Az anyag hullámtermészete: de Broglie-hipotézis, hullámcsomag, fázis- és csoportsebesség, elektron-interferencia

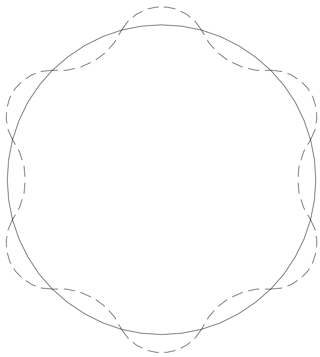
***Az anyag hullámtermészete* (de Broglie (1923))**

Láttuk, hogy foton lendülete és energiája a: $p = \frac{h}{\lambda}$ és $E = hf$ képletekkel számítható. Ezek a képletek minden más részecskére is igazak, azaz minden anyagi részecskéhez λ és f rendelhető:

$\lambda = \frac{h}{p}$ **és** $f = \frac{E}{h}$

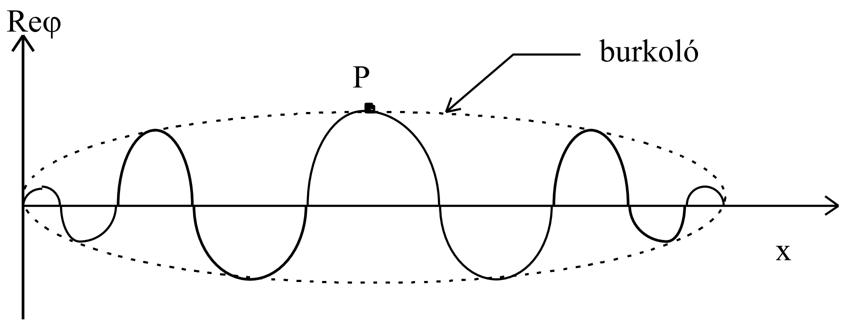
Az atomban olyan stacionáris elektronpályák lehetségesek, ahol a λ egész számszor fér rá a kerületre. Ezt a tapasztalat igazolja.

$2r\pi = n\frac{h}{mv} = n\lambda$, az ábrán $n = 6$



Ne egyetlen síkhullámot rendeljünk a részecskéhez, hanem hullámcsomagot.

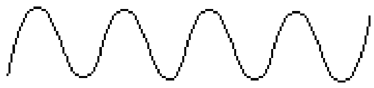
A hullámtanból ismert, hogy két igen közeli frekvenciájú hullám összetevése lebegést eredményez. Végtelen sok szinuszhullámból véges hosszúságú hullámvonulat (véges számú lebegés) is felépíthető.



A hullámcsomagot igen sok közeli frekvenciájú sima hullám összegzésével kapjuk de Broglie bizonyítja, hogy – bár a fázissebesség irreálisan nagy - a hullámcsomag burkolója elméletileg pontosan a részecske sebességével halad, tehát a kép ellentmondásmentes.

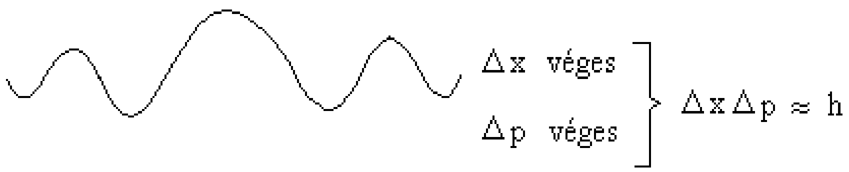
Megjegyzés:

a, Ha csak egyetlen szinuszhullámom van akkor a felhasznált hullámszámtartomány nyilvánvalóan nulla és a hullám végtelen kiterjedésű. Ez az objektum tisztán hullámtulajdonságú.



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

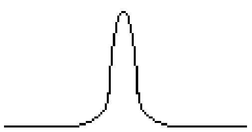
b, Ha véges nagyságú hullámszám tartományból építkezek (Δk_1), akkor hullámcsomagot kapok véges Δx_1 kiterjedéssel



Minél nagyobb hullámszámtartományból építem fel a hullámcsomagot, az annál keskenyebb lesz. Azaz, ha $\Delta k_2 > \Delta k_1$, akkor $\Delta x_2 < \Delta x_1$, vagy másképpen

$\mathbf{\Delta k_1 \cdot \Delta x_1 \cong \Delta k_2 \cdot \Delta x_2}$ ($\cong 1$)

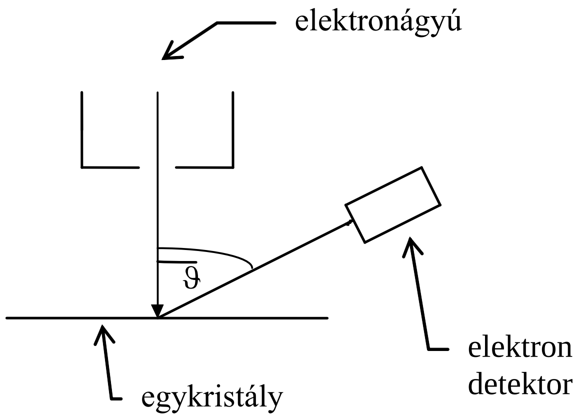
c, Határesetben (ha Δk igen nagy, sőt $\Delta k \to \infty$), akkor Δx igen kicsi (sőt $\Delta x \to 0$). Ez a jól lokalizált

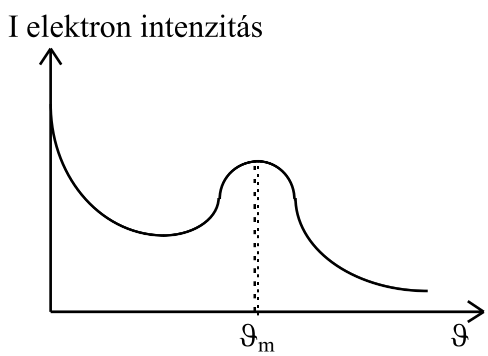


A korábbi tisztán hullám (a,) és tisztán részecske (c,) kép helyébe a kvantumelmélet az általánosabb hullámcsomagot (b,) hozza, amelynek az a, és c, eset csak határátmenetei.

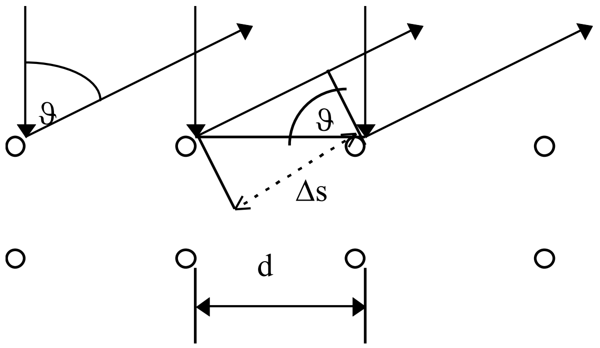
Kisérleti bizonyítékok az elektron hullámtermészetére

Davisson-Germer kisérlet / 1927 /
G. P. Thomson / 1928 /
A kísérletet Davissonék végezték, a magyarázat G. P. Thomson érdeme.



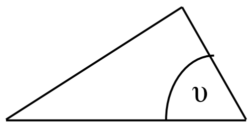


Adott energiájú elektronokat Ni egykristályon szóratva egy adott szórási szögnél intenzitás maximumot mérünk. Ennek magyarázata az elektron hullámok interferenciájának figyelembe vételével lehetséges.



a körök atomok a kristályban (természetes rács), a rácsállandó *d*.

A két szomszédos atomon szórt elektron hullám akkor erősíti egymást, ha az útkülönbségük a hullámhosszuk egész számú többszöröse: $\Delta s = n\lambda$



A fenti háromszög adataiból: $\frac{\Delta s}{d} = \sin\vartheta$ Az erősítés feltétele: $\Delta s = d\sin\vartheta = n\lambda$

A de Broglie képletből: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$ $\boxed{\sin\vartheta_m = \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d\sqrt{2mE}}}$

A tényleges adatok d=0,2158 nm, ϑ_m =50°, E=54 eV és n=1 /ebben a kísérletben/, ami igen jól egyezett a fenti képlettel

Határozatlansági reláció, kapcsolat a hullámcsomaggal, zérusponti energia

<u>A Heisenberg-féle határozatlansági reláció (1926)</u>

Az egymáshoz tartozó fizikai mennyiségek - mint pl. a hely- és lendületkoordináták (*x* és p_x, *y* és p_y, *z* és p_z), továbbá az *E* energia és a *t* idő - nem mérhetők egyidejűleg teljesen pontosan. Ha Δ az adott fizikai mennyiség mérési bizonytalansága (egészen pontosan a mérési adatok szórása), akkor

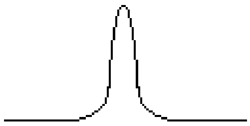
$$\left.\begin{aligned} \Delta x\Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y\Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z\Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta E\Delta t &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}\right\} \text{Heisenberg féle határozatlansági összefüggés}$$

Ahol ħ=h/(2π). Ezek az egyenletek szoros kapcsolatban vannak az előző fejezetben bemutatott hullámcsomag modellel. Ugyanis k=2 π /λ, p=h/ λ, tehát p= ħ k és Δp= ħ Δk

Ebből pedig $\Delta p_1 \cdot \Delta x_1 \cong \Delta p_2 \cdot \Delta x_2 \cong \hbar$ következik. (A pontos kvantummechanikai levezetés a fenti képletekben még egy ½-es faktort is behozott.)

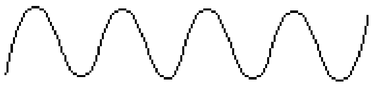
A határozatlansági reláció igen szépen mutatja, hogy a makrofizikai fogalmak a mikrovilág leírására csak korlátozottan alkalmasak. A kapható válasz pontosságát a kísérleti körülmények eleve behatárolják. Egy fizikai mennyiség mérési pontosságának nem lesz elvi határa, ha a kísérleti körülményeket meg tudjuk úgy választani, hogy a mért mennyiség párja a mérés során határozatlan marad.

A jól lokalizált részecske esetében tehát a helykoordináta (pl. az x) pontos, de cserébe a p_x lendület koordináta ismeretlen marad

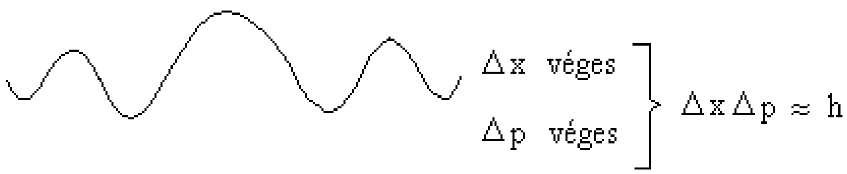


$$\Delta x \approx 0 \Rightarrow \Delta p_x \to \infty$$

Hullámszerű objektum esetében nincs lokalizáció ($\Delta x \to \infty$), de cserébe pontosan ismert a hullámhossz és ezáltal p_x is



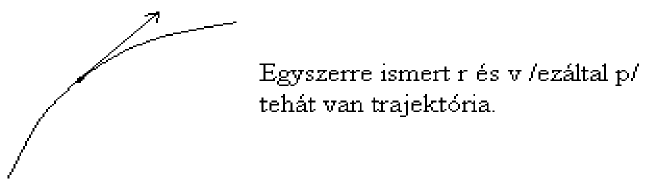
Közbülső esetben /gyakorlatban a részecskék ilyenek/ mind a hely-, mind a lendületkoordináta véges pontossággal ismert:



<u>A határozatlansági relációk néhány következménye:</u>

1. ***<u>A pályavonalak kérdése:</u>***

A klasszikus fizika szerint a részecskéknek van pályavonala, mert egyszerre ismert a helyük és a sebességük. Nézzük, hogy mit szól ehhez a kvantumelmélet a makroszkopikus (pl. a mákszem ill. ettől nagyobbak) és a mikroszkopikus (pl. atomi elektron) részecskék esetében!



A, mákszem pl. $m = 10^{-6}$ kg

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

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

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

Azonban ez nem igazi megszorítás, mert nincs olyan műszer amivel ilyen pontosan lehetne sebességet mérni. Tehát a mákszemnek van pályavonala. Természetesen minden tőle nagyobb részecskének, azaz **minden makroszkopikus részecskének is van pályavonala a kvantumelmélet szerint is.**

B,

$$\Delta x \cong 10^{-10}\,\mathrm{m}\ \text{(atom mérete)}$$
$$m \cong 10^{-30}\,\mathrm{kg}\ \text{(elektron tömege)}$$
$$\Delta v_x \cong \frac{10^{-34}}{10^{-10}\cdot 10^{-30}} = 10^{6}\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$$

A H atomban az elektron sebessége ebbe a nagyságrendbe esik a klasszikus fizika szerint. Ha a mérési bizonytalanság a mérési eredmény nagyságrendjébe esik, ill. azt meghaladja, akkor a mérés nem vezet eredményre. Az atomi elektron sebességkoordinátái tehát nem mérhetőek, róluk egy fizikus ezért nem beszélhet.

Végkövetkeztetés: Az atomban az elektron mozgása méréssel nem követhető, tehát nincs pályavonala. (Semmiféle mérés nem igazolhatja tehát azt az ősi elképzelést, hogy az elektron keringene az atommag körül. Ezt is el kell feledni!)

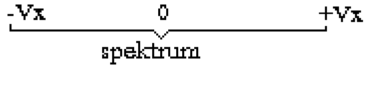
<u>2, Zérusponti energia</u>

<u>(avagy abszolút zérus fokon van-e a részecskéknek mozgási energiája a kvantumelmélet szerint. Azt tudjuk, hogy a klasszikus fizika szerint zérus kelvinen a mozgási energia is zérussá válik.)</u>

Határozatlansági képlet:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$
$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$
$$\Delta x \cdot m \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2}$$
$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x}$$

Kérdés, hogy a kinetikus energiának milyen értéknél kell nagyobbnak lennie.
<u>Megjegyzés:</u> a különböző részecskéknek különböző sebességük van, tehát van spektruma.



Mi lehet az x koordináták szórása ? $\underline{\Delta v_x \sim v_x}$

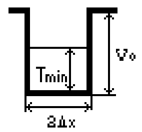
A szórás nagyságrendileg egyezik a középértéktől való maximális eltéréssel. (ettől kisebb)

A kinetikus energia 1 dimenzióban:

$$T_{kin.} = \frac{1}{2} m v_x^{2} = \frac{1}{2} m \Delta v_x^{2} \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$$

Példa:

Csapda



Klasszikus esetben az érkező részecske "beleesik".

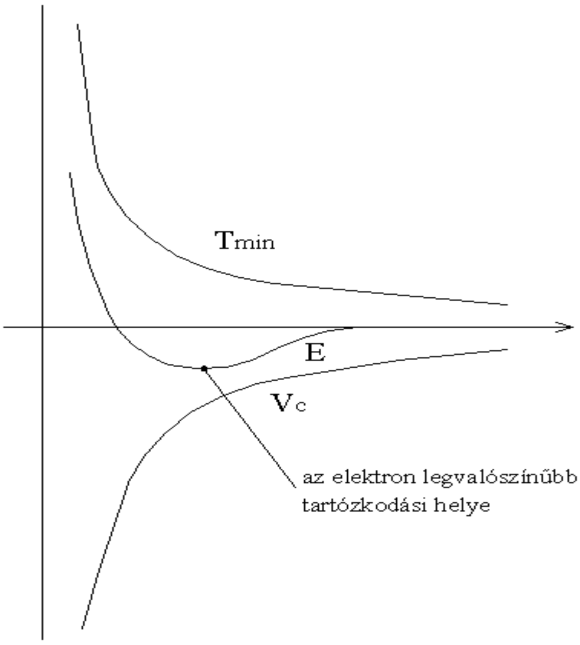
$$T_{kin.} \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$$

Az a legkisebb energia, amivel a részecske a gödörben rendelkezik, zérusponti energia. Hűtéssel nem vehető el a rendszertől. (Semmilyen más módon sem vehető el.)

Helyhez kötött részecskének tehát abszolút zérus fokon is marad mozgási energiája.

Ha viszont szabad a részecske ($\Delta x \to \infty$), akkor a kvantumelmélet szerint is megáll zérus kelvin hőmérsékleten.

3.) Hidrogén atom:



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

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

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

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

Tehát az elektron nem azért nem zuhan be az atommagba, mert kering körülötte, hanem azért, mert nagyon megnőne a „kvantumos nyüzsgésének” az energiája. **Az elektron abban a távolságban fog leginkább tartózkodni, amelyben az energia összege a legkisebb lesz.**