hat{O}_1 \hat{O}_2 = \hat{O}_2 \hat{O}_1$

Ehhez szorozzuk meg jobbról a felső egyenletet \hat{O}_2 -vel az alsót pedig \hat{O}_1 -el.

$$\left. \begin{aligned} \hat{O}_2 \hat{O}_1 \phi &= \hat{O}_2 c_1 \phi = c_1 \hat{O}_2 \phi = c_1 c_2 \phi \\ \hat{O}_1 \hat{O}_2 \phi &= \hat{O}_1 c_2 \phi = c_2 \hat{O}_1 \phi = c_2 c_1 \phi \end{aligned} \right\} =$$

Ezzel beláttuk, hogy a két operátor egymással felcserélhető az adott sajátfüggvényre nézve, ha a függvény szimultán sajátfüggvénye. Ha létezik ilyenekből álló bázis, akkor minden függvény kikombinálható sajátfüggvényekből, tehát minden függvényre nézve igaz, hogy nem számít, milyen sorrendben alkalmazzuk a két operátort a függvényekre, ugyanazt kapjuk.

Két fizikai mennyiségnek akkor létezik egyszerre pontos értéke (akkor mérhető egyszerre), ha operátoruk felcserélhető, azaz a kommutátoruk nulla.

Ha ugyanis olyan rendszeren mérjük meg a fizikai mennyiség értékét, amelyet a mennyiséghez tartozó operátor sajátfüggvény ír le, akkor mindenképp a sajátfüggvényhez tartozó sajátértéket kapjuk. Ha ψ két operátornak is sajátfüggvénye, akkor mindkettőre határozott értéket (a megfelelő sajátértéket) kapunk bizonytalanság nélkül (a műszer tökéletlenségéből adódó hibáktól most eltekintünk). Konkrét példát a szabad részecskénél mutatunk be.

Mindezekből az következik, hogy azon mennyiség-párokra, amelyekre határozatlansági reláció áll fent, a kommutátor nem tűnhet el.

Az operátorok konkrét alakja és a Schrödinger-egyenlet

A legegyszerűbb tárgyalásban az impulzus x komponenséhez és az x hely-koordinátához a következő operátort rendeljük:

$$\boxed{\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}} \quad \text{és} \quad \boxed{\hat{x} = x \cdot} \quad (\text{ez úgy hat, hogy egy } f(x) \text{ függvényt megszorozza } x\text{-szel}).$$

hasonlóan:

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{és} \quad \hat{y} = y \cdot, \quad \hat{z} = z \cdot,$$

Rendeljünk most az energiához és az időhöz is operátort:

$$\hat{E} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{és} \quad \hat{t} = t \cdot.$$

Korábban láttuk, hogy a Heisenberg-féle határozatlansági relációk az operátorok szintjén a kommutátorokban jelentkeznek. A fizikai mennyiségekhez tehát úgy rendeltük hozzá az operátorokat, hogy a Heisenberg-féle felcserélési relációk teljesüljenek. Ezek a relációk a következők: (minden kanonikusan konjugált változóra fennállnak)

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}, \quad [\hat{p}_y, \hat{y}] = \frac{\hbar}{i}, \quad [\hat{p}_z, \hat{z}] = \frac{\hbar}{i}, \quad [\hat{E}, -\hat{t}] = \frac{\hbar}{i}.$$

Bizonyítsuk be, hogy \hat{p}_x és \hat{x} megfelel a felcserélési törvénynek:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] \phi = \hat{p}_x \hat{x} \phi - \hat{x} \hat{p}_x \phi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \phi) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \phi + \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \phi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \phi$$

azaz teljesült a felcserélési törvény.

Megjegyzés: az egymáshoz nem kanonikusan konjugált hely- és impulzuskoordináta változók természetesen felcserélhetők. Pl.

$$[\hat{p}_x, \hat{y}] = 0 \cdot$$

$$[\hat{p}_y, \hat{x}] = 0 \cdot \quad \text{stb}$$

Hogyan található meg a többi fizikai mennyiség operátora?

Ugyanúgy, mint ahogy egyik fizikai mennyiség a másikból megkapható.

pl.: **kinetikus energia**

$$\text{klasszikusan: } T = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{1}{2m} (\hat{p}_x \hat{p}_x + \hat{p}_y \hat{p}_y + \hat{p}_z \hat{p}_z) = \\ &= \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] = \end{aligned}$$

A $\frac{\hbar}{i}$ mint konstans, kiemelhető a deriválás elé:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

Δ : Laplace operátor

$$\text{azaz} \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

A töltéshez, tömeghez nem rendelhetünk operátort, mert azok konstansok!

Potenciális energia (csak konzervatív mezőben van értelme):

Mivel a potenciális energia csak a helykoordinátáktól függ, és a helykoordináták operátora a "velük való szorzás" ezért a potenciális energia operátora is a "vele való szorzás".

$$\mathbf{V}=\mathbf{V}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) \Rightarrow \mathbf{V}=\mathbf{V}.$$

Konzervatív mezőben a teljes energia: $E=T+V$

A **teljes energia** operátora (Hamilton operátor): \hat{H}

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z).$$

Viszont a korábban definiált $\hat{E} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$ operátornak ugyanazt kell adnia, mint a most definiált Hamilton-operátornak:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = \hat{E}\psi(\vec{r}, t)$$

Behelyettesítve:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

Ez a kvantummechanika dinamikai alapegyenlete, más néven időfüggő Schrödinger egyenlet. Ez írja le a rendszer időbeli változását. Tulajdonképpen ezzel meg tudjuk mondani a későbbi állapotát a rendszernek, ha a korábbi ismerjük.

Megjegyzés: Az időfüggő Schrödinger egyenletből levezethető Newton 2. törvénye ($a_x = F_x/m$). Általánosan is igaz, hogy a kvantummechanika alapegyenletéből, axiómáiból a klasszikus mechanika alapegyenletei, axiómái levezethetők. A kvantummechanika tehát a természet általánosabb törvényeit adja meg, amelyek a makrovilág leírására is alkalmasak (elvben). Az egyszerűsége miatt azonban sokszor célszerű a klasszikus mechanika nevű, megszokott közelítést alkalmazni.

Stacionárius állapotok és az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet

Tegyük fel, hogy az időtől nem függő V potenciált tartalmazó

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

időfüggő Schrödinger-egyenletnek az alábbi alakban állítottuk elő a megoldást:

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Ebben az az érdekes, hogy a jobb oldalon az egyik tényező csak a helytől, a másik csak az időtől függ. Ha ezt lederiváljuk t szerint, akkor önmagát kapjuk, szorozva az exponenciális függvény kitevőjében a t együtthatójával. Tehát ha behelyettesítjük az időfüggő Schrödinger-egyenlet jobb oldalán ψ helyére, akkor az egyenlet bal oldalán egyszerűsítés után csak $E\varphi$ marad, tehát az új egyenletben nincs idő változó:

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

ennek neve **időfüggetlen Schrödinger-egyenlet** vagy energia-sajátértékegyenlet. Beírva a Hamilton-operátor kifejezését:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

Tehát a keresett konstans az energia-sajátérték. Ebből pedig az is következik, hogy az állapotfüggvény helytől függő része az **energia-sajátfüggvény**.

Tehát ha a hullámfüggvény a fenti szeparált alakban áll elő, akkor a rendszer energia-sajátállapotban tartózkodik.

Ez a hullámfüggvény az állapotegyenlet stacionárius megoldása. Mitől stacionárius?

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi^* \psi = \varphi^*(\vec{r}) e^{i\frac{E}{\hbar}t} \varphi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \varphi^*(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = \rho(\vec{r})$$

ρ : valószínűségi sűrűségfüggvény, csak \vec{r} - től függ.

Tehát a fizikai mennyiségek az időtől nem függenek, ezért stacionárius az állapot.

Ez ezt is jelenti, hogy a rendszer energia-sajátállapotban tartózkodik az idők végezetéig, tehát pl. az atomok gerjesztett állapota nem bomlik el fotont kibocsátva, hogy az energiaminimumot elérje.

Fontos megjegyezni, hogy ez csak a „hagyományos” kvantummechanika szerint igaz. Ez a kvantummechanika azonban csak akkor alkalmazható, ha a részecskeszám állandó. A kvantummechanika nem alkalmas részecskék keletkezésének és eltűnésének leírására, ami képes erre, az a kvantum-elektrodinamika. A kvantum-elektrodinamika szerint például a gerjesztett állapot - bár stacionárius - előbb-utóbb egy foton kibocsátásával megszűnik. Tehát az általunk felírt állapotegyenlet hiányossága, hogy eltűnő és keletkező részecskére nem alkalmazható.

A Schrödinger-egyenlet megoldása konkrét rendszerekre

Szabad részecske 1 dimenzióban:

A potenciál $V=\text{const.}$, ezt a V konstanst válasszuk 0-nak.

Ekkor stacionárius esetben igaz, hogy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = E\varphi(x)$$

ennek megoldásai a sin, cos és exp. függvények, pl.:

$$\varphi(x) = Ae^{ikx}$$

ahol a k tetszőleges.

Ez sajátfüggvénye p_x -nek. A megfelelő sajátérték egyenlet:

$$\hat{p}_x X(x) = p_x X(x),$$

ahol \hat{p}_x operátor, p_x sajátérték.

$$\text{azaz } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} Ae^{ikx} = p_x Ae^{ikx}$$

Elvégezve a deriválást:

$$\hbar k A e^{ikx} = p_x A e^{ikx}$$

ebből $k = \frac{p}{\hbar}$, vagyis k nem más, mint a korábban definiált hullámszám: $p = \hbar k$.

Ez hasonlóan elvégezhető az y és z koordinátára is, tehát három dimenzióban:

$$\varphi(\vec{r}) = K e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} = K e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}$$

A szabad részecske stacionárius állapotban tehát a következő függvénnyel leírt állapotban tartózkodik:

$$\psi(\vec{r}, t) = K e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \vec{r})} \quad \left(\text{mivel } \psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \right)$$

Ez pedig egy síkhullámot ír le.

Megjegyzések:

1. Stacionárius állapotban a részecske mindig energia sajátállapotban tartózkodik, ez szabad részecskére egyúttal impulzus sajátállapot is. Tehát a részecske egyidejűleg rendelkezik meghatározott energiával és meghatározott impulzussal. Ez így van a klasszikus fizikában is.

Legyen pl. a részecske hullámfüggvénye $\varphi_5(x) = e^{5ix}$, ahol tehát $k=5$ (a mértékegység pl. 1/m). Ha erre haddatjuk a $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ operátort, akkor azt kapjuk, hogy $p_x = 5\hbar$, ez az impulzus-operátor sajátértéke.

Ha haddatjuk a mozgási energia $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ operátorát, akkor azt kapjuk, hogy $E = \frac{25\hbar^2}{2m}$, ez az energia-

sajátérték (ellenőrizzük le!). Ha viszont a részecske hullámfüggvénye a $\varphi_{5,7}(x) = e^{5ix} + e^{7ix}$,

akkor 50% valószínűséggel $p_x = 5\hbar$, 50% valószínűséggel pedig $p_x = 7\hbar$ -t kapnánk az impulzus mérésekor. Az impulzus várható értéke (átlagértéke) $\bar{p}_x = 6\hbar$, bár ezt az értéket sohasem kapjuk

mérésekor. Hasonló határozatlanság érvényesül az energiára is, vagyis $\varphi_{5,7}$ nem energia-sajátállapot, tehát nem stacionárius állapot, azaz gyorsan megváltozik, átalakul az időfüggő Schrödinger-egyenletnek eleget téve.

2. Ebben az esetben viszont a szabad részecske helye teljesen határozatlan, mivel a síkhullámban tartózkodási valószínűség helytől független érték.

$$\rho = \psi^* \cdot \psi = K \cdot K = |K|^2 = \text{konstans}$$

Vagyis a síkhullámban a részecske egyáltalán nincs lokalizálva, bárhol ugyanolyan eséllyel tartózkodik. Az előző pontban felsorolt egyik φ függvény sem sajátfüggvénye a hely operátorának, mivel annak sajátfüggvényei csak egy pontban különböznek nullától. A szuperpozíció elve alapján azonban szabad részecskét leíró síkhullámokból is kikombinálhatunk olyan hullámcsomagot, amely már meghatározott térrészbe lokalizálható, ez viszont már nem lesz energia- és impulzus-sajátállapot, így nem is stacionárius.

3. Az energiára nem kaptunk feltételt, vagyis az energia (E) értéke tetszőleges lehet. Tehát míg kötött állapotban a részecske diszkrét energiaértékkel rendelkezik, addig szabad állapotban bármilyen, vagyis a szabad állapotú részecske energiaspektruma folytonos.

4. Gyakorlásként számoljuk ki ennek a síkhullámnak a hullámhosszát és a frekvenciáját!

A síkhullám – mint tudjuk - felírható a következő alakban is:

$$\psi(\vec{r}, t) = K e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}, \text{ ahol } \omega: \text{ frekvencia, } \vec{k}: \text{ hullámszámvektor}$$

$$\text{Tehát: } \omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow 2\pi f = \frac{2\pi E}{h} \Rightarrow f = \frac{E}{h}$$

Vagyis visszakaptuk a Planck-féle összefüggését.

$$k = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p}$$

Itt pedig visszakaptuk de Broglie hipotézist. Ez nem meglepő, hiszen az anyag hullámtermészetéből következnek ezek az egyenletek, de ahogy felírtuk ezeket, az még nem látszott rögtön. Most viszont láthatjuk, hogy ezek az egyenletek teljesen megfelelnek annak, amit de Broglie állított.

Végtelen mély potenciálgödör

A következő potenciál a (0,a) intervallumra korlátozza a részecske mozgását:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha } x < 0 \\ 0, & \text{ha } 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{ha } x > a \end{cases}$$

ha $x < 0$ vagy $x > a$ akkor $\varphi = 0$, hisz a részecske a (0,a) intervallumra van korlátozva. (Látni fogjuk, hogy ezt csak végtelenül nagy potenciállal lehet megtenni.)

A folytonosság miatt: $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$

A gödör belsejében (a $0 \leq x \leq a$ szakaszon) a Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi$$

átrendezve ugyanazt az egyenletet kapjuk, mint szabad részecskére:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \varphi \quad (S1)$$

ahol $2mE = p$. Ezt felhasználva:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \varphi$$

A határfeltételekhez viszont most teljesen mások, mint a szabad részecskénél. A gödör szélén a függvénynek nullának kell lennie, a komplex exponenciális függvény viszont sehol sem nulla.

$$\text{Megoldás: } \varphi = A \cdot \sin\left(\frac{p}{\hbar} x\right),$$

mert ez az alak illeszkedik a határfeltételekhez. Fizikailag ez **állóhullámot** jelent.

$\varphi(0) = 0$ automatikusan teljesül, de szükséges $\varphi(a) = 0$ fennállása is:

$$0 = A \sin \frac{p}{\hbar} a \Leftrightarrow \frac{p}{\hbar} a = n\pi, \text{ vagyis a hullámfüggvény: } \varphi_n = A \sin \frac{n\pi}{a} x$$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n\pi$$

$$2mEa^2 = n^2 \pi^2 \hbar^2 = n^2 \pi^2 \frac{\hbar^2}{4\pi^2}$$

Tehát az energia nem folytonos, hanem diszkrét értékeket vesz fel, konkrétan az n

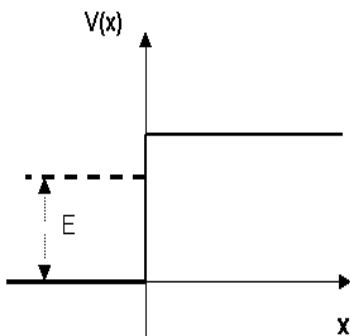
kvantumszám négyzetével arányos:
$$E = \frac{\hbar^2}{8ma^2} n^2$$

Véges potenciálgödör:

A részecske véges valószínűséggel tartózkodik a klasszikus mozgástartományon kívül. \Rightarrow negatív kinetikus energia. Gerjesztett állapotban a klasszikusan megengedett mozgástartomány egyes pontjairól viszont kiszorul a részecske.

Potenciállépcső egy dimenzióban

Legyen a potenciállépcső a következő:



$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x \leq 0 & (1) \\ V_0, & \text{ha } x > 0 & (2) \end{cases}$$

Általános megoldás az (1) tartományra hasonló, mint szabad részecskére:

$$\varphi_1(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar} p_x x} + Be^{-\frac{i}{\hbar} p_x x}, \quad p_x > 0$$

Általános megoldás a (2) tartományra, a lépcső belsejére:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + V_0 \varphi_2(x) = E \varphi_2(x) \quad (\text{időtől független egyenlet})$$

Átrendezve:

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \varphi_2(x)$$

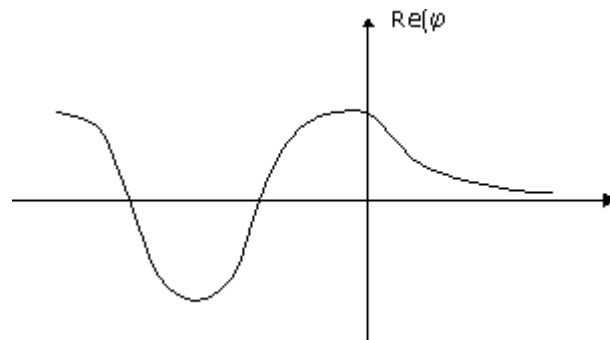
Tárgyaljuk azt az esetet, ha $V_0 > E$:

A fő különbség a két, látszatra nagyon hasonló Schrödinger-egyenlet között (a fenti S1 és a mostani között), hogy ez utóbbi esetben az energia kisebb, mint a potenciál értéke, vagyis a jobb oldalon az együttható **pozitív**. Ez pedig minőségileg más viselkedést eredményez. Ekkor a $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ mennyiség **valós**, hiszen $V_0 > E$.

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} = \left(\frac{q}{\hbar}\right)^2 \varphi_2(x) \quad \varphi_2(x) = Ce^{-\frac{q}{\hbar} x} + De^{\frac{q}{\hbar} x}$$

de $D=0$ kell, hogy legyen, mivel $e^{\frac{q}{\hbar} x} \rightarrow \infty$, ha $x \rightarrow \infty$, ami ellentmond a normálhatóságnak. Ez azt jelenti, hogy a pozitív kitevő nem fizikai megoldás.

Végeredményben a megoldás: $\varphi_2(x) = Ce^{-\frac{q}{\hbar}x}$



tartózkodási valószínűségi sűrűség a 2. tartományban

$$\rho(x) = \phi^*(x) \cdot \phi(x) = C^* \cdot C \cdot e^{-\frac{2q}{\hbar}x} = |C|^2 \cdot e^{-\frac{\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar}x}$$

a részecske valamelyest **behatol** a 2. tartományba, de a valószínűség-sűrűség **exponenciálisan lecsengő**. Ez azt jelenti, hogy a részecske előbb-utóbb visszafordul; a visszaverődés 100%-os.

Behatolási mélység: x_b az a távolság amelyen a tartózkodási valószínűség-sűrűség az e -ad részére csökken

$$\rho(x_b) = \frac{\rho(0)}{e}$$

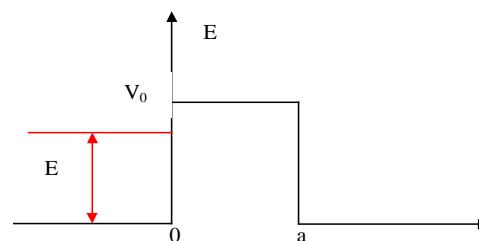
$$|C|^2 e^{-\frac{\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar}x_b} = e^{-1}|C|^2 \text{ ; a kitevőknek meg kell egyezni.}$$

$$\frac{\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot x_b = 1 \Rightarrow x_b = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(V_0-E)}}$$

A részecske annál jobban be tud hatolni a klasszikus fizika szerint számára tiltott tartományba minél kisebb a tömege és minél kisebb a hiányzó energia.

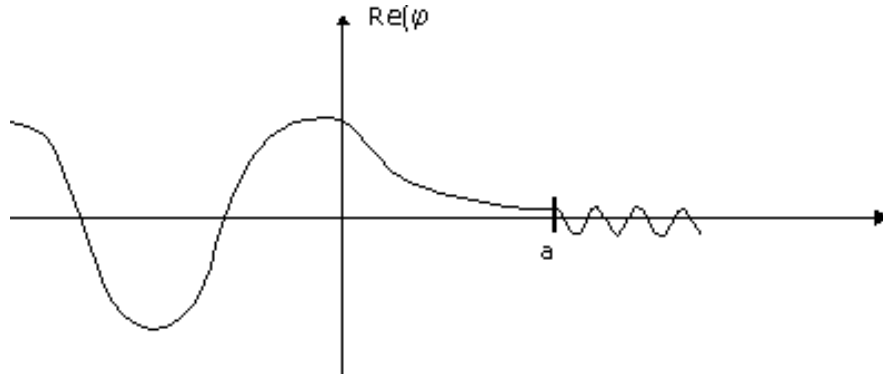
Alagúteffektus

Véges vastagságú gát



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } x \leq 0 \text{ vagy } x \geq a \\ V_0 & \text{ha } 0 < x < a \end{cases}$$

Emellett: $E < V_0$



G: annak a valószínűsége hogy a részecske átjuthat a gáton. Jó közelítéssel az alábbi formula adja meg:

$$G \approx \frac{\rho(a)}{\rho(0)} = e^{-\frac{\sqrt{8m(V_0-E)}}{\hbar}a}$$

Ez a kvantummechanikai alagúteffektus. (A klasszikus mechanikában ez az effektus hiányzik.)

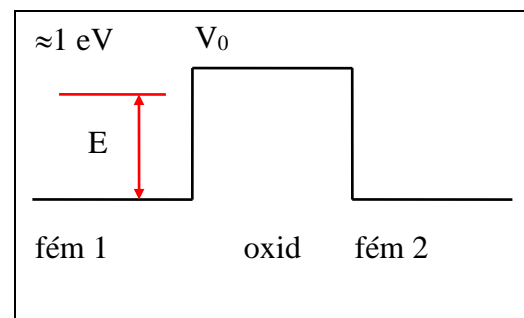
A részecske jó eséllyel átjut a gáton (G nagy), ha

- m kicsi
- $V_0 - E$ (azaz a hiányzó energia) kicsi, és
- a gát szélessége kicsi.

Az alagúteffektus a határozatlansági reláció megnyilvánulása. A gát túoldalán a részecske ugyanakkora energiával jelenik meg, mint a gát elérése előtt.

Példák az alagúteffektusra

1. Vékony oxidréteg vezet.



$$x_b = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(V_0 - E)}} \approx \frac{10^{-34}}{\sqrt{10^{-29} \cdot 10^{-19}}} = 10^{-10} - \text{ez kb. egy oxidréteg vastagsága.}$$

Körülbelül egy réteg oxid csökkenti e -vel az elektronsűrűséget. Mivel a legtöbb vezető felülete a szabad levegőn oxidálódik, a mindennapokban ezt a jelenséget használjuk, pl. amikor bedugjuk a konnektorba a villásdugót.

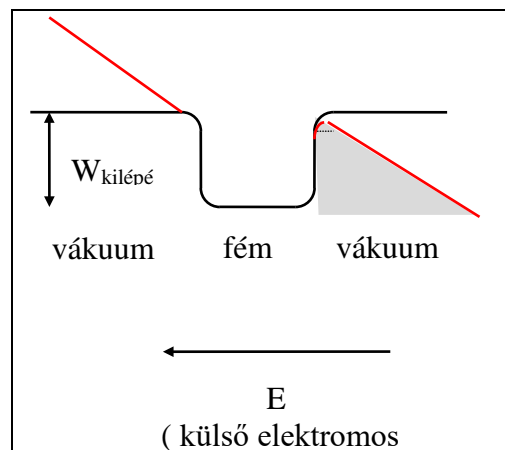
A tranzisztoroknál a miniatürizálás miatt olyan vékony a vezérlő Gate elektródát a vezérelt csatornától elválasztó oxidréteg, hogy azon alagutazással átjuthatnak az elektronok, ami a vezérlő teljesítmény növekedését jelenti. Ez az egyik akadálya a további méretcsökkenésnek. Bizonyos memóriatípusok (EEPROM, Flash) esetében viszont ugyanez a jelenség hasznos, mivel az adat az elektromosan minden oldalról leszigetelt Gate elektródán töltés formájában tárolódik, aminek írása és olvasása alagutazással történik.

2. Hidegemisszió

Az elektronok a fém belsejében egy potenciálgödörben vannak, a gát végtelen hosszúnak tekinthető \Rightarrow az elektron kijutási valószínűsége zérus.

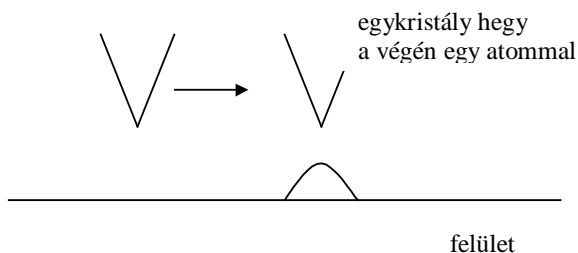
Feszültséget kapcsolva a fémre, az így kialakult gáton az elektron véges valószínűséggel átjuthat. Az alkalmazott elektromos tér nem elsősorban a gát magasságát, hanem a szélességét befolyásolja, ami erősebb függést jelent.

Gyakorlati alkalmazás: pásztázó alagútmikroszkóp.



Pásztázó alagútmikroszkóp (scanning tunnel microscope)

az egykristály hegyet mozgatják a felület felett. Ahol a felületen domborulat van, a tûhegy közelebb kerül a felülethez \rightarrow csökken a potenciálgát \rightarrow nő a G átjutási valószínűség. Ekkor, hogy állandó értéken tartsák az áramot, a tût eltávolítják a felülettől és ezt a távolítást regisztrálja a berendezés. Tehát a tû nem ér hozzá a felülethez!



3. Minden energiatermelő reakció küszöb alatt indul.

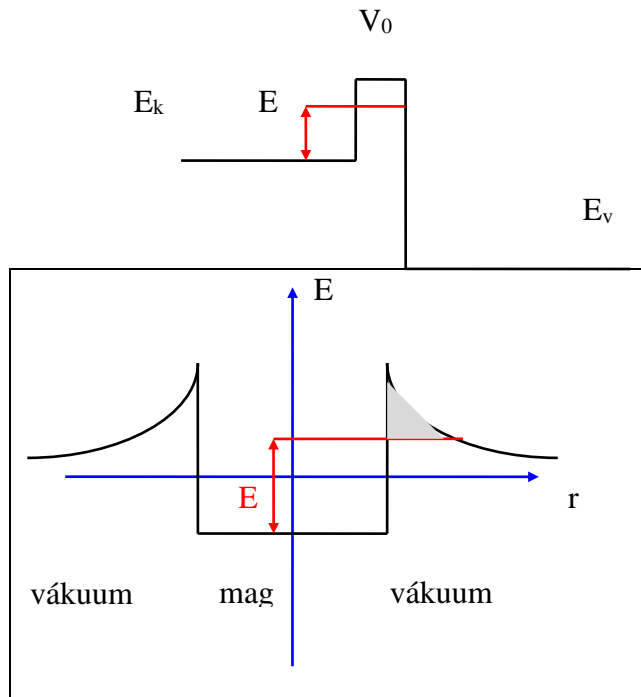
Legyen pl. V_0 a potenciálgát magassága, E a rendelkezésre álló energia.

Ha $V_0 > E$, de $V_0 - E$ kicsi, akkor a reakció igen lassan már folyik.

Például a magfúzióhoz kb. 100millió K hőmérséklet kellene, de a nap belsejében is csak kb. 10 millió K van, ezért lassú a fúzió.

4. α - bomlás:

$$U(r) = k \frac{Z \cdot e \cdot 2 \cdot e}{r}$$



Az α részecske előbb-utóbb átjut a gáton.

5. Tunnel-magnetoresistance: A modern GMR olvasófejekben a két mágneses réteg között olyan vékony szigetelő réteg van, amelyen alagutazással jut át az elektron

6. Alagút-dióda: Van olyan U tartomány, ahol a feszültség növelésekor csökken az áram. Ennek magyarázatát később tárgyaljuk.

7. Josephson-átmenet a szupravezetőknél: Vékony szigetelő rétegen feszültség nélkül is folyhat áram.

Az impulzusmomentum

A pályaimpulzusmomentum

Az elektron atommag körüli mozgásához kapcsolódó perdület:

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$ a klasszikus fizikában.

$$L_z = xP_y - yP_x$$

$$L_x = yP_z - zP_y$$

$$L_y = zP_x - xP_z$$

A kvantummechanikában a fizikai mennyiségekhez operátort kell rendelni. Például:

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x = x \frac{\hbar \partial}{i \partial y} - y \frac{\hbar \partial}{i \partial x} = \frac{\hbar \partial}{i \partial \varphi}$$

L_z előállítás gömbi polár koordináta-rendszerben ezt az alakot ölti. A többi komponens bonyolultabb, nem vesszük. Az atomfizikában az origót az atommaghoz rögzítjük, az a viszonyítási pont.

Mivel egyenlő a perdület nagysága?

Venni kell a koordináták négyzetösszegét:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad \text{azaz} \quad \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Az operátor négyzete azt jelenti, hogy kétszer kell alkalmazni.

Állítás:

L_x, L_y, L_z egymással nem felcserélhető, de \hat{L}^2 bármelyikkel felcserélhető.

Pl:

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = ?$$

$$(\hat{y} \hat{P}_z - \hat{z} \hat{P}_y) * (\hat{z} \hat{P}_x - \hat{x} \hat{P}_z) - (\hat{z} \hat{P}_x - \hat{x} \hat{P}_z) * (\hat{y} \hat{P}_z - \hat{z} \hat{P}_y)$$

$$\hat{y} \hat{P}_z \hat{z} \hat{P}_x - \cancel{\hat{z} \hat{P}_y \hat{z} \hat{P}_x} - \cancel{\hat{y} \hat{P}_z \hat{x} \hat{P}_z} + \hat{z} \hat{P}_y \hat{x} \hat{P}_z - \hat{z} \hat{P}_x \hat{y} \hat{P}_z + \cancel{\hat{x} \hat{P}_z \hat{y} \hat{P}_z} + \cancel{\hat{z} \hat{P}_x \hat{z} \hat{P}_y} - \hat{x} \hat{P}_z \hat{z} \hat{P}_y$$

Csak a kanonikusan konjugált változók operátorai nem cserélhetők fel.

$$\hat{P}_z \hat{z} * (\hat{y} \hat{P}_x - \hat{x} \hat{P}_y) - \hat{z} \hat{P}_z * (\hat{P}_x \hat{y} - \hat{P}_y \hat{x})$$

$$(\hat{P}_z \hat{z} - \hat{z} \hat{P}_z) * (\hat{y} \hat{P}_x - \hat{x} \hat{P}_y)$$

Mivel a szorzat első tagja egyenlő $\frac{\hbar}{i}$ -vel, a második pedig $-\hat{L}_z$ így a megoldás:

$$-\frac{\hbar}{i} \hat{L}_z = i \hbar \hat{L}_z$$

Ez az operátorok kommutátora.

Következmény:

- L_x, L_y és L_z egyidejűleg nem határozhatók meg (mert nincs szimultán sajátfüggvényük, ezért nem lehet olyan állapot, amely mindhárom mennyiségre nézve sajátállapot).
- viszont L^2 és valamelyik komponens (pl.: L_z) egyidejűleg meghatározható.

Szimultán sajátfüggvényekkel egyszerre két sajátérték-egyenletet is felírhatunk :

$$\begin{cases} \hat{L}^2 \varphi = L^2 \varphi \\ \hat{L}_z \varphi = L_z \varphi \end{cases} \quad \text{amelyek egyidejűleg megoldhatók.}$$

Megoldás nélkül a végeredmény :

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

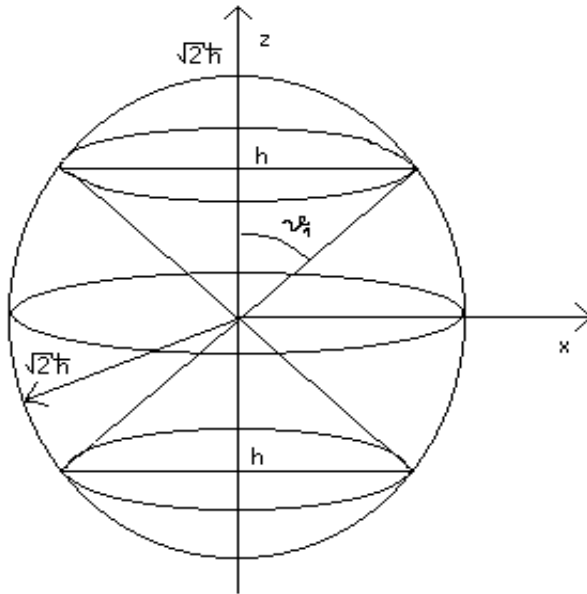
$L_z = \hbar m$ $m = -l, -l+1, \dots, l$ szimultán sajátértékek

$\varphi = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ szimultán sajátfüggvények (gömbfüggvények), ahol ϑ azimut ,
 φ polárszög. A gömbfüggvények alakja a következő (nem kell megtanulni!)

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

ahol P az ún. asszociált Legendre polinom.

Pl.: a.) legyen $l = 0$ ekkor $L^2 = 0$ és $L_z = 0$ egyáltalán nincs impulzus momentum.



b.) legyen $l = 1$ ekkor

$$L^2 = \hbar^2 2$$

és $L_z = -\hbar$, ha $m = -1$

$L_z = 0$, ha $m = 0$

$L_z = \hbar$, ha $m = 1$.

A kapott eredményeket bal oldalt ábráztuk. Ez egy $\sqrt{2}\hbar$ sugarú gömb amelyben

- a felső kúp alkotóvektorainak hossza $\sqrt{2}\hbar$, ennek függőleges vetülete \hbar , ez éppen megfelel az $L_z = \hbar$ ha $m = 1$ esetnek
- az alsó kúp alkotóvektorainak hossza $\sqrt{2}\hbar$, függőleges vetülete $-\hbar$, ez megfelel $L_z = -\hbar$ ha $m = -1$ esetnek
- a közepén lévő kör pedig a $L_z = 0$, $m = 0$ esetnek felel meg.

Következtetés:

a kitüntetett iránnyal az \vec{L} impulzusvektor nem zárhat be akármilyen szöget.

Pl.: $\vartheta_1 = ?$

$$\cos \vartheta_1 = \frac{L_z}{L} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \Rightarrow \vartheta_1 = 45^\circ$$

hasonlóan elvégezve a többi esetben is

$$\vartheta = 45^\circ \quad m = 1$$

$$\vartheta = 90^\circ \quad m = 0$$

$$\vartheta = 135^\circ \quad m = -1$$

IRÁNYKVANTÁLÁS : tetszőlegesen felvett iránnyal a rendszer impulzusmomentum-vektora nem zárhat be akármilyen szöget. (Nobel-díj az igazolásáért)

Határozatlanság itt is van! Ha ismert az \vec{L} vektor egy komponense, a többi (a másik kettő) már bizonytalan. A vektort jellemző 3 adatból (x, y, z) vagy (r, ϑ, φ) csak kettő határozható meg egyidejűleg.

Itt meghatároztuk r -t, ϑ -t, de φ határozatlan maradt. \Rightarrow **Az impulzusmomentum-vektor nem határozható meg teljes pontossággal!** (kivétel, ha $\vec{L}=0$)

Mi a helyzet centrális mezőben?

Ekkor L megmaradó mennyiség, mivel nincs forgatónyomaték.

A potenciális energia csak a centrumtól mért r távolság függvénye. $V(\vec{r}) = V(r)$

Ekkor \hat{E} és egy tetszőlegesen választott L impulzusmomentum-komponens-operátor, $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ felcserélhető. Ennek következménye: vannak szimultán sajátfüggvényei, sajátállapotaik egyszerre léteznek.

A korábbiakat is hozzávéve: $\hat{E}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ operátorok szimultán sajátfüggvényekkel rendelkeznek, azaz egyidejűleg meghatározottak a rendszerre nézve (de ekkor az x és az y komponens nem határozható meg, kivéve, ha $L=0$).

Ennek következménye: E, L^2 és L_z egyidejűleg meghatározott értékekkel rendelkeznek.

A sajátfüggvény alakja: $\varphi(\vec{r}) = f(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$, ahol $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ gömbfüggvényeket jelöl.

Ez bármilyen centrális mezőben igaz.

(Megjegyzés: klasszikus fizikában E és \vec{L} állandó a centrális mezőben).

A spin

1925. Goudsmit és Uhlenbeck: az elektron rendelkezik saját impulzusmomentummal (a pörgése miatt). Ez a SPIN. Jele: \vec{S}

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

\vec{J} : teljes impulzusmomentum
 \vec{L} : pálya impulzusmomentum
 \vec{S} : spin

Az impulzusmomentumra vonatkozó sajátérték egyenletnek a spinre is igaznak kell lennie:

$$\hat{S}^2 \cdot \phi = S^2 \cdot \phi$$

$$\hat{S}_z \cdot \phi = S_z \cdot \phi$$

Megoldás: (levezetés nélkül, csak a sajátértékekkel foglalkozva)

$$S^2 = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1) \quad \text{de } s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = \hbar \cdot m_s \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad \text{azaz } m_s = \frac{1}{2} \quad \text{és } m_s = -\frac{1}{2}$$

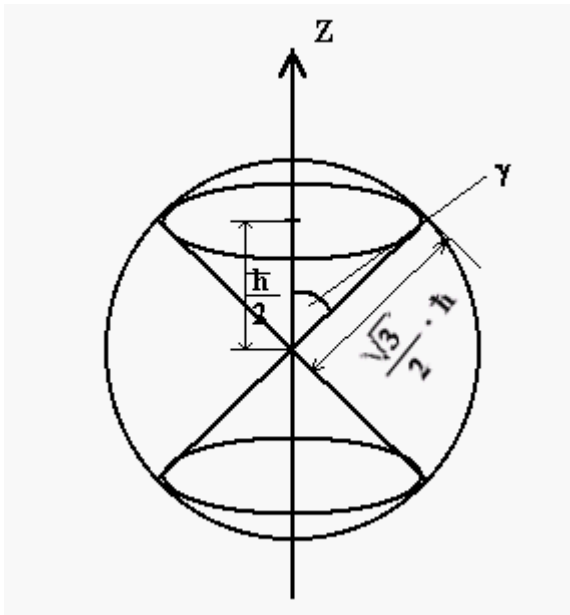
azaz kétféle beállítás létezik. A spinvektor nagysága behelyettesítéssel adódik:

$$S^2 = \hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad S = |\vec{S}| = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar$$

Továbbá

$$\cos \gamma = \frac{S_z}{S} = \left(\hbar \cdot \frac{1}{2} \right) \div \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar \right) = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Tehát a spinvektor függőlegessel bezárt szöge: $\gamma = \cos^{-1} \frac{\sqrt{3}}{3} = 54,7^\circ$



A kvantumszámok rendszere kiegészítendő egyelektronos atomok esetén:

n, l, m, ms

ms: SPINKVANTUMSZÁM. Tehát szigorúan véve nem a spin a kvantumszám, mert az mindig ugyanannyi, hanem a spin-vetület. Ennek felhasználásával:

$$S_z = \hbar \cdot m_s$$

$$m_s = \frac{1}{2} \quad \text{vagy} \quad m_s = -\frac{1}{2}$$

A nemrelativisztikus kvantummechanika nem tudja levezetni vagy megindokolni a spin létezését, de axiómaként ellentmondásmentesen bevezethető az elméletbe. A relativisztikus kvantumelméletből kijön a spin léte (a spin egy relativisztikus effektus). Nem az elektron forgásából származik, hanem egy elválaszthatatlan (veleszületett) tulajdonság.

A mágneses momentum

Az atommag körül keringő elektronnak nemcsak impulzuszmomentuma (perdülete), hanem mágneses momentum is van. Korábban láthattuk, hogy a köráram mágneses momentum:

$\vec{m} = I\vec{A} = IA\vec{n}$, ahol \vec{A} nagysága a körlap területe ($=r^2\pi$), iránya a jobbkéz-szabály szerint merőleges a körlapra, I pedig a keringő elektron által képviselt áram.

$$I = \frac{dq}{dt} = \frac{e}{T}$$

A későbbiekben \vec{M} legyen a jelölés

$$T = \frac{2r\pi}{v} \rightarrow \vec{M} = \frac{ev}{2r\pi} r^2\pi\vec{n} = \frac{ev}{2} r\vec{n}$$

Ezekkel a keringő elektron mágneses momentumának nagysága: $|\vec{M}| = \frac{evr}{2}$.

Tekintve, hogy az m_e tömegű klasszikus elektron perdületének nagysága: $L = m_e vr$,

$$\vec{M} = \frac{e}{2m_e} \cdot m_e vr\vec{n} = \frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Az elektronokra a negatív töltésük miatt természetesen \vec{m} és \vec{L} ellentétes irányú. Bár klasszikusan vezettük le, ez az összefüggés a kvantummechanika szerint is igaz marad, még akkor is, ha ott szó sincs keringésről. A z-komponensre hasonlóan kapjuk:

$$M_z = \frac{e}{2m_e} \cdot L_z; L_z = \hbar \cdot m$$

azaz

$$M_z = \frac{e\hbar}{2m_e} m, m = 0; \pm 1; \pm 2 \dots$$

Vezessük be a $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ ($\approx 9,27 \cdot 10^{-24} J/T$) **Bohr-magnetonnak** nevezett mennyiséget, ekkor az egyenlet egyszerűbbnek néz ki:

$$M_z = \mu_{BM}; m \in [-\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell]$$

azaz a mágneses momentum z-komponense is kvantált, legkisebb egysége tehát a Bohr-magneton.

A spin esetén a mérések (és a haladottabb elmélet szerint) más a helyzet, ugyanis a spinhez tartozó mágneses nyomaték kétszeres, tehát: $\vec{M}_s = \frac{e}{m_e} \cdot \vec{S}$.

A z komponensre:

$$M_s^z = \pm \mu_B = \pm \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \hbar = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \hbar \cdot 2 \cdot m_s = \frac{e}{m_e} \cdot \hbar \cdot m_s = \frac{e}{m_e} \cdot S_z.$$

tehát mágneses szempontból a spin "duplán számít". Az elektron teljes mágneses momentumát és annak z komponensét a vektorok, ill. a komponensek összeadásával kapjuk:

$$\vec{M} = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \vec{L} + \frac{e}{m_e} \cdot \vec{S}$$

$$M_z = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot L_z + \frac{e}{m_e} \cdot S_z = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot (L_z + 2 \cdot S_z)$$

Érdekesség:

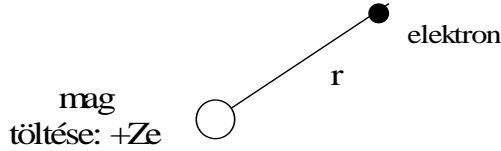
Kvantumelektrodinamikai korrekciók miatt a valóságban az elektron mágneses momentuma z irányú komponensének legkisebb értéke nem pontosan egyezik a Bohr-magnetonnal.

A pontos érték: $M_s^z = 1.001 159 652 18 \mu_B$

A kvantumelektrodinamikai elméleti számítás a kísérletileg mért értékkel 12 számjegyre megegyezik. Ez igen ritka pontosságot jelent.

Az egyelektronos atom kvantummechanikai modellje

(Ha $Z=1$, akkor Hidrogénatom, más esetben ion)



$$V(r) = -k \frac{Ze^2}{r}$$

(Vonzó kölcsönhatás esetén a Coulomb-potenciál negatív).

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a következő:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - k \frac{Ze^2}{r} \psi = E \psi;$$

A gömbszimmetria miatt úgy egyszerűbb kezelni a problémát, hogy az r , ϑ , φ gömbi polárkoordinátákra térünk át, tehát a hullámfüggvény új változói: $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$.

Ekkor persze a Laplace operátort is át kell transzformálni, ezt nem részletezzük.

A (stacionárius) megoldások a következő (szeparált) alakban állnak elő:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

ahol az n, l, m paramétereket kvantumszámoknak nevezik, az R radiális hullámfüggvény pedig a gömbfüggvényekhez hasonlóan bonyolult.

Az elektronok jellemzésére tehát nem célszerű a koordinátáikat és a sebességüket használni, ehelyett az ún. **kvantumszámokat** használjuk, amelyek a hullámfüggvény paraméterei. Később látni fogjuk, hogy a kvantumszámokkal a többielektronos atomok elektronjait is jellemezhetjük, de csak közelítőleg, mivel egzakt jelentésük csak az egyelektronos atomra (a H atomra) van:

n főkvantumszám: meghatározza az elektron energiáját (a Bohr modellel kapott képlet szerint):

$$E_n = -z^2 \cdot E^* \cdot \frac{1}{n^2},$$

ahol $E^* = 2,18 \text{ aJ}$ és $n=1, 2, 3, 4, \dots$ (az ezeknek megfelelő héjakat sokszor K, L, M, N, ... betűkkel jelölik). A főkvantumszám meghatározza azon felületek számát is, amelyeken a hullámfüggvény zérus értéket vesz fel (csomófelületek).

ℓ mellékvantumszám: meghatározza az elektron (pálya)impulzusmomentumának nagyságát:

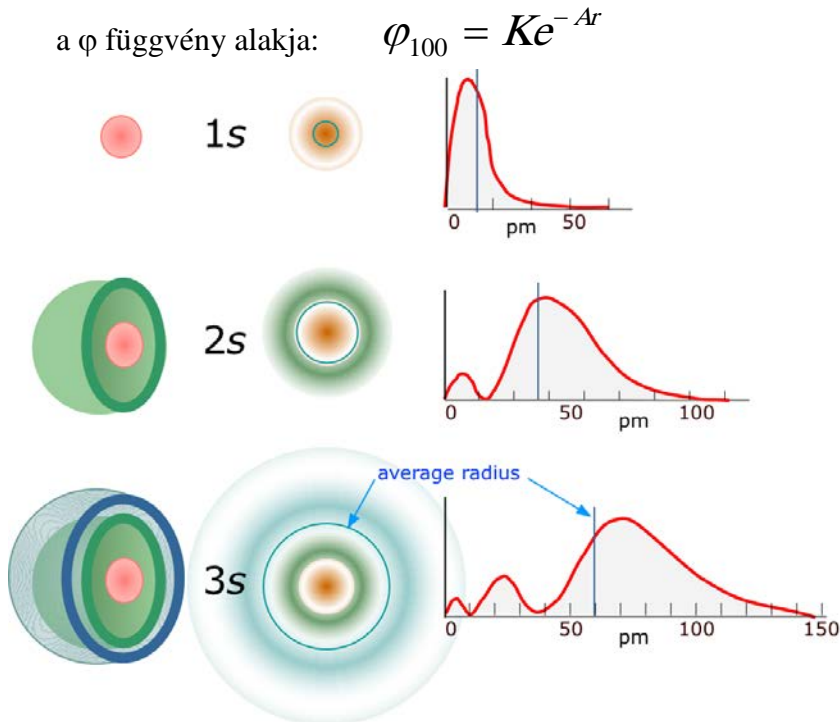
$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}, \text{ ahol } \ell \in [0, 1, \dots, n-1].$$

Ez határozza meg a „pálya”, az elektronfelhő szimmetriáját ($\ell = 0$ esetén gömbszimmetrikus, $\ell = 1$ -re inkább propellerhez hasonló). (A Bohr-modell $L = n\hbar$ feltevése tehát helytelen.) A könnyebb áttekinthetőség kedvéért az $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ alhéjakat sokszor az **s, p, d, f, ...** betűkkel jelölik.

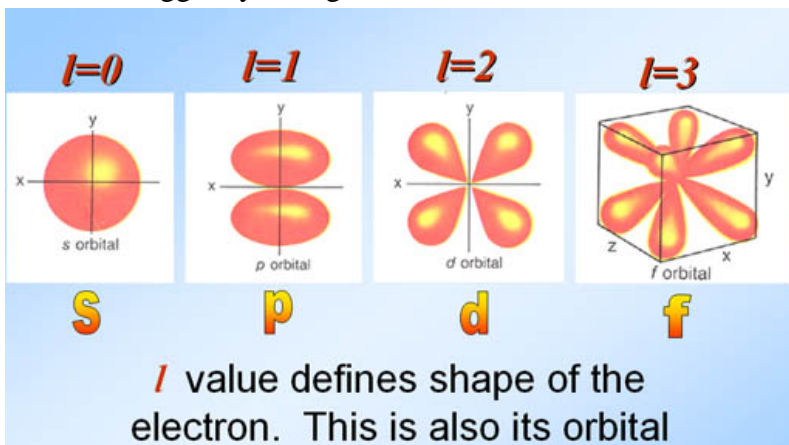
m : mágneses kvantumszám: meghatározza az elektron (pálya)impulzusmomentumának z irányú komponensét: $L_z = \hbar m$, ahol $m \in [-\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell]$. Ezáltal meghatározza a „pálya” irányítását,

pl. $\ell = 1$ -re a „propeller” nem állhat akármilyen irányban, csak néhány jól meghatározottban. Ez az iránykvantáltság a klasszikus mechanikához képest új elem.

m_s : spin-kvantumszám: meghatározza az elektron saját impulzusmomentumának z komponensét: $S_z = \hbar m_s$, ahol $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$. A saját impulzusmomentum az elektron belső tulajdonsága, a z tengelyhez képest kétféleképpen állhat és vetületének nagysága fele a pályamomentum minimális (de nem zérus) vetületének.



A többi függvény nem gömbszimmetrikus:



pl: $n = 1 \rightarrow l = 0 \rightarrow m = 0$ a hidrogén alapállapotban 0 impulzusmomentummal rendelkezik.

$n = 2 \rightarrow l = 0 \rightarrow m = 0$

vagy $l = 1 \rightarrow m = -1$

vagy $m = 0$

vagy $m = 1$, ez az állapot négyszeresen degenerált!

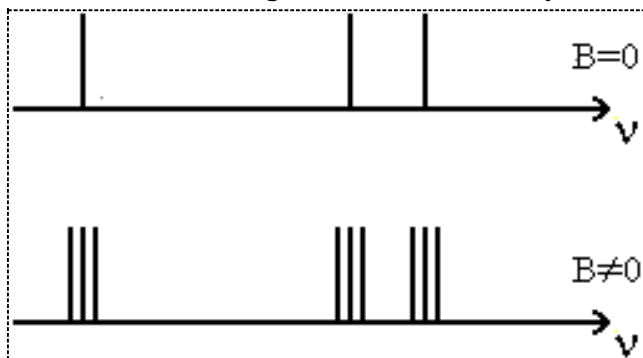
Az iránykvantáltság bizonyítékai

Korábban láttuk, hogy a mágneses momentum ugyanolyan módon kvantált, mint az impulzusmomentum, beleértve az iránykvantáltságot is. Viszont a mágneses momentum (ellentétben az impulzusmomentummal) egy jól mérhető mennyiség, mert kölcsönhat a mágneses mezővel. A kölcsönhatás energiája: $E_p = -\vec{m} \cdot \vec{B}$.

Ha a mágneses indukció a z tengely irányába mutat, akkor: $E_p = -m_z \cdot B = \mu_B \cdot B \cdot m$, ahol $m \in [-\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell]$ egész szám. A mágneses energia adagosságát két alapvetően különböző kísérlet is igazolja: a Zeeman-effektus és a Stern-Gerlach kísérlet.

A Zeeman-effektus

Megfigyelés: A mágneses mezőbe helyezett atom színképvonalai felhasadnak.



Magyarázat: mágneses tér hiányában az atomi energiaszintek nem függenek a mágneses kvantumszámtól, (homogén vagy inhomogén) mágneses térben azonban igen.

Az $E_p = -\vec{m} \cdot \vec{B}$ mágneses energia, ami az m mágneses kvantumszám előjelének megfelelően

negatív és pozitív is lehet: $E_p = \mu_B \cdot B \cdot m$, vagyis a mágneses mező eltolja, felhasítja az eredeti szinteket. A foton kibocsátása során – amikor az atomi elektron alacsonyabb energiaszintre kerül - a mágneses kvantumszám vagy nem változik, vagy eggyel változik, tehát

$\Delta E_p = 0$ vagy $\pm \mu_B \cdot B$. Ezen átmenet során kibocsátott foton frekvenciája $f = \Delta E/h$, ennek

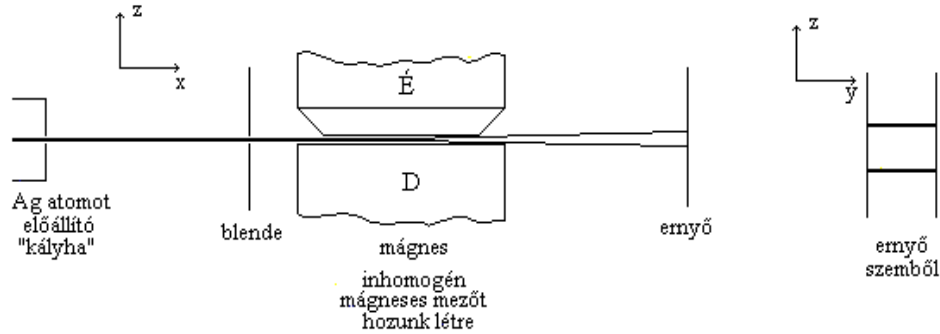
eltolódása a mágneses mezőbe helyezett atom esetében $\Delta f = 0$ vagy $\pm \frac{\mu_B \cdot B}{h}$ lehet. A színképvonalak ebben a modellben tehát háromfelé hasadnak. Ha egy olyan elektront tekintünk, amelynek nincs pályamomentuma, csak spinje, akkor a kétféle spin-beállítás két különböző energiát jelent.

Megjegyezzük, hogy ez a Zeeman-effektus legegyszerűbb formája, általános esetben az elektronok spinje nagyon megbonyolítja a folyamatot.

Stern-Gerlach kísérlet

Ez a kísérlet már közvetlen bizonyítékkal szolgált az iránykvantálásra. A kísérlet során egy "kályhát" használunk ami Ag atomokat állít elő. Ezt az "atom sugarat" inhomogén mágneses mezőn vezetjük át és azt tapasztaljuk hogy a sugár két részre hasad vagyis az ernyőn két foltot látunk, holott a klasszikus mechanika szerint egy elmosódott foltot kellene látnunk. Fontos hogy atomokat eresztünk át a mágneses mezőn és nem elektronokat, hiszen ebben az esetben az elektronok körpályára állnának a két mágneses pólus között. A kísérlet elvi rajzát az alábbi ábrákon láthatjuk. A felvett irányok tetszőlegesek, a mi esetünkben a kis koordináta rendszerek jelölik ezeket.

Inhomogén mágneses téren áthaladó atomnyaláb több (pl. két) elkülönült ágra szakad. Az inhomogén mezőt az ábrán különleges alakú mágneses pólusokkal hozzák létre. Az atomnyaláb közepén az elrendezés szimmetriasíkjában halad.



Magyarázat: inhomogén mágneses mezőben a mágneses momentumokra irányításuktól függően erő hat:

$$\vec{F} = -\nabla \cdot E_p = \nabla \vec{m} \vec{B}$$

Figyelembe véve, hogy a nyaláb helyén a mágneses indukció fölfelé (a z tengely irányába) mutat

$$F_z = -\mu_B \cdot m \cdot \frac{\Delta B}{\Delta z}$$

és ebben az irányban is változik leginkább: $F_z = -\mu_B \cdot m \cdot \frac{\Delta B}{\Delta z}$. A vízszintesen induló atomokra tehát annyiféle függőleges eltérítő erő hathat, ahányféle mágneses kvantumszámuk lehet. Ez pedig az atomnyaláb m db ágra szakadását jelenti.

A kísérletet először ezüst atomokkal végezték el. Az ezüst atomban a lezárt héjakon kívül csak egy db (5s) elektron van, melyre $n=5$, $\ell=0$. Ennek a pálya-impulzusmomentuma 0, de a spinje $\frac{1}{2}$, amely kétféleképp állhat be $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Ez az erő képletében csak annyi változást jelent, hogy az m helyébe $2m_s = \pm 1$ írandó (mert a spinhez tartozó mágneses nyomaték kétszeres), tehát

$$F_z = \pm \mu_B \cdot \frac{\Delta B}{\Delta z}$$

Ennek megfelelően az ezüstnyaláb a kísérletben két ágra szakadt szét.

Kvantumstatistikák

Azonos részecskék:

pl.: Egy atom tartalmaz N db elektront, hullámfüggvénye: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N)$

Az atomban felcserélünk két elektront: 1. \leftrightarrow 2. akkor a hullámfüggvény: $\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_N)$

Két elektron felcserélése semmilyen mérhető fizikai mennyiségre nem lehet semmilyen hatással. Matematikailag csak abban nyilvánulhat meg a felcserélés, hogy Ψ kap egy egységnyi abszolút értékű $e^{i\alpha}$ fázisszorozót

$$\left(\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)\right)^2 = \left(\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)\right)^2 \Rightarrow \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_N) = e^{i\alpha} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N); \quad \text{azaz } |e^{i\alpha}| = 1$$

Ha most visszacseréljük a két elektront.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N) = e^{i\alpha} \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_N) = \underbrace{(e^{i\alpha})^2}_1 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_N),$$

tehát $e^{i\alpha} = \pm 1$. Tehát elvi szinten két lehetőség van, vagy változik az előjel, vagy nem. A valóságban mindkét lehetőség megvalósul, attól függően, milyen részecskéről van szó.

1. ha $e^{i\alpha} = 1$ akkor a hullámfüggvény **szimmetrikus** a 2. részecske felcserélésére.
 \Rightarrow **bozonok**, a spinvetületük \hbar egész számú többszöröse. (Pl.: fotonok, egyes atomok, pl. He).
2. Ha $e^{i\alpha} = -1$ akkor a hullámfüggvény **antiszimmetrikus** a két részecske felcserélésére.
 \Rightarrow **fermionok** spinvetületük $\frac{\hbar}{2}$ illetve $-\frac{\hbar}{2}$ lehet (pl.: elektron, proton, neutron).

A fermionokra, így az elektronra is érvényes a Pauli elv, melynek általános alakja:

A természetben csak antiszimmetrikus elektronállapotok valósulnak meg.

Az állítást indirekt bizonyítjuk. Tegyük fel, hogy két elektron ugyanabban az állapotban van:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots) = \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_3, \dots)$$

De az antiszimmetria miatt

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots) = -\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_3, \dots)$$

Vagyis a hullámfüggvény egyenlő önmaga mínusz egyszerezésével, ami csak úgy lehetséges, hogy a függvény azonosan nulla, vagyis ilyen rendszer nulla valószínűséggel létezik. Bármely két változóra különböznie kell a függvénynek, mert különben az antiszimmetria nem teljesül.

A klasszikus-, a Bose-Einstein- és a Fermi-Dirac statisztika

Emlékeztető

A **fázistér** egy olyan absztrakt tér, amely a hely- és sebességkoordinátákból van „összerakva”. Tömegpont háromdimenziós mozgása esetén 3+3 időfüggetlen adat írja le a tömegpont aktuális állapotát. Ezt a 6 adatot, mely leírja a mozgást, ábrázolhatjuk egy hatdimenziós koordináta-rendszer egy pontjaként. Tehát a fázistérben a dinamikai rendszer összes lehetséges állapotai szerepelnek, méghozzá a rendszer minden egyes lehetséges állapota a fázistér egyetlen pontjának feleltethető meg.

A Boltzmann statisztika alapfeltevései voltak:

1. Az azonos részecskék megkülönböztethetők.
2. A fáziscella tetszőlegesen kicsire választható (azaz a fázistér egymáshoz tetszőlegesen közel lévő pontjai megkülönböztethetők).
3. Egy cellában tetszőlegesen sok részecske elhelyezhető.

A kvantummechanikának mindhárom alapfeltevéssel szemben ellentétei vannak:

1 \leftrightarrow A mikrorészecskék megkülönböztethetetlenek

Nem hordoznak ismertetőjegyeket, nem követhető a pályájuk

$$2 \leftrightarrow \Delta\Omega = \Delta U \Delta V = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \cdot \Delta x \Delta y \Delta z = \Delta p_x \Delta x \cdot \Delta p_y \Delta y \cdot \Delta p_z \Delta z \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^3$$

$$\text{mivel } \Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}. \text{ Tehát}$$

$$\Delta\Omega \geq \frac{\hbar^3}{8} \quad \text{a fáziscella nem lehet tetszőlegesen kicsi.}$$

3. Igaz a szimmetrikus hullámfüggvényű részecskékre (bozonokra) Bose-Einstein statisztika igaz rájuk

Nem igaz az antiszimmetrikus hullámfüggvényű részecskékre (fermionokra)
Fermi-Dirac statisztika igaz rájuk

pl.: 2 részecske 3 cellában: Hány lehetőség van?

Boltzmann	Bose-Einstein	Fermi-Dirac
ab	**	*
		*
a b	*	*
b a	*	*
a		
		**
b		
a		
b		
a		
b		

Ezekből itt nem részletezett módon adódnak az **eloszlásfüggvények**. Legyen Z_i a fáziscellák száma az E_i állapotban.

Boltzmann: $N_i = \frac{Z_i}{A} e^{-\frac{E_i}{k \cdot T}}$ (A : a részecskeszámra vonatkozó mellékfeltételből számolható)

Bose-Einstein:
$$N_i = \frac{Z_i}{A \cdot e^{\frac{E_i}{k \cdot T}} - 1}$$

Fermi-Dirac:
$$N_i = \frac{Z_i}{A \cdot e^{\frac{E_i}{k \cdot T}} + 1}$$

ahol az A állandó a hőmérséklettől függ, az egyes eloszlásokra külön számítható.

Megjegyzések:

1, Ha az exponensben nagy szám szerepel, akkor $A \cdot e^{\frac{E_i}{k \cdot T}} \gg 1$, azaz a három statisztika ugyanarra az eredményre vezet. Ebben az esetben a kvantumstatisztikák tartanak a klasszikushoz.

A klasszikus (Boltzmann) akkor jó közelítés, ha E_i elég nagy, és a részecskék nincsenek nagyon sűrűn. Most már érthető, hogy miért adott helyes eredményt a Boltzmann statisztika nem túl szélsőséges állapotú gázokra. Tehát a nagy energiás állapotok mindhárom statisztika szerint kb. ugyanúgy vannak betöltve, ezért az egyszerűbb Boltzmann statisztikát lehet használni. Az eloszlás nagyenergiás részét Boltzmann-faroknak is nevezik.

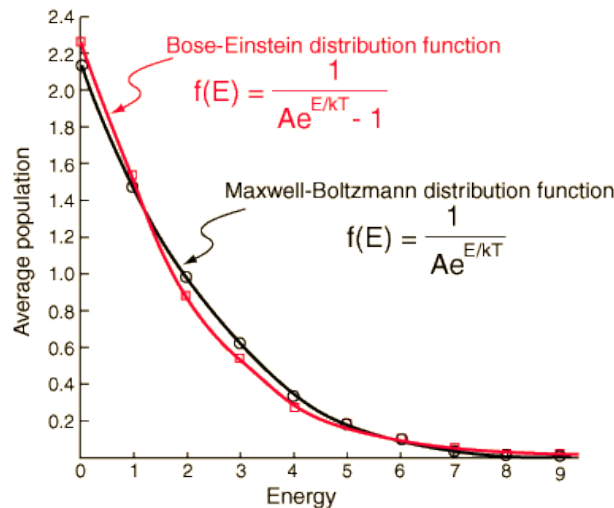
2, Ha E_i kicsi vagy igen nagy a sűrűség, akkor nem alkalmas a Boltzmann statisztika (a gáz nem tekinthető ideálisnak - *elfajult gáz*)

Az atomok **Bose-kondenzációja**: Igen alacsony hőmérsékleten az összes atom egyetlen (energia)fáziscellába rakható. Ez a 90-es évek atomfizikájának igen lényeges eredménye. Lényegében a Bose kondenzáció témakörébe tartozik néhány makroszkopikusan is megnyilvánuló kvantummechanikai effektus: a szuperfolyékonyság és a szupravezetés.

2. Bose–Einstein-statisztika alkalmazása fotongázra

A fotonok egymástól megkülönböztethetetlenek, egy fáziscellába tetszőleges számú kerülhet.

Nincs részecskeszám megmaradás előírva (keletkezhetnek, eltűnhetnek szabadon). Ez utóbbi következménye, hogy $A = 1$. (bizonyítás nélkül)

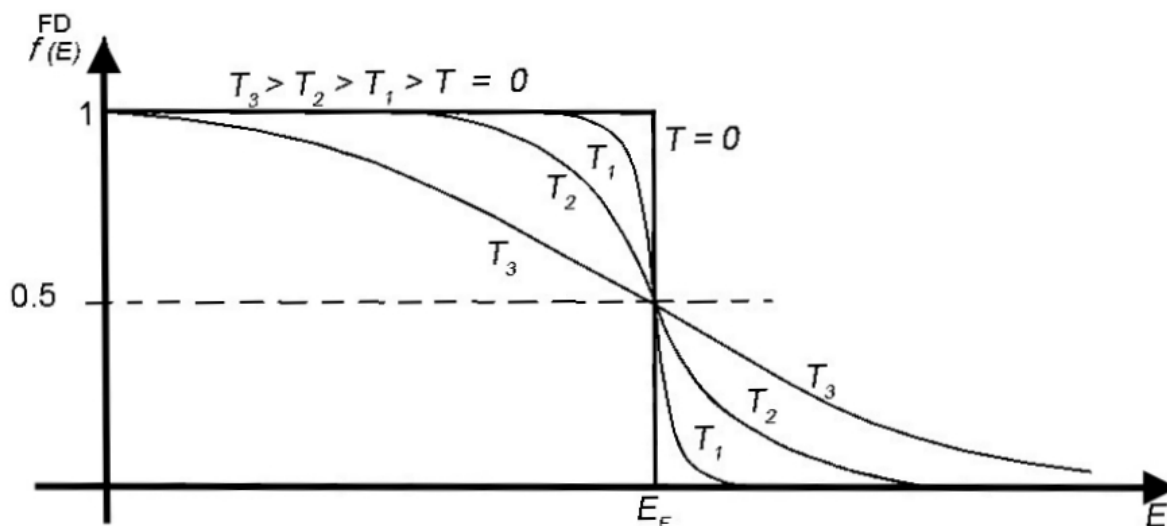


3. Fermi-Dirac-statisztika alkalmazása "elektrongázra"

Itt a részecskeszámra vonatkozó mellékfeltételből kijön, hogy $A = e^{-E_F/kT}$, így kapjuk

$$\frac{N_i}{z_i} = \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{k \cdot T}} + 1}$$

Itt E_F neve: **Fermi-energia**. Az összefüggésből látszik, hogy N_i / z_i nulla és egy közé esik, vagyis egy fáziscellában maximum egy részecske lehet (adott spinvetülettel), tehát ez egy betöltési **valószínűség**. A Fermi-eloszlás grafikonja különböző hőmérsékletekre:



E_F -nél a fáziscellák éppen 50%-a van betöltve. $T \rightarrow 0$ esetben a Fermi-szint alatti állapotok mind betöltve, fölötte üresek. Az elektronok többségének az energiája nem változik a hőmérséklettel.

Következmény:

A fémek fajhőjéhez a szabad elektronok csak elhanyagolható járulékot adnak.

(pl.: 1000K -nél a járulék 2 %)

A fémekben lévő szabad (vezetési) elektronokra **nem érvényes az ekvipartíció tétele**, legfeljebb azzal a megkötéssel, hogy az elektronok többségének nincs szabadsági foka.

Összefoglalás: A fizikában három kategóriát használnak a részecskék leírására:

- Klasszikus részecskék:** megkülönböztethetők, egy fáziscellában tetszőlegesen sok lehet, Boltzmann-statisztika.
- Bozonok:** Megkülönböztethetetlen részecskék, egy fáziscellában tetszőlegesen sok lehet, szimmetrikus a hullámfüggvényük, Bose-Einstein statisztika érvényes. Ezek felelősek a kölcsönhatások közvetítéséért, őket nevezhetjük a világ építőkövei közötti ragasztónak vagy habarcsnak.
- Fermionok:** Megkülönböztethetetlen részecskék, egy fáziscellában csak két részecske lehet ellentétes spinnel, antiszimmetrikus a hullámfüggvényük, Fermi-Dirac statisztika érvényes. Ezeket nevezik a világ építőköveinek („két téglát nem lehet egy helyen”).

Alkalmazás: paramágneses szuszceptibilitás

Helyhez kötött atomok lezártan belső elektronhéjaiból adódó mágneses momentumokat vizsgálunk. Feltételezzük, hogy a szuszceptibilitás kicsi, ezért a B mágneses indukciót $\mu_0 H$ -val közelítjük. Egy \vec{m} momentum energiája a H külső térben ekkor

$$E = -\mu_0 \vec{m} \vec{H}$$

Az egyszerűség kedvéért vizsgáljuk a spinmágnesesség esetét, vagyis amikor két lehetséges beállása van a mágneses momentumnak. Az egyik energiája a külső tér nélküli állapothoz képest pozitív, a másik negatív. Ha a külső tér felfelé mutat:

$$E_{\uparrow} = E_0 - \mu_0 m H \quad \text{és} \quad E_{\downarrow} = E_0 + \mu_0 m H$$

Mivel helyhez kötött, azaz megkülönböztethető részecskékről van szó, a Boltzmann statisztikát alkalmazzuk. A két energiaszint betöltési számai:

$$N_{\uparrow} = \frac{1}{A} e^{-\frac{E_{\uparrow}}{kT}} \quad \text{és} \quad N_{\downarrow} = \frac{1}{A} e^{-\frac{E_{\downarrow}}{kT}}$$

de $N_{\uparrow} + N_{\downarrow} = N$, ahol N az összes momentumok száma, ami állandó, vagyis

$$A = \frac{e^{-\frac{E_{\uparrow}}{kT}} + e^{-\frac{E_{\downarrow}}{kT}}}{N}$$

Behelyettesítés után az E_0 kiesik, így:

$$N_{\uparrow} = \frac{N}{e^{\frac{\mu_0 m H}{kT}} + e^{-\frac{\mu_0 m H}{kT}}} e^{\frac{\mu_0 m H}{kT}} \quad \text{és} \quad N_{\downarrow} = \frac{N}{e^{\frac{\mu_0 m H}{kT}} + e^{-\frac{\mu_0 m H}{kT}}} e^{-\frac{\mu_0 m H}{kT}}$$

A rendszer eredő mágneses momentuma:

$$\sum \vec{m} = N_{\uparrow} \vec{m} - N_{\downarrow} \vec{m}$$

ahol \vec{m} egy atom felfelé álló mágneses momentuma. A mágnesezettség:

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum \vec{m} = \frac{\vec{m}}{V} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) = \frac{\vec{m}}{V} N \frac{e^{\frac{\mu_0 m H}{kT}} - e^{-\frac{\mu_0 m H}{kT}}}{e^{\frac{\mu_0 m H}{kT}} + e^{-\frac{\mu_0 m H}{kT}}} = \frac{N}{V} \vec{m} \cdot \text{th} \frac{\mu_0 m H}{kT}$$

Ahol th a tangens hiperbolikus függvény: $\text{th}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$

Tegyük most fel, hogy gyenge a tér, pontosabban $\mu_0 m H \ll kT$. Ekkor az exponenciális függvény sorba fejtésénél csak első rendig megyünk el, azaz $e^x \approx 1 + x$. Ezzel a közelítéssel

$$\text{th}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \approx \frac{1 + x - 1 + x}{1 + x + 1 - x} = x$$

vagyis azt kapjuk, hogy

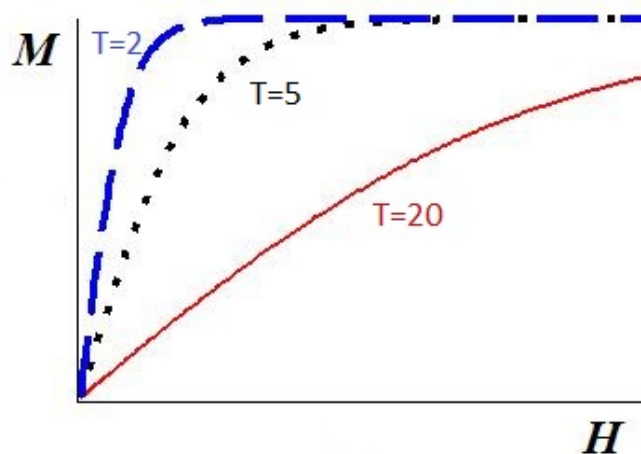
$$\vec{M} \approx \frac{N}{V} \vec{m} \cdot \frac{\mu_0 m H}{kT}$$

Azaz kis terekre megkaptuk a lineáris anyagegyenletet: $M = \chi H$, ahol a szuszceptibilitás a Curie-törvény szerint fordítottan arányos a hőmérséklettel:

$$\chi = \mu_0 \frac{N m^2}{V kT}$$

Az is megjegyzendő, hogy a szuszceptibilitás egyenesen arányos a mágneses momentum nagyságának négyzetével, tehát szuperparamágneses nanorészecskéknél jóval nagyobb, mint paramágneses atomoknál.

Másfelől, ha a tér erős, az $e^{\frac{\mu_0 m H}{kT}}$ tagok elhanyagolhatóvá válnak, ekkor a mágnesezettség konstanshoz tart. Ez azt jelenti, hogy ekkor a rendszer telítetté válik, lényegében az összes momentum a tér irányában áll.

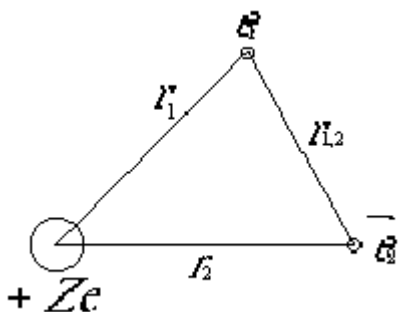


Ha nem azt tételeztük volna fel, hogy kétféle momentum-beállítás van, hanem azt, hogy a kettő között folytonosan bárhogy beállhatnak a momentumok, kvalitatíve akkor is nagyon hasonló eredményeket kaptunk volna.

A többelektronos atomok

Az egyelektronos atomra elméleti úton egzakt eredmény kapható. A többelektronos atomok kellően pontos leírása viszont a kvantummechanika legnehezebb problémái közé tartozik. E leírás, különösen nagy rendszámú atomok esetén, csak hatékony közelítő módszerekkel lehetséges. Látni fogjuk, hogy a legáltalánosabban használt közelítésben egy atom minden elektronját egy-egy, a H-atom elektronjának leírásakor már bevált kvantumszám-négyessel írjuk le.

Már a kételektronos atom esete is csak numerikus közelítéssel oldható meg, de tetszőleges pontossággal.



Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2)\varphi - k \frac{Ze^2}{r_1}\varphi - k \frac{Ze^2}{r_2}\varphi + k \frac{e^2}{r_{1,2}}\varphi = E\varphi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2)\varphi \quad \text{kinetikus energia}$$

$$-k \frac{Ze^2}{r_1}\varphi - k \frac{Ze^2}{r_2}\varphi \quad \text{a mag és elektron kölcsönhatás}$$

$$-k \frac{e^2}{r_{1,2}}\varphi \quad \text{elektron – elektron kölcsönhatás}$$

Még több elektron esetén sokkal több tag van a Hamilton-operátorban:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i - ke^2 Z \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} + ke^2 \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i>j}}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \varphi = E\varphi$$

ahol

$$\varphi = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad \varphi: \text{ a helykoordináták függvénye}$$

3N darab változó szerepel a függvényben. Például vas esetén N=26.

Ha egy-egy változó 100 pontjában tároljuk a függvényértékeket (ennyi a megfelelő pontossághoz feltétlenül szükséges), akkor összesen

$$100^{3N} = 100^{3 \cdot 26} = 100^{78} \rightarrow 10^{156} \text{ darab}$$

függvénypontról van szó.

Mekkora számítógép kell ennyi adat tárolásához ?

$$1 \text{ kg} \approx 10^{26} \text{ atomból áll}$$

$$1 \text{ naprendszer} \approx 10^{30} \text{ kg}$$

$$1 \text{ galaxis} \approx 10^{11} \text{ naprendszer}$$

$$1 \text{ világ} \approx 10^{11} \text{ galaxist tartalmaz}$$

$$\text{tehát } 1 \text{ világ} \approx 10^{78} \text{ atomból áll}$$

Mivel egy függvényérték tárolásához legalább egy atom kell (sőt belátható időn belül egynél jóval több), ezért ekkora számítógép elvileg sem építhető, és még nem is beszéltünk arról, hogy differenciáloperátorokat kellene hattanítani erre a függvényre. Tehát átlagos atomméret esetén pusztán numerikus közelítő módszerrel nem oldható meg a probléma. **Másfajta, hatékonyabb, fizikai alapokon álló közelítés szükséges !**

Közelítés egyrészecske hullámfüggvényekkel (független részecske közelítés). A hullám fgv-t egyrészecske hullámok szorzataként képzeljük el.

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \dots \varphi_N(\vec{r}_N)$$

Ezt a függvényt már könnyebben tudjuk tárolni. Így ha egy darab φ -t $100^3=10^6$ ponton ábrázolunk, az összesen $N \cdot 10^6$ pont. A számítás azonban nem egyszerű.

A közelítésben a Schrödinger-egyenlet szétesik N darab különálló egyenletre.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta_i - ke^2 Z \frac{1}{r_i} + ke^2 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \varphi_i(\vec{r}_i) = E\varphi_i(\vec{r}_i)$$

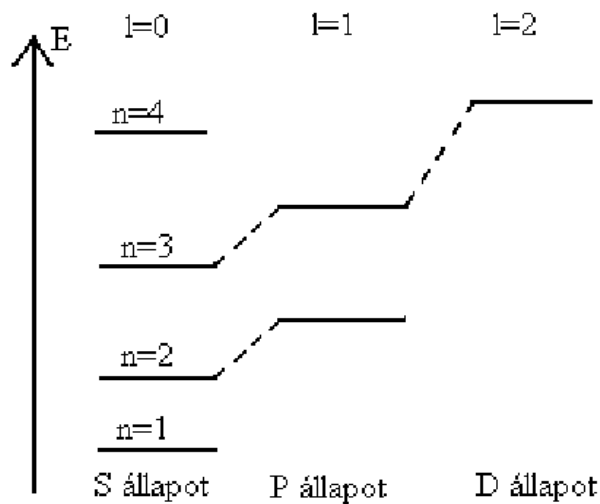
Itt nem részletezett módszerrel az egyenlet numerikusan megoldható. Az eredmény: néhány százalékra pontos energiaértékek kaphatók. A legfontosabb változás, hogy

az energia most már a főkvantumszám mellett a mellékvantumszámtól is függ. Konkrétan, ugyanazon n-re ℓ -lel növekszik az energia:

$$E_{n,l} < E_{n,l+1}$$

Ez azt jelenti, hogy a kvantumszámok jelentése módosul egy kicsit.

Oka: Ha több elektron van, a belső elektronok taszítják a külsőket, vagyis leárnyékolják számukra az atommag vonzását, ezért a potenciális energia abszolút értékben csökken. A magasabb l értékű elektronok pályája távol van a gömbszimmetriától, ezek az elektronok átlagosan távolabb vannak a magtól és így jobban érzik a leárnyékolást, tehát a mag Coulomb-vonzása csökken, a potenciális energia abszolút értékben csökken, az össz-energia nő.



Látható, hogy ez a függés nem elhanyagolható, hanem olyan mértékű, hogy a nagyobb főkvantumszámú elektronnak kisebb lehet az energiája:

$$E(2s) < E(2p) < E(3s) < E(3p) < E(4s) < E(3d)$$

A teljes sorrend, nagyobb betűmérettel jelölve a sorban hátrébb csúszott állapotokat:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p

Megjegyzés: ma már ezreléknél is pontosabb közelítések is vannak, amelyek számos itt nem tárgyalt hatást is figyelembe vesznek. Ezek ismertetése meghaladja e tárgy kereteit.

A periódusos rendszer

A következő törvényeket tekintetbe kell vennünk:

- Pauli elv:** (független részecske közelítésben) ugyanazzal a n, l, m, m_s kvantumszám négyessel nem rendelkezhet két elektron egy atomon belül.
- Energiaminimumra** való törekvés, azaz a létező energiaszintek alulról kezdve töltődnek fel.
- Hund-szabály:** azonos energiájú szintek közül a térbelileg különbözőek töltődnek be először. Így vannak az (egymást elektrosztatikusan taszító) elektronok a legmesszebb egymástól. Ráadásul az eredő spinvetület maximális, tehát az elektronok először különböző mágneses és megegyező spinkvantumszámmal kerülnek az atomba, ahogy ez az alábbi táblázatban is látható pl. a nitrogén sorára tekintve.

Elem	Elektronkonfiguráció	Utolsó elektron kvantumszámjai	Eredő spin vetülete
------	----------------------	--------------------------------	---------------------

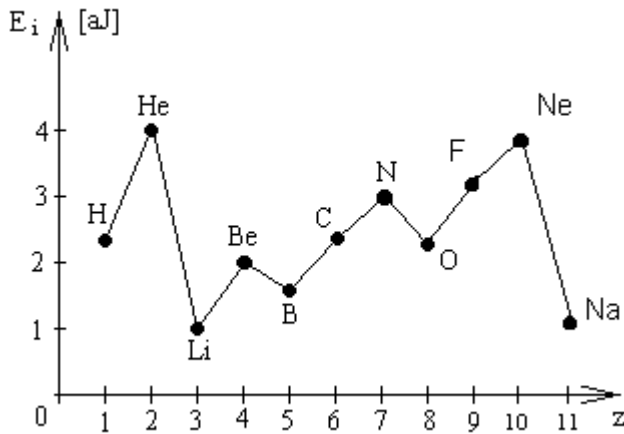
		n	l	m	m_s	
H	1s	1	0	0	pl.: 1/2	1/2
He	(1s) ²	1	0	0	-1/2	0
Li	(1s) ² 2s	2	0	0	1/2	1/2
Be	(1s) ² (2s) ²	2	0	0	-1/2	0
B	(1s) ² (2s) ² 2p	2	1	1	1/2	1/2
C	(1s) ² (2s) ² (2p) ²	2	1	0	1/2	1
N	(1s) ² (2s) ² (2p) ³	2	1	-1	1/2	3/2
O	(1s) ² (2s) ² (2p) ⁴	2	1	1	-1/2	1
F	(1s) ² (2s) ² (2p) ⁵	2	1	0	-1/2	1/2
Ne	(1s) ² (2s) ² (2p) ⁶	2	1	-1	-1/2	0
Na	(1s) ² (2s) ² (2p) ⁶ 3s	3	0	0	1/2	1/2

PERIÓDUS CSOPORT	s-elemek		AZ ELEMELK PERIÓDUSOS RENDSZERE																p-elemek					
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	VIII	VIII	I	II	III	IV	V	VI	VII	0						
K	1 1,01 H 1 Hidrogén		relatív atomtömeg ————— 26,98 vegyjel ————— Al ³ ₈ ² rendszám ————— 13 ————— az elektronok eloszlása az energiaszinteken Alumínium																					4,00 He 2 Hélium
L	2 6,94 Li 3 Lítium	9,01 Be 4 Berillium																	10,81 B 5 Bór	12,01 C 6 Szén	14,01 N 7 Nitrogén	16,00 O 8 Oxigén	19,00 F 9 Fluor	20,18 Ne 10 Neon
M	3 22,99 Na 11 Nátrium	24,31 Mg 12 Magnézium																	26,98 Al 13 Alumínium	28,09 Si 14 Szilícium	30,97 P 15 Foszfor	32,07 S 16 Kén	35,45 Cl 17 Klór	39,95 Ar 18 Argon
N	4 39,10 K 19 Kálium	40,08 Ca 20 Kalcium	44,96 Sc 21 Szakádium	47,90 Ti 22 Titán	50,94 V 23 Vanádium	52,00 Cr 24 Krom	54,94 Mn 25 Mangán	55,85 Fe 26 Vas	58,93 Co 27 Kobalt	58,71 Ni 28 Nikkel	63,55 Cu 29 Réz	65,39 Zn 30 Cink	69,72 Ga 31 Gallium	72,59 Ge 32 Germánium	74,92 As 33 Arzén	78,96 Se 34 Szelén	79,90 Br 35 Brom	83,80 Kr 36 Kripton						
O	5 85,47 Rb 37 Rubídium	87,62 Sr 38 Stroncium	88,91 Y 39 Ittrium	91,22 Zr 40 Cirkónium	92,91 Nb 41 Niobium	95,94 Mo 42 Molibdén	98,91 Tc 43 Technécium	101,07 Ru 44 Ruténium	102,91 Rh 45 Ródium	106,4 Pd 46 Palládium	107,87 Ag 47 Ezüst	112,41 Cd 48 Kadmium	114,82 In 49 Indium	118,71 Sn 50 Ón	121,75 Sb 51 Antimon	127,60 Te 52 Tellúr	126,90 I 53 Jód	131,30 Xe 54 Xenon						
P	6 132,91 Cs 55 Cézium	137,33 Ba 56 Bárium	178,49 Hf 72 Háfínium	180,95 Ta 73 Tantál	183,85 W 74 Volfurám	186,21 Re 75 Rénum	190,2 Os 76 Ozmium	192,22 Ir 77 Iridium	195,09 Pt 78 Platina	196,97 Au 79 Arany	200,59 Hg 80 Higany	204,37 Tl 81 Tallium	207,2 Pb 82 Ólom	208,98 Bi 83 Bizmut	209 Po 84 Polónium	210 At 85 Asztácium	222 Rn 86 Radon							
Q	7 223 Fr 87 Francium	226,03 Ra 88 Rádium	89-103 Rf 104 Raterfordium	Ha 105 Hanium	Unh 106 Unnihexium	Uns 107 Unniseptium	Uno 108 Unnoctium	Une 109 Unnennium	*Az elemek ideiglenes elnevezése -104 Rf–Rutherfordium – 104 Ku–Kurtschatovium -105 Ha–Hanium – 105 Ns–Nielsbohrium															
LANTANOIDÁK			138,91 La 57 Lantán	140,12 Ce 58 Cérium	140,91 Pr 59 Prazeodímium	144,24 Nd 60 Neodímium	145 Pm 61 Promethium	150,4 Sm 62 Szamárium	151,96 Eu 63 Europium	157,25 Gd 64 Gadolómium	158,93 Tb 65 Terbium	162,50 Dy 66 Diszprózmium	164,93 Ho 67 Holmómium	167,26 Er 68 Erbium	168,93 Tm 69 Tulium	173,04 Yb 70 Itterbium	174,97 Lu 71 Lutécium							
AKTINOIDÁK			227,03 Ac 89 Aktínium	232,04 Th 90 Tórium	231,04 Pa 91 Protaktínium	238,03 U 92 Urán	237,05 Np 93 Neptúnium	244 Pu 94 Plutónium	244 Am 95 Americium	247 Cm 96 Kürium	247 Bk 97 Berkélium	251 Cf 98 Kalifornium	254 Es 99 Einsteinium	257 Fm 100 Fermium	258 Md 101 Mendelévium	259 No 102 Nobelium	260 Lr 103 Laurencium							

Ha tehát (képzeletben) a +Ze töltésű atommaghoz egyesével adagoljuk az elektronokat, akkor az első elektron a legkisebb energiájú, azaz az 1s állapotba megy ($n=1, l=0, m=0$ és pl. $m_s=1/2$). A második elektron még mehet az 1s állapotba, mert $m_s=-1/2$ is lehet. A harmadik elektron már nem „fér be” az $n=1$ állapotba, ezért az eggyel magasabb energiájú, az $n=2$ főkvantumszámú állapotba fog menni. Számoljuk össze, hogy ez az állapot hányféle kvantumszám kombinációban tölthető be, azaz hány elektron „fér el rajta”. Ha $n=2$, akkor l kétféle értéket vehet fel: 0 és 1. Ezen belül $l=0$ -ra $m=0$, mivel m_s -nek két lehetséges értéke van, ez két lehetőség. $n=2, l=1$ -re m háromféle lehet -1, 0 és 1, a spin miatt kétféle szorozva 6 lehetőség, azaz összesen 8 lehetséges kombináció. Tehát az $n=2$ főkvantumszámú héjon max. 8 elektron lehet, azaz összesen 8 olyan kémiai elem

lehetséges, amelynek legkülső elektronja az L héjon van. A periódusos rendszerre pillantva láthatjuk, hogy az első sorban valóban 2, a másodikban 8 elem van.

Ha az energia nem függne a mellékkvantumszámtól, akkor a harmadik sorban már 18 elem lenne, mert az argon után elkezdené betöltődni a 3d alhéj. Viszont a valóságban a 4s alhéj mélyebb energiájú, tehát az argon után ismét egy, a nátrimhoz hasonló viselkedésű alkálifém, a kálium következik.



E_i ionizációs potenciál: az az energia, amellyel a leglazábban kötött elektron leszakítható a semleges atomból.

Az ionizációs potenciál, mint a legtöbb atomi tulajdonság a rendszámnak periodikus függvénye. Ezek a tulajdonságok a legkülső elektrontól függenek.

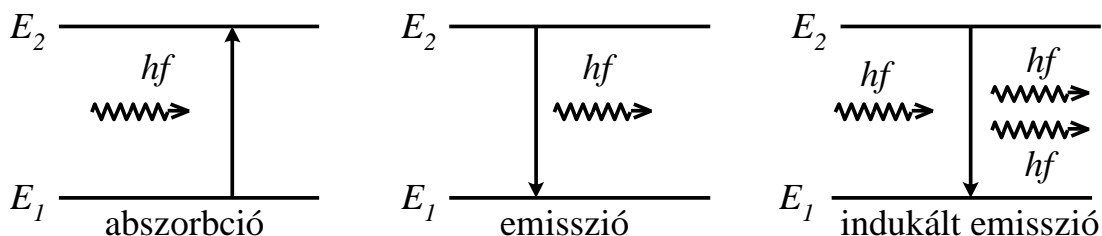
A lézer (levelezőn egy tétel)

Indukált emisszió

Az atomokban az elektronok diszkrét energiákkal rendelkeznek, és energiaminimumra törekszenek. Mint ismeretes, abszorpció folyamata során az atom elnyel egy fotont, és ennek következtében az egyik elektronja egy alacsonyabb energiájú állapotból egy magasabb állapotba kerül. A gerjesztett állapot élettartama általában $\sim 10^{-8}$ s, az úgynevezett metastabil állapotoké $\sim 10^{-3}$ s. A fordított folyamatot spontán emisszióknak nevezzük, ekkor az elektron magától egy alacsonyabb energiaállapotba kerül, és az atom kibocsát egy ennek megfelelő energiájú fotont:

$$E_2 - E_1 = hf$$

Einstein 1916-ban megjósolt egy harmadik folyamatot, az indukált emissziót. Ilyenkor az atom gerjesztett állapotban van, és elhalad mellette egy olyan energiájú foton, amit ő maga is ki tudna bocsátani. Ez a foton indukálhatja, hogy az atom gerjesztettsége megszűnjön emisszió révén.



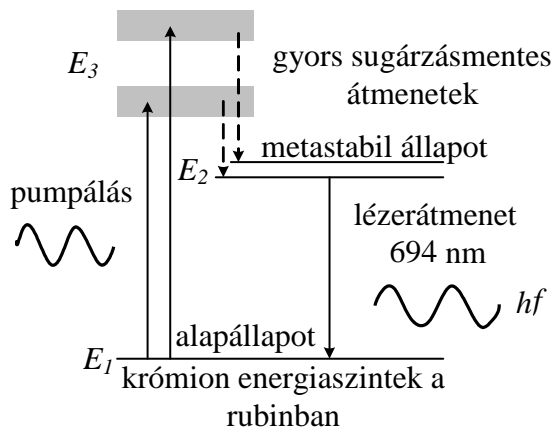
Az abszorpció, az emisszió, és az indukált emisszió jelensége

A keletkező foton az eredetivel megegyező frekvenciájú, vele azonos irányban halad, fázisuk azonos, tehát úgy is tekinthető, mintha az eredeti foton megduplázódott volna. Az ilyen tulajdonságú fotonok koherensek.

A lézer működése

A lényeg tehát, hogy most már egy foton helyett kettő van, tehát a fény erősödött. Angolul *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, ami azt jelenti, hogy fényerősítés indukált emisszió révén, az első betűkből származik a LASER, magyarul lézer. Azonban annak is van esélye, hogy a foton egy olyan atommal találkozik, ahol az elektron E_1 állapotban van. Ekkor abszorpció jön létre, az elektron E_2 állapotba kerül, a fény gyengül. Ha több elektron van E_1 -ben, mint E_2 -ben (és általában, egyensúlyi eloszlás esetén ez a helyzet), akkor átlagosan több foton nyelődik el, mint gerjesztődik, nem jön létre erősítés. Tehát el kell érni, hogy az E_2 gerjesztett állapotú atomok száma nagyobb legyen, mint az E_1 alapállapotúaké - ezt *inverz populációnak*, vagy *populáció-inverzió*nak nevezik – és ekkor lesz az indukált emisszió valószínűsége nagyobb, mint az abszorpcióé: egy nem-egyensúlyi eloszlást, populáció-inverziót kell létrehozni. Ezt úgy érik el, hogy valamilyen módon többlet energiát pumpálnak a rendszerbe és felhasználnak más nívókat (pl. E_3 energiaszint) is.

Példa: Rubinlézer (szilárdtest lézer). Anyaga krómoxiddal szennyezett alumínium oxid, a mesterségesen növesztett egykristályból hengert csiszolnak. Nagyintenzitású fényimpulzussal gerjesztik az E_3 nívót, ezután úgynevezett sugárzásmentes átmenet történik 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, azaz rövid impulzusokban bocsájtja ki a fényt.



A rubinlézer működésének vázlatja az energiaszintek segítségével

Gyakran használják még a He-Ne gázlézert is, amely folytonos üzemű.

A lézerfény tulajdonságai:

nagyfokú monokromatikusság (a fotonok frekvenciája lényegében megegyezik),

kismértékű divergencia (széttartás),

nagyfokú térbeli és időbeli koherencia,

nagy felületi teljesítménysűrűség (lencsével 10^{-8} m²-es felületre fókuszálható),

nagy spektrális teljesítménysűrűség (mivel egy adott frekvenciára koncentrálódik az összes energia).

Lézerek alkalmazásai:

megmunkálás, fúrás, ponthegesztés,

műtéti beavatkozás, sebészet retina ponthegesztés,

génsebészet,

vonalkód leolvasó berendezés,

CD-DVD lemezjátszó lézer olvasófej,
interferencián alapuló hosszúság, és sebességmérés,
holográfiára alkalmas fényforrás, (Gábor Dénes: holográf = teljes kép).