

Fábián László  
Szatmári Sándor

# ATOMFIZIKAI ALAPISMERETEK HÉJFIZIKA

Bragg

Debye-Scherrer

Lau

Bohr

Pauli

Sommerfeld

LÉNÁRD

Rayleigh  
Jeans

Thomson

Heisenberg

Planck

Rutherford

Wien



EFOP-3.4.3-16-2016-00014

SZÉCHENYI 2020

SZTE TERMÉSZETTUDOMÁNYI ÉS INFORMATIKAI KAR  
FIZIKAI INTÉZET

# ATOMFIZIKAI ALAPISMERETEK HÉJFIZIKA

SZERZŐK:

**Dr. Fábrián László**  
*adjunktus*

**Dr. Szatmári Sándor**  
*egyetemi tanár*

LEKTORÁLTA:  
**Dr. Nánai László**  
*professor emeritus*

Jelen tananyag a Szegedi Tudományegyetemen készült az Európai Unió támogatásával. Projekt azonosító: EFOP-3.4.3-16-2016-00014.

Technikai szerkesztő:

**DAJKA RITA**  
*tudományos segédmunkatárs*

Szegedi Tudományegyetem  
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.  
[www.u-szeged.hu](http://www.u-szeged.hu)  
[www.szechenyi2020.hu](http://www.szechenyi2020.hu)



MAGYARORSZÁG  
KORMÁNYA

SZÉCHENYI 2020

Európai Unió  
Európai Szociális  
Alap



BEFEKTETÉS A JÖVŐBE

## Tartalomjegyzék

<b>1. Az anyag atomos szerkezete</b> .....	1
1.1 Az atomfogalom fejlődése .....	1
1.2 Kísérleti bizonyítékok .....	2
1.3 Az Avogadro-állandó meghatározása .....	3
1.4 Az atomok mérete .....	9
1.5 A röntgensugárzás előállítása és tulajdonságai .....	15
1.6 Az atomok térfogatának meghatározása röntgendiffrakció alapján.....	18
1.7 Az elektromágneses színek áttekintése .....	25
1.8 Ellenőrző kérdések.....	26
1.9 Feladatok.....	26
<b>2. Az elektromosság kvantált tulajdonságai</b> .....	28
2.1 Az elektrolízis .....	28
2.2 Katódsugarak .....	29
2.3 Az elemi töltés meghatározása.....	30
2.4 Az elektron fajlagos töltése.....	33
2.5 A fajlagos töltés meghatározása.....	35
2.6 Az elektron tömege .....	38
2.7 Ellenőrző kérdések.....	41
2.8 Feladatok.....	41
<b>3. Ionok, tömegspektrometria</b> .....	42
3.1 Szabad ionok keletkezése.....	42
3.2 Csősugarak.....	44
3.3 A Thomson-féle parabolamódszer .....	45
3.4 Tömegspektrográfok .....	46
3.5 Izotópok .....	49
3.6 Izotópok szétválasztása .....	51
3.7 Ellenőrző kérdések.....	52
3.8 Feladatok.....	53
<b>4. Atommodellek</b> .....	54
4.1 A Thomson-féle atommodell .....	54
4.2 Katódsugarak szórása, a Lenard-féle atommodell .....	55
4.3 A Rutherford-féle atommodell.....	55
4.4 Ellenőrző kérdések.....	59
4.5 Feladatok.....	60

## Tartalomjegyzék

---

<b>5. A sugárzás kvantumossága: a fotonok</b> .....	61
5.1 Kirchhoff törvénye .....	61
5.2 A fekete test .....	63
5.3 A Planck-féle sugárzási törvény .....	66
5.4 Magas hőmérsékletű testek mérése .....	67
5.5 Ellenőrző kérdések .....	68
5.6 Feladatok .....	68
<b>6. Fényelektromos jelenségek</b> .....	69
6.1 A fotonhipotézis, a fényelektromos jelenség .....	71
6.2 A fotoeffektus kísérleti igazolása .....	72
6.3 Egyéb fényelektromos jelenségek .....	74
6.4 Alkalmazások .....	75
6.5 A fékezési sugárzás .....	75
6.6 A karakterisztikus röntgensugárzás .....	76
6.7 Ellenőrző kérdések .....	77
6.8 Feladatok .....	77
<b>7. A fény kettős természete</b> .....	78
7.1 A Compton-effektus .....	78
7.2 A fénynyomás .....	81
7.3 Az optikai Doppler-effektus .....	82
7.4 A fény kettős természete .....	83
7.5 A mikrorészecskék kettős természete, anyaghullámok .....	85
7.6 Ellenőrző kérdések .....	86
7.7 Feladatok .....	86
<b>8. A Bohr-féle atommodell</b> .....	87
8.1 A Franck-Hertz-féle elektronütközési kísérletek .....	88
8.2 A hidrogénatom Bohr-féle modellje .....	90
8.3 A Bohr-Sommerfeld-modell .....	93
8.4 Ellenőrző kérdések .....	95
8.5 Feladatok .....	95
<b>9. Egyszerű kvantummechanikai rendszerek</b> .....	97
9.1 A kvantummechanika kialakulása .....	97
9.2 A Schrödinger-egyenlet .....	98
9.3 Egyszerű rendszerek Schrödinger-egyenlete .....	99
9.4 A hidrogénatom hullámmechanikai modellje .....	105
9.5 A Heisenberg-féle határozatlansági relációk, hullámcsoportok .....	108
9.6 Ellenőrző kérdések .....	110
9.7 Feladatok .....	110

<b>10. Atomi színeképek és értelmezésük .....</b>	<b>111</b>
10.1 Az alkáli fémek spektruma.....	111
10.2 Spektrumok multiplicitása és az elektronspin.....	114
10.3 Atomok mágneses és elektromos térben .....	119
10.4 Ellenőrző kérdések .....	122
<b>11. Többelektronos atomok.....</b>	<b>123</b>
11.1 Kíséleti eredmények.....	123
11.2 A termék rendszerezése a vektormodell alapján .....	125
11.3 Az atom mágneses momentuma.....	129
11.4 A Zeeman-effektus.....	132
11.5 Ellenőrző kérdések.....	133
11.6 Feladatok.....	134
<b>12. A röntgenspektrumok.....</b>	<b>135</b>
12.1 A karakterisztikus sugárzás.....	135
12.2 Ellenőrző kérdések.....	142
<b>13. A Pauli-elv és a periódusos rendszer.....</b>	<b>143</b>
13.1 A Pauli-elv .....	143
13.2 A periódusos rendszer értelmezése .....	145
13.3 Ellenőrző kérdések.....	150
<b>14. A molekulaszpektrumok .....</b>	<b>152</b>
14.1 A molekula energia nívói .....	152
14.2 A spektrumok értelmezése .....	154
<b>15. A sugárzás kvantummechanikai elméletéről, a spektrumvonalak intenzitása .....</b>	<b>157</b>
15.1 Az atomok stacionárius és átmeneti dipólusmomentuma .....	158
15.2 Az <i>Einstein</i> -féle átmeneti valószínűségek.....	159
15.3 A spektrumvonalak intenzitása .....	163
<b>Felhasznált irodalom .....</b>	<b>164</b>
<b>Ábrák forrásmunkái.....</b>	<b>164</b>

## 1. Az anyag atomos szerkezete

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri az atomfizika kialakulásának legfontosabb mérföldköveit és az anyagszerkezetre vonatkozó alapvető fogalmakat,
- képes értelmezni és magyarázni az atomok létezésére vonatkozó kísérleteket és azok következményeit,
- elfogadja és vizsgálata során szem előtt tartja az anyagok atomos szerkezetére vonatkozó bizonyítékokat.

Jelen fejezetben röviden ismertetjük az atomfogalom fejlődésének legfontosabb állomásait, a tudományterületet megalapozó kísérleteket, valamint a későbbiekben elengedhetetlen jelentőséggel bíró elektromágneses spektrum részletesebb ismertetésére is gondot fordítunk.

A tárgyalás során felhasználjuk a korábbi tanulmányaink során szerzett termodinamikai ismereteket.

### 1.1 Az atomfogalom fejlődése

Az ókori görög filozófusok közül Leukipposz és Demokritosz (*i.e.* 4. sz.) munkái említik először az atom (*atomosz, oszthatatlan*) fogalmát. Egyebek mellett azt állították, hogy az anyagok sok kicsi, tovább oszthatatlan, elpusztíthatatlan egységekből állnak. Az ő elméletük továbbfejlesztője volt Epikurosz (*i.e.* 3. sz.), aki már tömeget ill. térfogatot is tulajdonított ezeknek az atomoknak. Az *i.e.* 2. sz.-tól az *i.sz.* 17. sz. közepéig gyakorlatilag semmi fejlődés nem történt ezen a téren.

Az 1600-as évek közepén *Robert Boyle* (1627-91) vezette be a „kémiai elem” és a „kémiai vegyület” fogalmakat, mely szerint minden anyag különböző nagyságú és alakú atomokból épül fel. *Joseph L. Proust* (1754-1826) állította fel az *állandó súlyviszonyok* törvényét (1794), mely szerint egy kémiai vegyület mindig az összetevők meghatározott tömegarányú keverékéből áll, függetlenül attól, hogy jött létre az a vegyület. Pl. tetszőleges mennyiségű víz tömegének 8/9-e mindig oxigén, 1/9-e hidrogén. *William Prout* (1785-1850) 1815-ben publikálta elméletét, mely szerint a kémiai elemek tömege a hidrogén tömegének egész számú többszöröse. Habár ez a hipotézis később pontosabb mérések szerint megdőlt, *Rutherford* többek közt az ő tiszteletére nevezte el az általa felfedezett részecskét *proton*nak.

A *többszörös súlyviszonyok* törvényét *John Dalton* (1766-1844) fogalmazta meg 1804-ben. Állítása az volt, hogy az elemeket alkotó atomok azonosak, de különböznek más elemek atomjaitól. Ha két elem (*A és B*) több különböző módon alkothat vegyületet, akkor egy adott tömegű *A* elem esetén a különböző vegyületekben megjelenő *B* elem tömegei úgy aránylanak egymáshoz, mint kis egész számok. Pl. 100 g szén reagálhat 133 g oxigénnel, létrehozva egy vegyületet, ugyanakkor 266 g oxigénnel is, létrehozva egy másikat. Ebben a két esetben a

reagáló oxigén mennyiségének tömegaránya  $133:266 = 1:2$ . A két vegyület természetesen a szén-monoxid és a szén-dioxid.

Mivel a Dalton-törvény csak tömegarányokra vonatkozik, a referencia tetszőlegesen választható. Maga Dalton minden atomtömeget a hidrogén, mint a legkönnyebb atom tömegéhez viszonyított. Ő ezt a relatív tömeget *atomsúlynak* nevezte, bár ez csak egy relatív, dimenziótlan mennyiség.

Az atomsúlyok pontos meghatározását *Jörg Jakob Berzelius (1779-1848)* kezdte 1814-ben. Manapság ez a definíció nem használatos, helyette a  $^{12}\text{C}$  atomot használjuk referenciaként, valamint az atomsúly fogalmát felváltotta az *atomi tömeg egység (atomic mass unit (AMU))*:

$$1 \text{ AMU} = \frac{1}{12} (^{12}\text{C}) = 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (1-1)$$

A *Mikhail Lomonosov (1711-65)* és *Antoine Lavoisier (1743-94)* által felfedezett *tömegmegmaradás törvényével* együtt a fenti elméletek és kísérletek jelentik a *szttöchiometria* alapjait, ill. a modern atomfogalom kialakulásának kezdetét.

## 1.2 Kísérleti bizonyítékok

1805-ben *Joseph Louis Gay-Lussac (1778-1850)* és *Alexander von Humboldt (1769-1859)* felfedezték, hogy az oxigén és hidrogén térfogatának aránya állandó nyomáson mindig ugyanakkora volt, amikor ezek vizet alkotva reakcióba léptek egymással. *Például:  $2 \text{ dm}^3 \text{ H}_2$  és  $1 \text{ dm}^3 \text{ O}_2$  reakciójaként  $2 \text{ dm}^3$  vízgőz keletkezett, valamint  $1 \text{ dm}^3 \text{ H}_2$ -ből és  $1 \text{ dm}^3 \text{ Cl}_2$ -ből  $2 \text{ dm}^3 \text{ HCl}$  gáz.* Más gázokkal is megismételve a kísérletet, arra a következtetésre jutottak, hogy *amikor két vagy több különböző gáz vegyületet alkot, a reakcióban részt vevő gázok térfogatai állandó nyomáson és hőmérsékleten úgy aránylanak egymáshoz, mint a kis egész számok.*

Ezeket az eredményeket *Amadeo Avogadro (1776-1856)* magyarázta a *molekula* fogalmának bevezetésével, amely két vagy több atomból áll és *az anyag legkisebb részecskéje, mely még rendelkezik az adott anyag tulajdonságaival.* Gay-Lussac kísérleti eredményeire támaszkodva megállapította, hogy

*Azonos nyomáson és hőmérsékleten különböző gázok egyenlő térfogata egyenlő számú molekulát tartalmaz.*

Ez alapján a fenti reakciók a következőképp írhatók fel:



Kényelmesebb bevezetni a molekulák egy referencia mennyiségét, az úgynevezett *mólt* [1 mol], ami az az *anyagmennyiség*, amely ugyanannyi atomot vagy molekulát tartalmaz, mint  $0.012 \text{ kg } ^{12}\text{C}$ . Ez ekvivalens azzal, hogy *1 mol X atomtömegű (AMU) anyag tömege X gramm.* Az *1 mol* anyagmennyiségben található molekulák száma számértékileg megegyezik az *Avogadro-állandóval*:

$$N_A = 6,02214076 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}, \quad (1-4)$$

amiből kapjuk, hogy *normálállapotban* ( $T = 273.15 \text{ K}$ ,  $p = 101.325 \text{ kPa}$ ) tetszőleges gáz  $1$  *mólnyi* anyagmennyiségének térfogata (a *moláris térfogat*)

$$V = \frac{RT}{p} = \frac{8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \times 273.15 \text{ K}}{101325 \text{ Pa}} \approx 22.41 \text{ dm}^3. \quad (1-5)$$

Mivel az Avogadro-állandó egy alapvető fizikai mennyiség, több mérési módszert fejlesztettek ki ennek pontos meghatározására. Az alábbiakban csak néhány fontosabb kísérletet tárgyalunk.

### 1.3 Az Avogadro-állandó meghatározása

#### a) Az ideális gázok állapotegyenlete

$1$  mol,  $V_A$  térfogatú ideális gázra felírva az állapotegyenletet a részecskeszám megegyezik az Avogadro-állandóval, tehát

$$pV_A = N_A kT = RT, \quad (1-6)$$

tehát az *univerzális gázállandó* megegyezik az Avogadro-állandó és a Boltzmann-állandó szorzatával. Az egytetemes gázállandó a nyomás, térfogat és hőmérséklet ismeretében meghatározható. Amennyiben a gázállandó és a Boltzmann-állandó egymástól függetlenül meghatározható, az Avogadro-állandót a fenti képlet alapján megkaphatjuk.

#### b) Az $R$ gázállandó meghatározása

Az univerzális gázállandó meghatározásának egyik módszere a fajhőmérésen alapul. Az  $f$  szabadsági fokkal rendelkező,  $1$  mol anyagmennyiségű gáz belső energiája

$$U = \frac{f}{2} N_A kT = \frac{f}{2} RT. \quad (1-7)$$

Az állandó térfogaton vett mólhő számértékileg az az energia, ami  $1$  mol gáz hőmérsékletét  $1 \text{ K}$ -nel emeli, melynek mérésére ismertek a módszerek:

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{f}{2} R. \quad (1-8)$$

Az  $R$  gázállandó másik meghatározásának módszere a *Robert Mayer egyenleten* alapul, mely szerint az állandó nyomáson ill. az állandó térfogaton mérhető mólhők különbsége épp a keresett állandó:

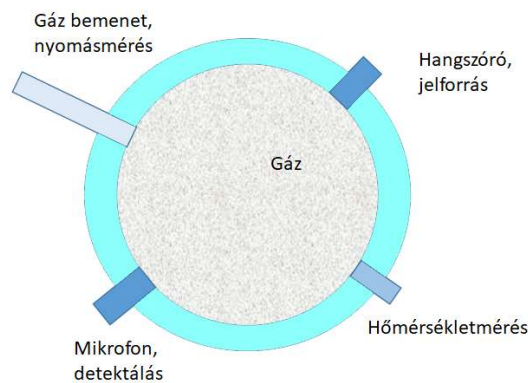
$$R = C_p - C_V \quad (1-9)$$

Az univerzális gázállandó értéke legpontosabban a hanghullámok terjedési sebességének mérésével történik. Az *1.1 ábrán* látható gömb alakú, jó hőszigetelésű akusztikus rezonátorban



$T$  hőmérsékletű,  $p$  nyomású ideális gáz van. A rezonátor kerületén egy hanggenerátor és egy mikrofon helyezkedik el, valamint a nyomás és a hőmérséklet állandóságát biztosító eszközök. Termodinamikai tanulmányainkból tudjuk, hogy a  $p$  nyomású,  $\rho$  sűrűségű gázban a hangsebesség ( $\kappa$  az *adiabatikus kitevő*):

$$v_s = \sqrt{\frac{\kappa p}{\rho}}. \quad (1-10)$$



**1.1 ábra** Üregrezonátor a gázállandó mérésére

Az ideális gáz állapotegyenletét a moláris térfogattal felírva  $pV_m = RT$ , amiből a gázállandó:

$$R = \frac{pV_m}{T} = \frac{p}{T} \frac{M}{\rho}, \quad (1-11)$$

ahol  $M$  a gáz móltömege. A hangszóró által a gázban keltett hullámok az üregben olyan állóhullámokat alakítanak ki, melyekre a hullámhossz egész számú többszöröse megegyezik az üreg sugarával,  $n\lambda_n = r$ . A hangsebesség így felírható az üreg *sajátfrekvenciáival* ( $\nu_n$ ):

$$v_s = \nu_n \lambda_n = r \frac{\nu_n}{n}, \quad (1-12)$$

amiből végül az  $R$  gázállandó megkapható:

$$R = \frac{p}{\rho} \frac{M}{T} = \frac{v_s^2}{\kappa} \frac{M}{T} = \frac{v_n^2 r^2}{\kappa n^2} \frac{M}{T} \quad (1-13)$$

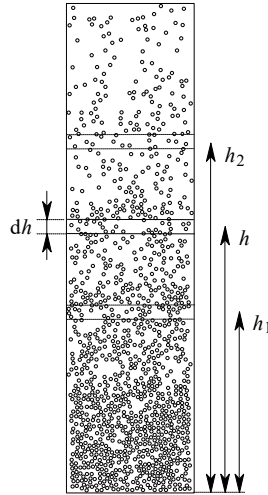
A rezonátor sugara és a gáz állapotváltozó ismeretében tehát a gázállandó meghatározható a gázzal töltött üreg sajátfrekvenciáinak mérésével.

c) *A Boltzmann-állandó mérése a szedimentációs egyensúlyból*

A Boltzmann-állandót először (1908) *Jean Baptiste Perrin* (1870-1942) mérte meg, aki folyadékban szuszpendált mügyanta mikrogömbök magasság szerinti eloszlását vizsgálta a

gravitáció és a hőmozgás együttes hatására. Feltételezte, hogy az  $m$  tömegű részecskék sűrűségét a *barometrikus magasságformulához* hasonló exponenciális törvény írja le, azaz egyensúlyban a részecskék magasság szerinti eloszlása a Boltzmann-eloszlást követi (1.2 ábra):

$$n(h) = n(0) e^{-\frac{m^*gh}{kT}}, \quad (1-14)$$



1.2 ábra Szedimentáció

ahol  $m^* = m - \rho V$  a részecskék felhajtóerővel csökkentett tömege ( $V$  a részecske térfogata,  $\rho$  a folyadék sűrűsége!). Ez egy olyan részecskesűrűség gradiens kialakulásához vezet, melyre

$$\frac{dn}{dh} = -n \frac{m^*g}{kT}. \quad (1-15)$$

A bonyolult részecskeszámlálás helyett a következő megfontolásokat tehetjük: ha a leülepedő részecskére ható gravitációs és sűrűdési (viszkózitási) erők egyenlők, akkor a részecske állandó sebességgel süllyed. Ekkor (gömb alakú részecskét feltételezve) a sebesség:

$$v_g = \frac{(m - \rho V)g}{6\pi\eta r} \quad (1-16)$$

Itt  $\eta$  a viszkozitás,  $r$  a részecske sugara, a következőkben pedig  $D$  a diffúziós együttható.

A gravitációs és a sűrűdési erők hatására lefele történő  $j_g = v_g n$  részecskeáram kialakít egy  $dn/dh$  koncentráció-gradienst, ami viszont a diffúzió miatt egy felfele mutató  $j_d$  részecskeáramot generál:

$$j_d = -D \frac{dn}{dh} = Dn \frac{(m - \rho V)g}{kT} \quad (1-17)$$

$$j_g = v_g n = n \frac{(m - \rho V)g}{6\pi\eta r} \quad (1-18)$$

Egyensúlyban a két részecskeáram megegyezik, amiből a Boltzmann-állandó kiszámítható csupán a folyadék és a részecskék paramétereinek ismeretében:

$$k = \frac{6\pi\eta r D}{T} \quad (1-19)$$

d) *Az Avogadro-állandó meghatározása elektrolízisből*

Az elektrolízisre vonatkozó *Faraday-törvényből* ismeretes, hogy bármilyen  $l$  vegyértékű anyag  $1 \text{ mol}$  anyagmennyiségének elektrolízis útján történő leválasztásához ugyanakkora töltés szükséges. Az  $F = 96485 \text{ C/mol}$  mennyiséget *Faraday-állandónak* nevezzük. Ez alapján az Avogadro-állandó meghatározható az elektróda tömegnövekedése és az átáramlott töltés ismeretében.

*Például* az ezüst-nitrát elektrolitikus reakciója során:



számértékileg  $F$  töltés átáramlása  $M = N_A \cdot m(\text{Ag})$  tömegű ezüst kiválását okozza a negatív elektródán, amit pl. az elektróda tömegének a kísérlet előtti és utáni méréséből kaphatunk meg. Az ezüst atomtömegének ismeretében ( $107.89 \text{ AMU}$ ) az Avogadro-szám:

$$N_A = \frac{107.89 \text{ AMU}}{\Delta m} \frac{Q}{e}, \quad (1-21)$$

ahol  $\Delta m$  a mért tömegnövekedés,  $Q$  pedig az átáramlott töltés, amit az áramerősségből és az időből számíthatunk ki.

e) *A Boltzmann-állandó meghatározása a Brown-mozgás alapján*

1827-ben *Robert Brown (1773-1858)* biológus-orvos észrevette, hogy folyadékban szuszpendált kis részecskék mikroszkóp alatt vizsgálva szabálytalan mozgást végeznek. A jelenség megmagyarázható, ha feltételezzük, hogy a részecskék a folyadék molekuláival rendszertelenül ütköznek.

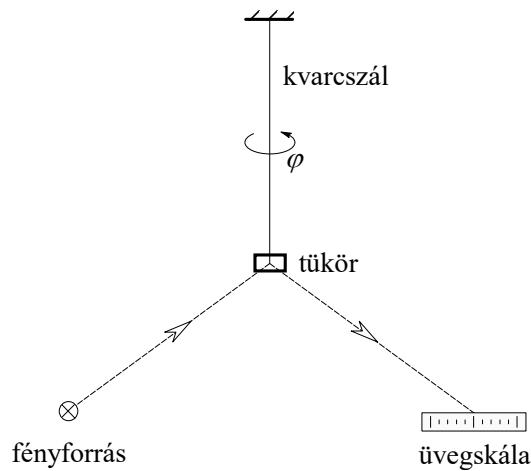
A Brown-mozgás elméleti leírását 1905-ben *Albert Einstein (1879-1955)* és *Marian Smoluchowski (1872-1917)* adta meg, egymástól függetlenül. Az elmélet megértéséhez alapos statisztikus fizikai ismeretek szükségesek, így a részletes ismertetéstől itt eltekintünk.

Az elméleti leírás eredménye, hogy ha egy  $r$  sugarú részecske  $\eta$  viszkozitású folyadék (gáz) molekuláival rendszertelenül ütközik, akkor egy kicsiny  $\Delta t$  megfigyelési idő alatt eredeti helyzetétől olyan  $x$  távolságra jut (*1D-ben*), melyre

$$\langle x^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\eta r} \Delta t, \quad (1-22)$$

tehát az elmozdulás *négyzetes középértéke* arányos a megfigyelési idővel. Hasonló eredményt kaptunk a kinetikus gázelmélet alapjai tárgyalásánál az egydimenziós bolyongási problémára, ahol ez a mennyiség a lépések számával volt arányos.

A Brown-mozgás (vagy hőmozgás) mindig fellép, ha egy test folyadékban vagy gázban mozog, ilyenkor a test az ütközések során fellépő impulzus- és energiáttranszfer során termikus egyensúlyba kerül környezetével. Makroszkopikus testek esetén erre jó példa *Eugen Kappler (1905-1977)* kísérlete, amelyben egy torziós szála függőlegesen felfüggesztett kis tükör jelentette a gázmolekulákkal ütköző „nagy” részecskét (1.3 ábra).



1.3 ábra Torziós tükör a Brown-mozgás vizsgálatára

A nyugvó tükörről lézernyalábot irányítva egy távoli ernyőn (vagy CCD kamerán) azt tapasztalhatjuk, hogy a visszavert nyaláb pozíciója nem állandó, az egyensúlyi helyzethez képest kis, véletlenszerű eltérések tapasztalhatók. A torziós inga helyzeti energiája időbeli középértéke  $kT/2$ , amiből a Boltzmann-állandó:

$$k = \frac{1}{T} D \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{T} D \frac{\langle \Delta \varphi \rangle^2}{4 \ln 2}, \quad (1-23)$$

ahol  $\langle \Delta \varphi \rangle^2$  a szögelfordulás szórásnégyzete. A torziós állandó ismeretében tehát meghatározható a Boltzmann-állandó.

f) Az Avogadro-állandó meghatározása a radioaktivitásból

A természetes radioaktivitásból származó  $\alpha$ -,  $\beta$ - és  $\gamma$ -sugárzást *Ernest Rutherford (1871-1937)* tanulmányozta részletesen. Több más kísérlet eredményeit figyelembe véve megállapították, hogy az  $\alpha$ -részecskék kétszeresen pozitív töltésű héliumionok. Rutherford és *Thomas Royds (1884-1955)* kísérlete alapján szintén meghatározható az Avogadro-állandó.

Az erre vonatkozó kísérletben a rádium (Ra) mintát egy vékony falú üvegedénybe zárták, amelyen az  $\alpha$ -részecskék áthatolhattak, de a Ra-gőz nem. Az edényt egy légritkított kisülési csőbe helyezték, amelyben időnként gázkisülést hoztak létre és a gáz spektrumát vizsgálták. Megállapították, hogy a csőben néhány nap múlva megjelenik a He spektruma, azaz az  $\alpha$ -részecskék elektronok felvételével héliummá alakulnak.

Megállapították, hogy 1 g Ra-ot tartalmazó minta 1 év alatt  $4.29 \times 10^{18}$  számú  $\alpha$ -részecskét bocsátana ki, valamint ugyanennyi idő alatt  $2.76 \times 10^{-5}$  g héliumgáz fejlődne. A He moláris

tömege  $4\text{ g}$ , és mivel egy  $\alpha$ -részecskéből egy He atom keletkezik, ezért az Avogadro-állandó értéke

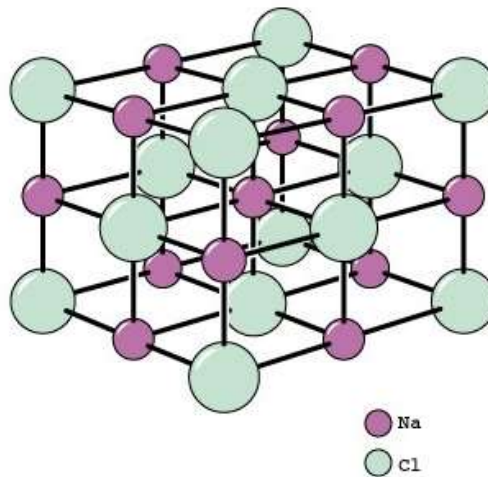
$$N_A = \frac{4\text{ g/mol}}{2.76 \times 10^{-5}\text{ g}} \cdot 4.29 \times 10^{18} = 6.22 \times 10^{23}\text{ 1/mol} . \quad (1-24)$$

A jelenleg elfogadott  $6.022 \times 10^{23}$  értéktől való eltérést többek közt a radioaktív bomlás több napos felezési idejéből származó számolási hiba okozza.

g) *Az Avogadro-állandó meghatározása röntgendiffrakcióból*

Állandó periodikus szerkezettel bíró anyagok egyik hatékony szerkezetvizsgálati módszere a röntgendiffrakció. Optikából ismeretes, hogy a sugárzás hullámhossza nagyságrendjébe eső periodikus struktúrák meghatározott törvény szerint diffraktálják a fényt, ld. optikai rácson való elhajlás. Hasonló jelenséget észlelhetünk, ha egy vékony anyagdarabra röntgensugárzást bocsátunk. Ekkor a periodikus szerkezetű anyag egyes *rácssíkjain* történik diffrakció, hiszen a sugárzás hullámhossza kb. megegyezik a szomszédos atomi síkok (*hálózati síkok*) távolságával, ami angströmös nagyságrendbe esik ( $1\text{ \AA} = 10^{-10}\text{ m}$ ).

Példaként tekintsünk egy *egyszerű köbös* kristályrácsot, a NaCl-ot (*1.4 ábra*). Későbbi szilárdtestfizikai tanulmányainkban pontosítjuk a kifejezést, a NaCl szerkezet tulajdonképpen egy *lapcentrált köbös* (*Face Centered Cubic, FCC*) Na- és egy *lapcentrált köbös* Cl-rácsból áll.



**1.4 ábra** A NaCl szerkezete

Ez a periodikus kristályszerkezet a  $\lambda$  hullámhosszú röntgensugárzás szempontjából egy „optikai” rácsként viselkedik. Az egyes atomi síkokról való visszaverődést a *Bragg-feltétel* szabja meg, azaz csak olyan - az atomi síkra  $\Theta$  szögben beeső - nyalábok estén kapunk maximális erősítést, melyekre

$$2d \sin \Theta = n\lambda , \quad (1-25)$$

ahol  $d$  az interferenciát keltő atomi síkok távolsága.

A NaCl moláris tömege  $58.44 \text{ g}$  (egy Na és egy Cl atom tömege), sűrűsége  $2170 \text{ kg/m}^3$ . Belátható, hogy az ábrán egy kis kocka (az ábrán látható kocka nyolcada) csak  $1/2$  NaCl-ot tartalmaz, tehát a moláris térfogat

$$V_m = 2N_A \left( \frac{a}{2} \right)^3, \quad (1-26)$$

ahol  $a$  az ábrán látható *egységcella* oldalhossza. A moláris térfogatot másképp felírva

$$V_m = \frac{M}{\rho}, \quad (1-27)$$

valamint e kettő egyenlőségéből kifejezve az Avogadro-állandót kapjuk, hogy

$$N_A = \frac{4M}{\rho a^3}. \quad (1-28)$$

Röntgendiffrakciós mérésekből tehát az anyag moláris tömege, illetve a megfelelő kristállysíkok távolságának ismeretében is meghatározható az Avogadro-állandó. A röntgendiffrakciós mérési módszereket a későbbiekben részletesen tárgyaljuk.

#### 1.4 Az atomok mérete

A kinetikus gázelmélet alapfeltevései, hogy az atomok a rendelkezésükre álló teret egyenletesen töltik ki, méretük elhanyagolható a vizsgált térfogathoz képest és köztük a rugalmas ütközésen kívül egyéb kölcsönhatás nincs. A valóságban az atomok nem tekinthetők szilárd, jól meghatározott sugarú gömböknek, hiszen a mag körüli töltéeloszlás nem egyenletes, a magtól távolodva egyre csökken az elektronsűrűség. Az atomok méretére vonatkozó mérések, számolások ezért eléggé különböző eredményeket adnak a mérési módszertől függően.

##### a) Az atomsugár meghatározása az Avogadro-állandóból

Az atomok méretére vonatkozó legegyszerűbb közelítés azon alapul, hogy a folyadékokban az atomok, molekulák szorosan egymáshoz közel helyezkednek el, hiszen ellenkező esetben a folyadékok a gázokhoz hasonlóan összenyomhatók lennének. Ha  $1 \text{ mol}$   $V_m$  moláris térfogatú,  $\rho$  sűrűségű folyadék moláris tömege  $M$ , akkor az atomok térfogata felírható

$$V_a \leq \frac{V_m}{N_A} = \frac{M}{\rho N_A} \quad (1-29)$$

alakban. Az atomokat gömbszerűeknek tekintve ezzel egy közelítést kaphatunk az atomok sugarára:

$$r = \left( \frac{3V_a}{4\pi} \right)^{1/3} \leq \left( \frac{3M}{4\pi\rho N_A} \right)^{1/3}, \quad (1-30)$$

mely érték az angströmös nagyságrendbe esik.

b) *Az atomok mérete a van der Waals-egyenletben*

Az ideális gázokra vonatkozó  $pV = nRT$  állapotegyenlet csak abban az esetben érvényes, ha a molekulák közti kölcsönhatásokat (a rugalmas ütközések kivételével) elhanyagoljuk. A valódi gázok esetén a termodinamikából megismert *van der Waals-egyenlet* írja le az állapotváltozók közti összefüggést (állapotegyenlet). Figyelembe kell vennünk az atomok véges kiterjedését és a köztük lévő kölcsönhatásokat is, amelyeket egy térfogati- és egy nyomáskorrekciós taggal jellemezhetünk. Ezekkel a valódi gázok állapotegyenlete a következő képpen írható fel:

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT, \quad (1-31)$$

ahol  $V_m$  a korábbiakban definiált moláris térfogat. Az  $a$  és  $b$  ún. *van der Waals-együtthatókat* az egyes gázokra kísérleti úton határozhatjuk meg.

A térfogati korrekció az atomok kiterjedése miatt szükséges,  $b$  azt fejezi ki, hogy az véges kiterjedésük miatt a valódi gázok számára kevesebb hely áll rendelkezésre, mint az ideális gáznak, mely különbség arányos az anyagmennyiséggel. Csak a térfogati korrekciót figyelembe véve:

$$p = \frac{RT}{V_m - b} \quad (1-32)$$

alakot kapnánk.

A nyomáskorrekciót kifejező  $a$  együttható magyarázata a következő. Nagy nyomáson a gázmolekulák közti vonzóerő már jelentőssé válik. A térfogat belsejében levő atomot/molekulát vonzzák a körülötte levő atomok, viszont ezek a minden irányból ható erők kiegyenlítik egymást. A térfogat határán (az edény falánál) levő molekulára ható erők eredője viszont nem nulla, a szomszédos atomok igyekeznek azt az edény belseje felé „húzni”. Ennek hatására a falba ütköző molekula kisebb erőt fejt ki az edény falára, tehát a nyomás kisebb lesz, mint a kölcsönhatás nélküli ideális gáz nyomása. Mivel a kölcsönhatás erőssége attól függ, mennyi atom veszi körül a kiszemelt részecskét, ez függ a gáz részecskesűrűségétől. Ugyanakkor a falba ütköző részecskék száma szintén a sűrűségtől függ, tehát a nyomáscsökkenés a részecskesűrűség négyzetével arányos. Mivel

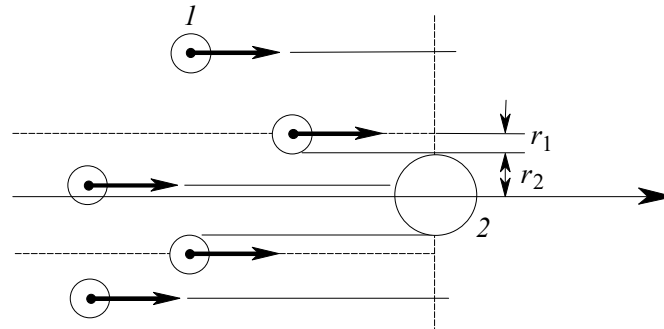
$$\rho^2 = \left(\frac{n}{V}\right)^2 = \frac{1}{V_m^2}, \quad (1-33)$$

ezért végeredményben

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}, \quad (1-34)$$

amelyből átrendezéssel a fenti *van der Waals-egyenletet* kapjuk.

A kinetikus gázelmélet alapján megmutatható, hogy  $b$  állandó a gömb alakú atomok/molekulák moláris térfogatának négyeszerese. Ezt a következők alapján könnyű belátni. A kinetikai elmélet szerint két,  $r$  sugarú atom akkor ütközik, ha középpontjuk egymástól való  $a$  távolságára  $a \leq 2r$  (1.5 ábra).



1.5 ábra Atomok ütközése

Az ütközések szempontjából tehát úgy tekinthetjük a gázt, mintha a molekulák számának fele  $2r$  sugarú gömb, a másik fele pedig pontszerű lenne. Így az általuk elfoglalt „saját térfogat”:

$$b = \frac{N_A}{2} \frac{4\pi}{3} (2r)^3 = 4N_A \frac{4\pi}{3} r^3 = 4N_A V_a \quad (1-35)$$

A *van der Waals-állandók* és az *Avogadro-állandó* ismeretében tehát lehetőség nyílik az atomsugár meghatározására. A 1.1 táblázat mutatja be néhány gáz *van der Waals-együtthatóinak* értékét.

Gáz	a [ Nm <sup>4</sup> /mol <sup>2</sup> ]	b [ m <sup>3</sup> /mol ]
Ar	0.1355	32.0
He	0.0035	23.8
H <sub>2</sub>	0.0245	26.5
Kr	0.2325	39.6
N <sub>2</sub>	0.1370	38.7
O <sub>2</sub>	0.1382	31.9

1.1 táblázat Néhány gáz *van der Waals-együtthatói*

(Forrás: [http://www2.ucdsb.on.ca/tiss/stretton/database/van\\_der\\_waals\\_constants.html](http://www2.ucdsb.on.ca/tiss/stretton/database/van_der_waals_constants.html))

c) Az atomok méretének meghatározása az ütközési hatáskeresztmetszetből

Az előző pontban említettekből általánosan azt mondhatjuk, hogy két atom akkor ütközik, ha középpontjuk távolság kisebb vagy egyenlő sugaraik összegénél:

$$a \leq r_1 + r_2, \quad (1-36)$$

ami azt jelenti, hogy egy atom középpontja a mozgási irányára merőleges  $\sigma = (r_1 + r_2)^2 \pi$  felületen belülre kell, hogy essék. Ezt a  $\sigma$  értéket *ütközési hatáskeresztmetszetnek* nevezzük. Ha az atomok sugarát egyenlőnek feltételezzük, akkor erre a sugárra az

$$r = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sigma}{\pi}} \quad (1-37)$$



érték adódik.

Könnyen belátható, hogy ha a (térfogategységenkénti)  $N_1$  számú,  $r_1$  sugarú, gömb alakú, egymással párhuzamosan mozgó atomnyaláb  $N_2$  számú,  $r_2$  sugarú álló atomokból álló,  $x = L$  vastagságú rétegre merőlegesen érkezik, akkor a réteget

$$N_{1,L} = N_{1,0} \exp[-N_2 \sigma L] = N_{1,0} \exp[-\alpha L] \quad (1-38)$$

részecske hagyja el az eredeti mozgásiránnyal megegyezően, azaz az atomnyaláb intenzitása a fenti törvény szerint csökken. Itt  $N_{1,0}$  az  $L$  vastagságú rétegbe belépő,  $N_{1,L}$  a réteget elhagyó részecskék térfogategységenkénti száma. Az  $\alpha = N_2 \sigma$  mennyiséget *szórási együtthatónak* nevezzük. Ha a vizsgált atomok sugara nem egyenlő, akkor a szórási hatáskeresztmetszet meghatározására különböző vastagságú rétegekre kell méréseket végeznünk.

d) *A méret meghatározása a közepes szabad úthosszból*

Levezethető, hogy az előző pontban tárgyalt kísérletben egy gázatom két ütközés között átlagosan

$$\lambda = \frac{1}{N_2 \sigma} = \frac{1}{N_2 (r_1 + r_2)^2 \pi} \quad (1-39)$$

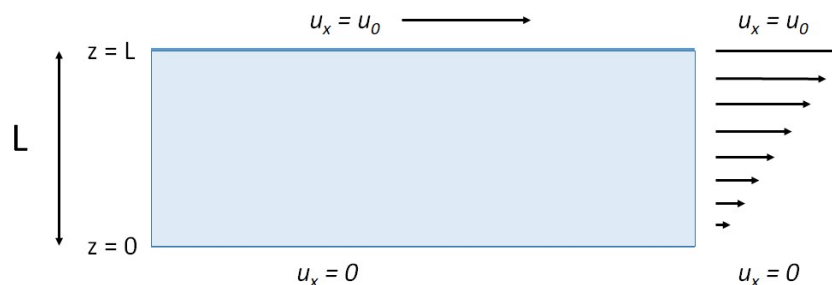
utat tesz meg. Ha a fentiekben állónak képzelt atomok is mozognak, akkor a *közepes szabad úthosszra* a

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} N_2 \sigma} = \frac{1}{\sqrt{2} N_2 (r_1 + r_2)^2 \pi} \quad (1-40)$$

kifejezés érvényes. A hatáskeresztmetszet és a közepes szabad úthossz a transzportfolyamatoknál játszik fontos szerepet, melyeket a következőkben tekintünk át.

e) *Viszkozitás*

A *belső súrlódás* az áramló gázban vagy folyadékban az áramlási irányra merőleges irányban történő, időegység alatti impulzusátadás mértékét jellemzi, amely nyilvánvalóan függ az ütközések gyakoriságától, azaz az átlagos szabad úthossztól.



**1.6 ábra** A nyírófeszültség az áramló folyadékrétegek közt

Általánosságban egy áramló gázban vagy folyadékban az egyes rétegek különböző sebességgel mozognak, ami egy nyírófeszültség megjelenéséhez vezet az egyes rétegek közt. Tekintsük az

1.6 ábrán látható elrendezést. Két, egymástól  $L$  távolságra levő párhuzamos síklemez közt homogén gáz (folyadék) van. Az alsó lemez áll, a felső  $u_0$  sebességgel mozog  $x$  irányban.

Feltehetjük, hogy a lemezek és a gáz közt nincs csúszás, azaz a gázmolekulák sebessége a lemezeknél megegyezik az adott lemez sebességével. Ekkor a lemezek közti infinitezimálisan vékony gázrétegek különböző sebességgel mozognak, nyíróerőt fejtve ki egymásra. Tegyük fel, hogy egy réteg a  $z = \text{const.}$  síkban egy  $P_{zx}$  érintőleges (nyíró-) feszültséget fejt ki a felette levő rétegre (indexelés:  $z$  normálisú síkra  $x$  irányban ható feszültség). Első közelítésben feltehetjük, hogy ez a *nyomástenzor*-komponens lineárisan függ a lemezek közti sebességeloszlás-gradienstől:

$$P_{zx} = -\eta \frac{du_x}{dz}, \quad (1-41)$$

ahol  $u_x$  a réteg áramlási sebességének  $x$  komponense,  $\eta$  pedig a (*dinamikai*) *viszkozitás*. Ha a rétegek sebessége nő a  $z$  irányban, akkor a sík alatti réteg lassítani igyekszik a felette levő réteget, egy negatív  $x$ -irányú erőt fejtve ki rá.

Alacsony nyomású gázokra a viszkozitás egyszerűen kiszámítható a kinetikus gázelmélet feltételezései alapján. Tegyük fel, hogy az átlagos  $u_x$  sebességkomponens csak  $z$ -től függ és sokkal kisebb a termikus sebességnél. Szemléletesen, a kiválasztott  $z$ -síkon felülről áthaladó molekulák az alsó réteg impulzusát növelik, az alsó rétegből a felsőbe jutók a felső réteg impulzusát csökkentik. Az impulzusváltozás miatt az egyes rétegek erővel hatnak egymásra. Még pontosabban,  $P_{zx}$  a kiválasztott sík feletti réteg egységnyi idő alatti, egységnyi felületen át történő anyagtranszport miatt bekövetkező impulzusváltozását jelenti. Ezt a mennyiséget egyszerűen kiszámolhatjuk az alábbiak szerint.

Legyen az egységnyi térfogatban levő molekulák száma  $n$ . Feltehetjük, hogy ezek  $1/3$ -a rendelkezik  $z$  irányú sebességgel, valamint ezeknek is a fele  $+z$  irányú sebességgel. Tehát egységnyi idő alatt, egységnyi felületre vonatkoztatva  $1/6n\bar{v}$  molekula lépi át a síkot alulról és ugyanennyi fentről ( $\bar{v}$  az átlagos termikus sebesség). Feltehetjük továbbá, hogy a síkot átlépő molekulák utoljára a sík alatt, illetve felett  $\lambda$  távolsággal ütköztek, azóta megtartották sebességüket. Ezért a felfelé történő impulzustranszfer mértéke

$$\left(\frac{1}{6}n\bar{v}\right)[mu_x(z-\lambda)], \quad (1-42)$$

a lefelé történő pedig

$$\left(\frac{1}{6}n\bar{v}\right)[mu_x(z+\lambda)]. \quad (1-43)$$

Az eredő impulzustranszfer felfelé e kettő különbsége:

$$\left(\frac{1}{6}n\bar{v}\right)m[u_x(z-\lambda)-u_x(z+\lambda)] \quad (1-44)$$

Feltételezve, hogy a sebességgradiens nem túl nagy az átlagos szabad úthosszon belül, a molekulák  $x$  irányú sebessége sorba fejthető és elsőrendben

$$u_x(z - \lambda) = u_x(z) - \lambda \frac{\partial u_x}{\partial z} \quad (1-45)$$

$$u_x(z + \lambda) = u_x(z) + \lambda \frac{\partial u_x}{\partial z}, \quad (1-46)$$

azaz

$$P_{zx} = \frac{1}{6} n \bar{v} m \left( -2\lambda \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = -\eta \frac{\partial u_x}{\partial z}, \quad (1-47)$$

amiből a viszkozitás

$$\eta = \frac{1}{3} n \bar{v} m \lambda = \frac{1}{3} \rho \bar{v} \lambda. \quad (1-48)$$

Felhasználva a kinetikus gázelmélet alapján kapható átlagos szabad úthossz kifejezését a hatáskeresztmetszet függvényében:

$$\eta = \frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{m \bar{v}}{\sigma}, \quad (1-49)$$

amiből azt az érdekes következtetést vonhatjuk le, hogy a viszkozitás nem függ a gáz sűrűségétől ill. nyomásától. Ezt beláthatjuk annak figyelembevételével, hogy ha pl. a gázmolekulák térfogat-egységenkénti számát megduplázzuk, akkor kétszer annyi molekula lesz képes az impulzustranszportra, viszont az átlagos szabad úthossz felére csökken, tehát a rétegek közti impulzustranszfer hatásfoka nem változik. Figyelembe véve még, hogy a kinetikus gázelmélet szerint a molekulák átlagos sebessége

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{m\pi}}, \quad (1-50)$$

a viszkozitás felírható a következő alakban:

$$\eta = \frac{2}{3\sigma\sqrt{\pi}} \sqrt{mkT}, \quad (1-51)$$

tehát a viszkozitás a hőmérséklet négyzetgyökével arányos. A fenti megfontolások csak a feltételeknek megfelelően híg (alacsony nyomású) gázokra érvényesek. A levezetés során feltételeztük, hogy az átlagos szabad úthossz sokkal nagyobb a molekulák méreténél, de sokkal kisebb a vizsgált térfogat (edény) lineáris méreténél.

#### f) Diffúzió

Ha a gázban – pl. *z-irányú* – sűrűséggradiens van jelen, akkor egy időbeli anyagtranszport alakul ki a *z* irányra merőleges felületen keresztül:

$$j_{M,z} = \frac{1}{A} \frac{dM}{dt} = -Dm \frac{dn}{dz}, \quad (1-52)$$

ahol a  $D$  diffúziós együttható (a viszkozitásra vonatkozó fenti megfontolások alapján) az  $m$  tömegű,  $n$  részecskesűrűségű,  $\bar{v}$  átlagsebességű atomokra

$$D = \frac{1}{3} \bar{v} \lambda \quad (1-53)$$

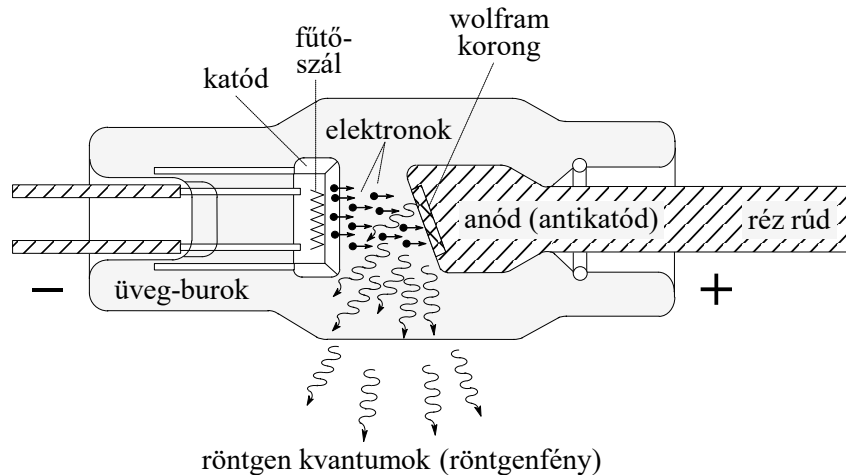
adódik.

A fentiek alapján láthatjuk, hogy olyan mikroszkopikus tulajdonságok, mint pl. a gázmolekulák átlagos szabad úthossza, ütközési hatáskeresztmetszete, az atomok, molekulák közelítő mérete megfelelő feltételezések mellett egyszerűen kiszámolhatók olyan makroszkopikus mennyiségek méréséből, mint a viszkozitás vagy a diffúziós állandó.

### 1.5 A röntgensugárzás előállítása és tulajdonságai

Az anyagszerkezet vizsgálatának egyik fontos módszere a röntgensugarak elhajlásának vizsgálata, amivel a következő alfejezetben részletesen foglalkozunk. Mielőtt azonban a diffrakciós szerkezetvizsgálati módszereket tárgyalnánk, tekintsük át az egyéb tudományterületeken is nagyon fontos röntgensugárzás előállítását (keletkezését) és legfontosabb tulajdonságait.

A röntgen- vagy – eredeti nevén – *X-sugárzást* Wilhelm Conrad Röntgen fedezte fel 1895-ben, amiért 1901-ben Nobel-díjat kapott. Röntgensugárzás leggyakrabban akkor keletkezik, amikor gyorsan mozgó elektronok az anyaggal ütközve lefékeződnek. A sugárzás előállítására régebben gáztöltésű csöveket, manapság izzókatódos csöveket alkalmaznak (1.7 ábra).

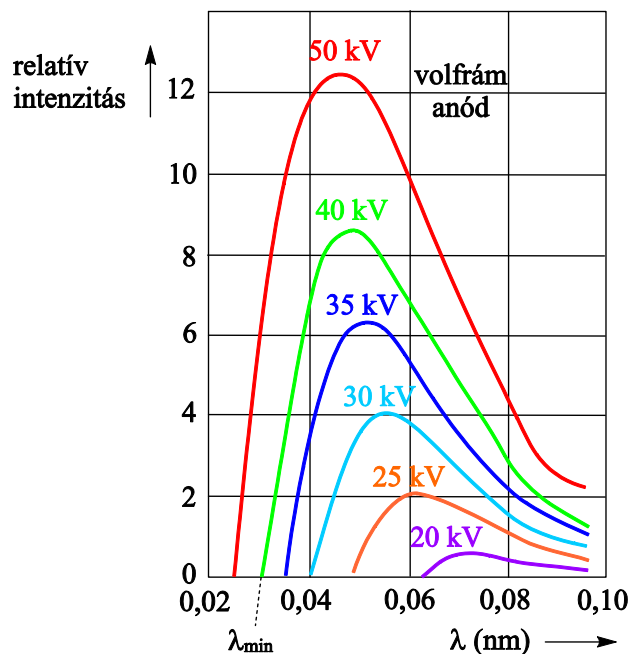


1.7 ábra Izzókatódos röntgensugárzó felépítése.

A fűtött katódból termikus emisszió útján kiszabaduló elektronokat az anód és a katód közti több 10-100 kV-os feszültség felgyorsítja, amik aztán az anódba ütköznek. Az anód anyagával való kölcsönhatás vonalas és folytonos sugárzási spektrumot eredményezhet, amelyet *primer* vagy *fékezési* sugárzásnak nevezünk.

A röntgensugárzás a látható fényhez hasonlóan elektromágneses sugárzás, de rövid hullámhossza miatt ennek interferencián alapuló bizonyítása csak 1912-ben sikerült Max von Laue-nak. A röntgensugarak a fotolemezt megfeketítik, fluoreszkáló hatást keltenek és a gázokat is ionizálják; ezen tulajdonságaik lehetőséget adnak egyrészt a sugárzás kimutatására, másrészt felhasználására is. A sugárzás *intenzitása* (erőssége) a fűtőáram nagyságától függ, hiszen ezzel a katódból kilépő elektronok számát szabályozzuk, míg a röntgensugárzás spektrális tulajdonságait jellemző *keményesség* (a rövidebb hullámhosszúságú sugárzás keményebb) a katód és anód közti feszültséggel szabályozható.

Az anódra csapódó nagy energiájú elektron az anód egy atomjának belső héjáról kilök egy elektront, amelynek helyét egy külső pályán levő elektron foglalja el, miközben a két állapot közti energiakülönbséget egy röntgenfoton formájában kisugározza. Ez az ún. *karakterisztikus sugárzás*, amely az anód anyagára jellemző egyes elektronátmeneteknek megfelelő, jól meghatározott energiának felel meg, tehát vonalas spektrum. Ha a beérkező elektronok energiája nem elég nagy ahhoz, hogy egy belső héjon levő elektront kilökjön, akkor csak a mag elektrosztatikus terében eltérül eredeti irányától. Az eltérés miatt gyorsulást elszenvedő töltés az elektrodinamika szerint elektromágneses sugárzást kelt. Mivel a beérkező elektron energiájának függvényében az eltérés mértéke folytonosan változhat, az emittált sugárzás spektruma is folytonos lesz. A röntgenspektrum e folytonos összetevőjét nevezzük *fékezési sugárzásnak*. Egy tipikus fékezési sugárzási spektrumot láthatunk az 1.8 ábrán, különböző gyorsító feszültségek esetén.

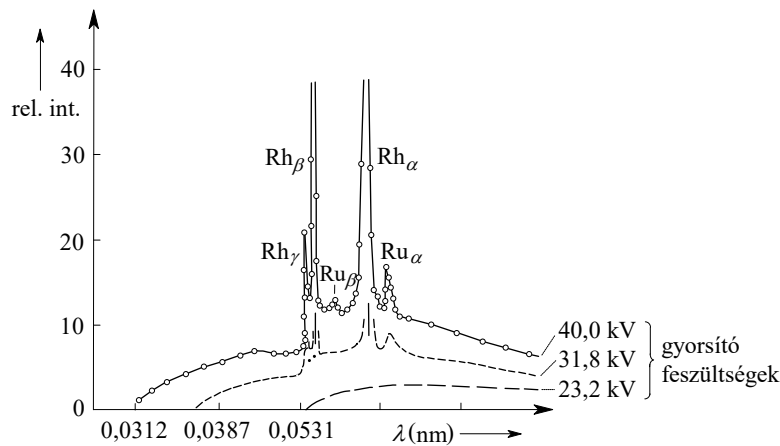


1.8 ábra Volfrám anódból kilépő fékezési sugárzás spektruma a gyorsító feszültség függvényében

A fékezési sugárzás spektruma rendelkezik egy láthatóan feszültségfüggő nagyenergiás (alacsony hullámhosszú) határral, ez akkor következik be, amikor az elektron teljes energiája sugárzássá alakul. A minimális hullámhosszra vonatkozó feltétel:

$$h\nu \leq h\nu_{\max} = eU \Rightarrow \lambda \geq \lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}. \quad (1-54)$$

A röntgenső által emittált sugárzás ezen kétfajta fenti primer sugárzásból áll, amelynek spektrumát ruténiummal szennyezett ródium anód esetén az 1.9 ábrán láthatunk. Mivel a nagyenergiájú elektronok felmelegítik az anódot, azt általában hűteni kell, vagy forgatással elérni, hogy az elektronok ne mindig a céltárgy ugyanazon pontjába csapódjanak be. Az elektronok energiája átalakításának hatásfoka kb. 1%, a hőveszteség rendkívül nagy.



**1.9 ábra** Ruténiummal szennyezett ródium anód röntgenspektruma a folytonos fékezési és a diszkrét karakterisztikus sugárzásra jellemző csúcsokkal

Az anyagra beeső röntgensugárzás egyrészt abszorpció, másrészt szórás miatt gyengül. Egy  $d$  vastagságú mintán áthaladó sugárzás intenzitása exponenciálisan csökken a Lambert-Beer törvény szerint:

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu d}, \quad (1-55)$$

ahol  $I_0$  a mintára beeső intenzitás,  $I$  a kilépő intenzitás,  $\mu$  pedig az ún. *gyengítési együttható*. Az abszorpció három folyamat eredménye. A *fotoeffektus* során a beérkező röntgenfoton ionizálja az atomot, a foton energiája teljes egészében egy kötött elektronnak a mag teréből való kiszakítására fordítódik. A *Compton-effektus* során a foton egy gyengén kötött elektronnal rugalmatlanul ütközve energiája egy részét átadja az elektronnak és maga a foton is szóródik. Kb.  $1 \text{ MeV}$  fotonenergia felett már a *párkeltéssel* is számolnunk kell, amikor az anyagra beérkező foton egy elektron-positron párt kelt. Az abszorpció tehát e három – energiafüggő – folyamat eredménye.

Állandó fotonenergiájú (keménységű) röntgensugárzás különböző anyagokon való áthaladáskor az anyagra jellemzően gyengül. A gyengítés az anyag sűrűségével nő, tehát a könnyebb elemeket (H, C, O, N) tartalmazó szerves vegyületek kevésbé abszorbeálják a

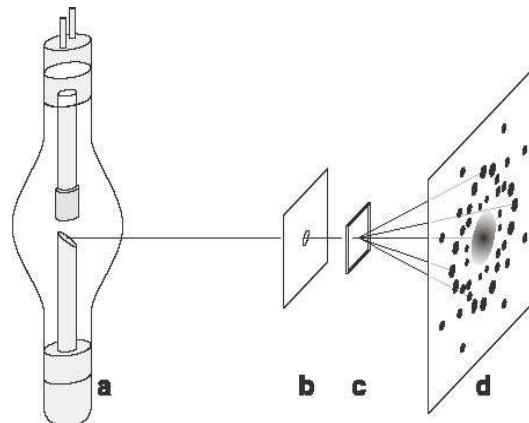
sugárzást, mint pl. a fémek. Ez a tulajdonság alkalmas pl. a röntgensugárzás diagnosztikai felhasználására is, ti. a csontok foszfor- és kalcium-tartalmuk miatt jobban elnyelik a sugárzást, mint a környező szerves szövetek, ezáltal képük egy fotolemezen világosabban jelenik meg. Bár a röntgendiffrakció viszonylagos olcsósága és egyszerűsége miatt népszerű szerkezetvizsgálati módszer, a könnyű elemek kicsiny szórési hatáskeresztmetszete is határt szab a felhasználásának; szerves makromolekulák (pl. fehérjék) röntgendiffrakciós képén nem látszanak pl. a H-atomok.

### 1.6 Az atomok térfogatának meghatározása röntgendiffrakció alapján

A kristályszerkezet ismeretében az Avogadro-állandó legpontosabb értékét a röntgensugarak kristályokon való elhajlásának vizsgálatával kaphatjuk. Ez a módszer a kristályban levő atomok, pontosabban az egyes atomi síkok távolsága, így a térfogategységenkénti atomszám meghatározására alkalmas.

*Max von Laue (1879-1960)* ismerte fel azt a tényt, hogy a röntgensugarak hullámhossza nagyságrendileg megegyezik a kristályokban található atomok közti távolságokkal, így a kristályok a sugárzással szemben egyfajta „optikai” rácsként viselkednek. 1912-ben *Paul Knipping* és *Walter Friedrich* közreműködésével sikeresen demonstrálta a röntgensugarak elhajlását kristályokon, amiért 1914-ben Nobel-díjat kapott.

Kísérletükben (1.10 ábra) folytonos spektrumú röntgensugárzást bocsátottak egy vékony réz-szulfát kristályra, mely mögé fotolemezt helyeztek. A kristályon elhajló sugárzás a fotolemezt a beeső sugárzás irányától különböző irányokban is megfeketítette. A fotolemezen a kristályszerkezetre jellemző módon megjelenő szimmetrikus elrendeződésű foltokat *Laue-diagramnak* nevezzük.

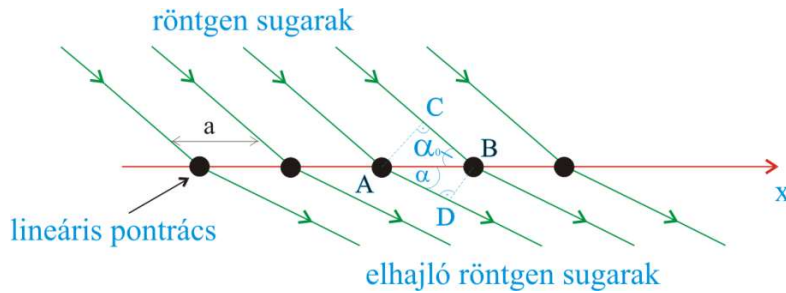


1.10 ábra Laue kísérlet; a) röntgenforrás, b) diafragma, c)  $\text{CuSO}_4$  kristály, d) fotolemez

Az alábbiakban a Laue-diagram keletkezését vizsgáljuk lineáris, síkbeli és térbeli periodicitással rendelkező struktúrák esetén.

#### a) Elhajlás lineáris pontrácson

Tekintsünk egy lineáris, egymástól  $a$  távolságra levő atomokból álló láncot (1.11 ábra).



1.11 ábra Lineáris pontrács

A láncre  $\alpha_0$  szöggel beeső párhuzamos nyalábok olyan  $\alpha$  irányokban erősítik egymást, melyekre az útkülönbség a hullámhossz egész számú többszöröse. Az optikában megszokott konvencióval ellentétben itt a beesési szöget nem a beesési merőlegestől, hanem az atomok alkotta  $x$  egyenesestől mérjük! Az ábráról ez a feltétel:

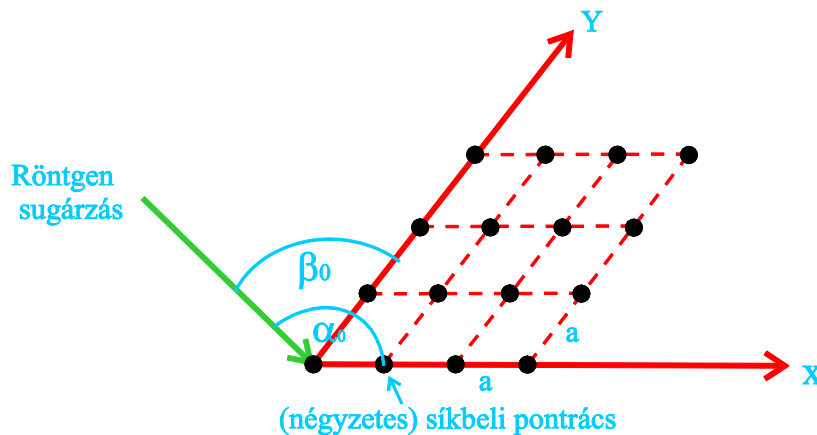
$$AD - BC = a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = k\lambda, \quad (1-56)$$

ahol  $k$  tetszőleges egész szám.

Látható, hogy egy adott beesési szög esetén az erősítések iránya a hullámhossztól függ, tehát a lineáris lánc a sugárzást egy optikai rácshoz hasonlóan komponenseire bontja szét. Rögzített hullámhossz esetén az erősítési irányok  $k$  értékétől függenek, megfelelően a nullad-, első-, stb. rendű elhajlásoknak. Az egyes atomokon szóródó sugárzás adott hullámhosszra egy  $\alpha$  nyílásszögű kúp felszínén erősödik, tehát a lánc irányára merőlegesen elhelyezett ernyőn a Laue-foltok koncentrikus körökként jelennek meg. Belátható, hogy a lánc irányát meghatározó  $x$  tengellyel párhuzamos ernyőn az intenzitásmaximumok helyei hiperbolasereget határoznak meg.

b) Elhajlás négyzetes pontrácson

A kétdimenziós pontrácson (1.12 ábra) történő elhajlásra az előző esethez hasonló összefüggések érvényesek. Tegyük fel, hogy beeső nyalábunk az  $x$  tengellyel  $\alpha_0$ , az  $y$  tengellyel  $\beta_0$  szöget zár be.



1.12 ábra Síkbeli (négyzetes) pontrács



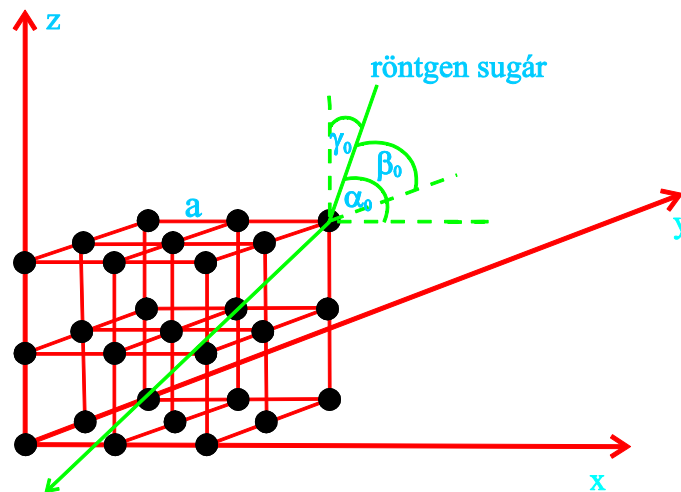
A korábban látottak szerint ekkor a maximális erősítés feltételei:

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= k_1 \lambda \\ a(\cos \beta - \cos \beta_0) &= k_2 \lambda \end{aligned} \quad (1-57)$$

Adott beesési szögekre és hullámhosszra ezek az egyenletek minden  $(k_1, k_2)$  értékpárra egyértelműen meghatározzák a maximális erősítés irányait. A rács síkjával párhuzamos síkon (ernyőn) ezek egy  $x$  tengellyel párhuzamos és egy  $y$  tengellyel párhuzamos tengelyű hiperbolasereg metszéspontjait adják.

c) *Elhajlás térbeli (kübös) pontrácson*

A térbeli pontrácson (1.13 ábra) történő elhajlás kicsit bonyolultabb, mint az előző esetek. Az előzőekben adott beesési szögek mellett minden hullámhosszhoz tartozik több (a  $k$  értékektől függő) elhajlási irány, a térbeli rácsoknál viszont ez nem áll fenn.



1.13 ábra Elhajlás térbeli kübös rácson

Három dimenzióban a Laue-egyenletek:

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= k_1 \lambda, \\ a(\cos \beta - \cos \beta_0) &= k_2 \lambda, \\ a(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= k_3 \lambda, \end{aligned} \quad (1-58)$$

amelyekből az elhajlított nyaláb iránykoszinuszaira:

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \cos \alpha_0 + k_1 \frac{\lambda}{a}, \\ \cos \beta &= \cos \beta_0 + k_2 \frac{\lambda}{a}, \\ \cos \gamma &= \cos \gamma_0 + k_3 \frac{\lambda}{a}. \end{aligned} \quad (1-59)$$

A fenti egyenletek mellett figyelembe kell még vennünk az iránykoszinuszokra vonatkozó feltételeket is:

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1, \quad (1-60)$$

$$\cos^2 \alpha_0 + \cos^2 \beta_0 + \cos^2 \gamma_0 = 1, \quad (1-61)$$

amelyből az elhajlított hullámhosszakra a következő feltételt kapjuk:

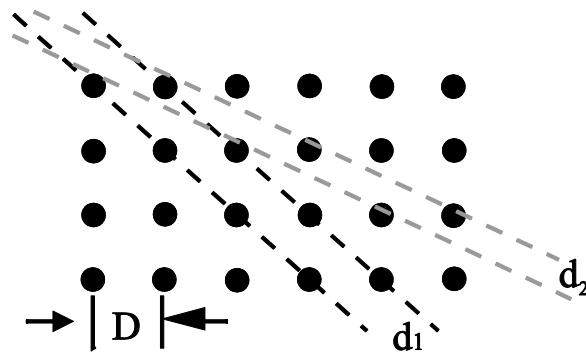
$$\lambda = -2a \frac{k_1 \cos \alpha_0 + k_2 \cos \beta_0 + k_3 \cos \gamma_0}{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}. \quad (1-62)$$

Míg a lineáris és síkbeli pontrácsnál a diffraktált spektrumban minden beeső hullámhossz előfordul, addig a térbeli rács diffrakciós spektrumában csak néhány, a fenti egyenlet által meghatározott hullámhossz jelenik meg.

A Laue-diagramon az egyes foltok különböző hullámhosszokhoz és különböző rendeknek megfelelő elhajlásoknak felelnek meg. A kristály atomjairól szóródó röntgensugarak interferenciája a szerkezetnek megfelelő irányokban hoz létre maximumokat, ez okozza a lemez feketedését. A röntgendiffrakciós kísérletek eredménye az anyag atomos szerkezetének végső bizonyítéka volt, egyúttal megalapozta a diffrakciós szerkezetvizsgálatot is.

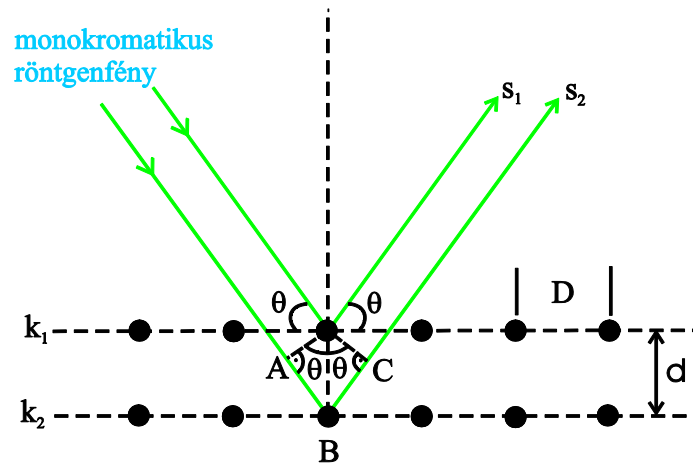
#### d) A Bragg-egyenlet

Míg Laue az egyes atomokról szóródó gömbhullámok interferenciáját vizsgálta, addig *Sir William Henry Bragg (1862-1942)* és fia, *Sir Lawrence Bragg (1890-1971)* egy egyszerűbb és szemléletesebb módját adták a kristályon szóródó röntgennyaláb erősítésének lehetséges irányaira (*Nobel-díj, 1915*). Apa és fia a sugárzásnak a kristály hálózati síkjain való visszaverődését vizsgálta. Későbbi tanulmányaink során részletesen megismerkedünk a periodikus struktúrák térrácsában való tájékozódással, de addig is vegyük észre, hogy a térbeli pontrácsban egy sík atomsűrűsége és a vele párhuzamos síkok egymástól való távolsága függ attól, hogy milyen irányból tekintünk a rácsra (*1.14 ábra*).



1.14 ábra Különböző irányoknak megfelelő hálózati síkok távolsága

A *Bragg-feltétel* megértéséhez tekintsünk két párhuzamos atomi síkot, melyek távolsága  $d$ . A  $\theta$  szög alatt beeső nyaláb mindkét síkról visszaverődik, a visszavert eredő nyaláb intenzitását a két síkról visszaverődő nyalábok interferenciája határozza meg (*1.15 ábra*).

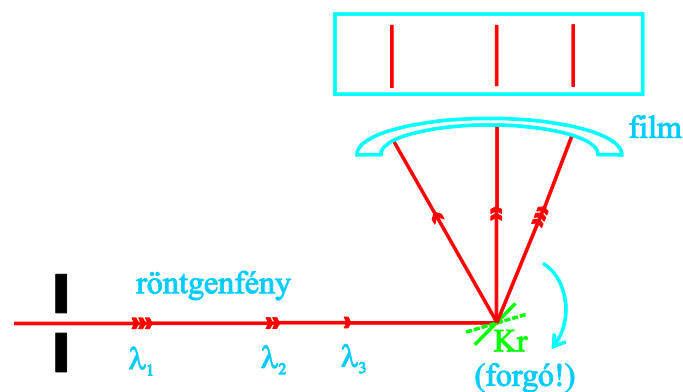


1.15 ábra Röntgennyaláb visszaverődése két szomszédos atomi síkról

A valóságban a sugárzás több síkról verődik vissza, viszont ez esetünkben csak az interferenciavonalak félértékszélességének csökkenésével jár. Maximális erősítést akkor kapunk, ha két interferáló nyaláb közti útkülönbség a hullámhossz egész számú többszöröse, azaz:

$$2d \sin \Theta = m\lambda$$

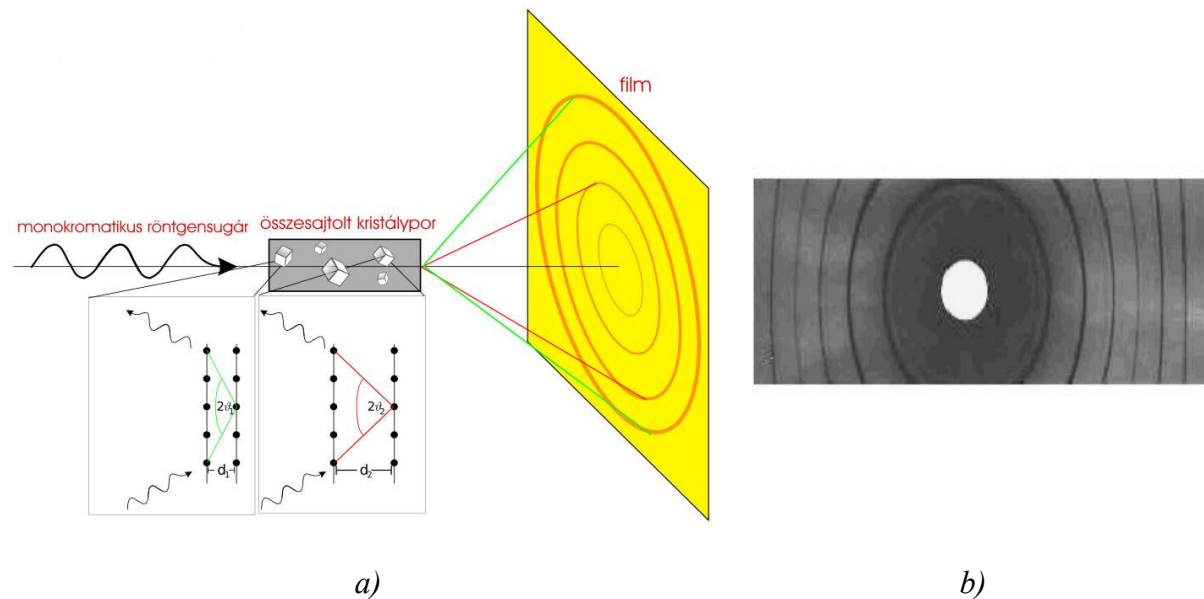
A Bragg-féle forgókristályos kísérletben (1.16 ábra) polikromatikus sugárzást alkalmazva a kristály egy adott helyzeténél a beesési szög mérésével információt kaphatunk az egyes atomi síkok távolságáról. Monokromatikus sugárzás alkalmazásával a kristályt forgatva az egyes elhajlási rendekre mért szögből következtethetünk a síkok távolságára. Ismert  $d$  rácsállandójú kristály esetén a sugárzás hullámhosszáról kaphatunk információt.



1.16 ábra A Bragg-féle forgókristályos módszer elvi rajza

A másik – gyors analitikai méréseket is lehetővé tevő – módszer a Debye – Scherrer-féle pormódszer. Itt a nehezen előállítható egykristályok helyett porrá őrölt anyagot használnak. A mintában véletlenszerű irányítottsággal elhelyezkedő hálózati síkokra monokromatikus

sugárzást bocsátanak, mely a diffrakció következtében a detektoron (fotolemezen) koncentrikus körökként jelenik meg (1.17 ábra).



1.17 ábra a) a Debye – Scherrer-féle elrendezés és b) a tengelyes szimmetria miatt megjelenő kör alakú elhajlási kép

(Forrás: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Debye-Scherrer-Verfahren.svg>)

A sugárzás hullámhosszának ismeretében a geometriai adatokból (minta és ernyő távolsága) a diffrakciós körök sugarának mérésével az egyes hálózati síkok távolsága meghatározható ill. beazonosítható. Ha az anyag szerkezete ismert, hasonló gondolatmenettel az ismeretlen sugárzás hullámhosszáról kaphatunk információt.

e) Az Avogadro-állandó meghatározása röntgendiffrakciós adatokból

A Bragg-feltétel alapján egy monokromatikus röntgensugárzás beesési szögének ismeretében a diffraktált nyaláb elhajlásából meghatározhatjuk az atomi síkok távolságát, amiből az egyes atomok távolsága kiszámítható. A rácsállandó, valamint az anyag szerkezete, sűrűsége és moláris tömege ismeretében az Avogadro-állandó meghatározható. A kristályszerkezetek részletes tulajdonságaival későbbi tanulmányaink során még bővebben foglalkozunk.

Egyszerű példaként tekintsük az 1.4 ábrán látható NaCl szerkezet elemi celláját. A cella közepén egy Na ion található, ez teljes egészében az adott elemi cellához tartozik. A többi 12 darab Na ion másik 3 szomszédos cellával közös, így egy elemi cellához  $1+12/4 = 4$  db Na ion tartozik. Hasonlóan belátható, hogy az elemi cellában levő Cl ionok száma is 4, így egy  $V = a^3$  térfogatú elemi cellában  $N = 4$  darab NaCl molekula van. Másrészt az elemi cellában található molekulák számára felírhatjuk, hogy

$$N = N_A n = N_A \frac{V}{V_m} = N_A \frac{a^3}{M / \rho}, \quad (1-63)$$

amelyből

$$N_A = \frac{4M}{\rho a^3}. \quad (1-64)$$

A NaCl-ra vonatkozó adatok: moláris tömeg 58.5 g/mol, sűrűség 2.178 g/cm<sup>3</sup>, az elemi cella oldalhossza 0,563 nm (5,63·10<sup>-10</sup> m), melyekkel az Avogadro-állandó:

$$N_A = \frac{4M}{\rho a^3} = 6.020 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}. \quad (1-65)$$

Az Avogadro-állandó jelenleg elfogadott értéke 6.02214076×10<sup>23</sup> 1/mol.

f) *Az atomok mérete röntgendiffrakciós adatok alapján*

Az atomok méretére a kristályszerkezet ismeretében adhatunk csak pontos választ, hiszen az elemi cellában az atomok egymáshoz viszonyított helyzete – az ún. *térkitöltési tényező* (*Atomic Packing Factor, APF*) – dönti el, hogy az elemi cella térfogatának ténylegesen mekkora részét foglalják el az atomok.

Példaként vizsgáljuk meg a fentebb említett NaCl (FCC) szerkezetet. Az egyszerűség kedvéért feltételezzük, hogy a kétféle ion sugara azonos és a kristályrácsban egymást érintő, merev gömbökként foglalnak helyet (A kocka alakú elemi cella 8 sarkában van egy-egy atom, ezek mindegyikének 1/8-a tartozik a cellához. További 6 atom a lapközepeken helyezkedik el, de mindegyiknek csak a fele tartozik az adott elemi cellához, így végeredményben egy elemi cella 4 atomot tartalmaz).

Az atomok a kocka lapjának átlója mentén érintik egymást, így egy gömb alakú atom sugarára  $4r = a\sqrt{2}$  adódik, ahol  $a$  az elemi cella oldalhossza. A térkitöltési tényező definíció szerint az atomok által elfoglalt térfogat és az elemi cella térfogatának hányadosa:

$$APF = \frac{4V_a}{V_c} = 4 \frac{4r^3 \pi}{a^3} = \dots = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0,74. \quad (1-66)$$

A lapcentrált köbös rácsban tehát az atomok az elemi cella 74%-át töltik ki, ez egyébként a legnagyobb lehetséges kitöltési arány, ezért szokás ezt *szoros illeszkedésű köbös* (*Cubic Close-packed, CCP*) rácsnak is nevezni. A másik ezzel megegyező arányú rácsszerkezet a *szoros illeszkedésű hatszöges* (*Hexagonal Close-packed, HCP*) rács, amivel későbbi tanulmányaink során még találkozunk.

A fenti feltételezésekkel a Na és Cl ionok sugara megkapható a NaCl elemi cellájának ismeretében, amire

$$r = a \frac{\sqrt{2}}{4} = 0,199 \text{ nm} \quad (1-67)$$

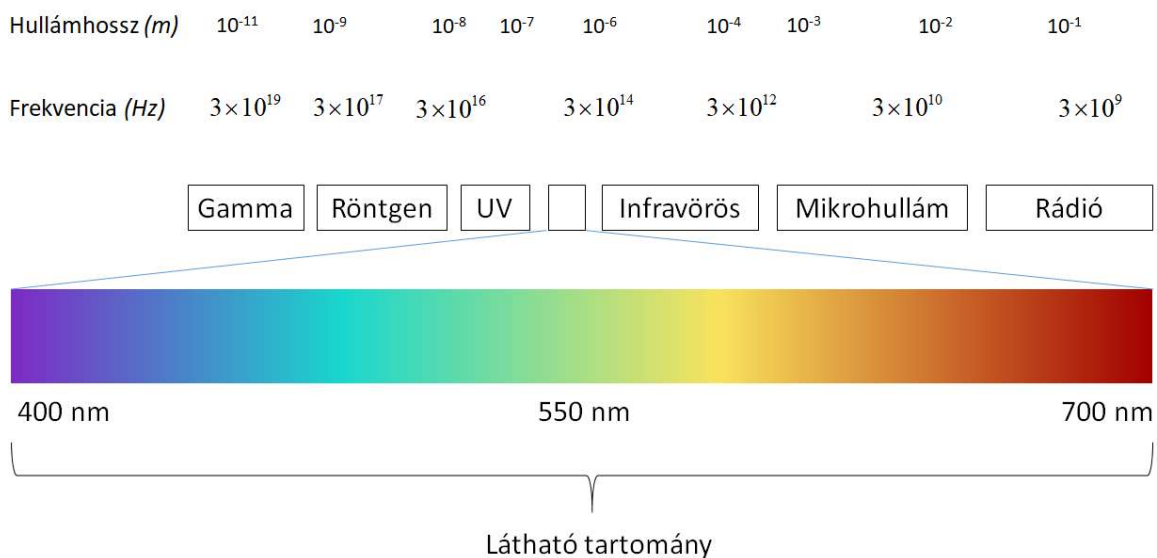
adódik. A valóságban a két ion sugara nem egyezik meg, irodalmi értékeik  $r_{Na^+} = 0,116 \text{ nm}$  és  $r_{Cl^-} = 0,167 \text{ nm}$ .

Az ionok sugara töltésüktől függően lehet kisebb és nagyobb is a semleges atom sugaránál, hiszen egy kation elektronjait jobban vonzza a mag, egy anion mérete viszont az elektronok egymás közti taszító kölcsönhatása miatt növekszik. A rácsban az atomok/ionok távolságát nagyban befolyásolja még a köztük lévő kötés jellege is, ami az egyes atomok elektronegativitásól is függ. A fenti levezetésnél feltételeztük, hogy a  $\text{Cl}^-$  ionok érintik egymást, ami a valóságban nem következik be, a fenti ionsugárra kapott érték egy maximum. Az atomok elrendeződését a kristályrácsban, ill. a pontosabb ionsugarakat csak a teljes kvantummechanikai leírás alapján mondhatjuk meg.

A fentiekből is látható, hogy az atomok méretére nem adható pontos érték és általában nem tekinthetők jól meghatározott térfogattal rendelkező szilárd gömböknek. Mivel az atom egy központi atommagból, és az azt körülvevő kis anyagsűrűségű elektronfelhőből áll, ezért a méret meghatározása (definíciója) kérdéseket vet fel. (Gondoljunk a későbbiekben tárgyalásra kerülő problémára; az effektív hatáskeresztmetszetnek a tekintett kölcsönhatástól való függésére.) Ez különösen igaz, ha figyelembe vesszük, hogy az elektronfelhő mérete függ az elektronállapottól, továbbá az atom környezetétől is, például, hogy az atom hogyan létesít kötést a szomszédos atomokkal.

### 1.7 Az elektromágneses színeképek áttekintése

Az elektromágneses hullámok frekvenciájuktól függően nagyon eltérően viselkedhetnek az anyaggal való kölcsönhatásuk során. Az elektromágneses színekép általánosan használt felosztása látható az *1.18 ábrán*.



*1.18 ábra Az elektromágneses színekép*

Hullámhossz szerint növekvő sorrendben az egyes (néhol átfedő) tartományok a következők. Gamma sugárzásról kell beszélni, ha a sugárzás az atommagok átmeneteiből származik, ez a nagy fotonenergiájú sugárzás általában  $10^{-10}$  m-nél rövidebb hullámhosszú. Az atomhéj

átmeneteiből, illetve az elektronok fékezésekor kibocsátott röntgensugárzás  $10\text{ nm}$ -nél rövidebb hullámhosszú, és részben átfedhet a gamma sugárzás alacsony energiájú tartományával. Lágy röntgentartományról beszélhetünk  $10$ -től  $\sim 1\text{ nm}$  hullámhosszig, míg a rövidebb hullámhosszú röntgensugárzás a kemény röntgen tartománya. Az extrém ultraibolya, illetve az ultraibolya sugárzás párszor  $10\text{ nm}$ -től kb.  $400\text{ nm}$ -ig terjedő tartomány. Az emberi szem által is érzékelhető *látható tartomány* kb.  $400 - 800\text{ nm}$ -ig terjed. Az ezt követő *infravörös tartomány* elég széles, a látható színek után kb.  $500\text{ }\mu\text{m}$ -ig terjed. Az ennél hosszabb hullámhosszú elektromágneses sugárzást összefoglaló néven *elektromos hullámoknak* nevezzük.

Az elektromos hullámok (más néven *rádióhullámok*) felosztása a következő (a hullámhosszak nagysága természetesen csak egy körülbelüli érték, zárójelben a hozzájuk tartozó frekvenciatartományt is megadtuk):

*Mikrohullámoknak* nevezzük a kb.  $30\text{ cm}$ -nél kisebb ( $> 1\text{ GHz}$ ) hullámhosszúságú sugárzást, melyet az *ultrarövid* ( $1 - 10\text{ m}$ ,  $30 - 300\text{ MHz}$ ) és a *rövidhullámok* ( $10 - 100\text{ m}$ ,  $3 - 30\text{ MHz}$ ) követnek. A  $100 - 200\text{ m}$ -es ún. *átmeneti hullámok* után következnek a *középhullámok* ( $200 - 1000\text{ m}$ ,  $300\text{ kHz} - 1.5\text{ MHz}$ ), végül az  $1\text{ km}$ -nél nagyobb hullámhosszú sugárzást ( $< 300\text{ kHz}$ ) *hosszúhullámoknak* nevezzük.

### 1.8 Ellenőrző kérdések

- Mondja ki az állandó, illetve a többszörös súlyviszonyok törvényét!
- Mi az atomi tömegegység?
- Mondjon példákat az Avogadro állandó meghatározására!
- Három dimenziós periodikus struktúrákon fellépő diffrakció Bragg-féle leírása milyen fogalom bevezetésén alapul?
- Melyek az atomok méretére vonatkozó megfontolások, kísérleti tapasztalatok?
- Ismertesse a röntgencső felépítését, működését, illetve az így keltett röntgensugárzás spektrális tulajdonságait!
- Írja fel a Laue-egyenleteket!
- Hasonlítsa össze a Bragg-féle forgókristályos, illetve a Debye-Scherrer-féle módszert!
- Sorolja fel az elektromágneses színek tartományait!

### 1.9 Feladatok

- Milyen tömegarányban vegyülnek a kén-dioxidot létrehozó komponensek?
- Vízbontás során mi a keletkezett gázok térfogatának aránya?
- Ugyanolyan tömegű (de különböző) elemek mólban kifejezett anyagmennyisége hogyan viszonyul egymáshoz?

- 
- Két – egyenként  $r_1$  és  $r_2$  sugarú – gömb alakú részecske ütközésekor mi az ütközési hatáskeresztmetszet? Felhasználható-e ez a mennyiség az abszorpció makroszkopikus leírására?
  - Határozza meg egy 150 kV-os gyorsító feszültséggel működő röntgencső emissziójában megjelenő legrövidebb hullámhosszúságú komponens frekvenciáját!



## 2. Az elektromosság kvantált tulajdonságai

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri az anyag, illetve elektromosság kvantált tulajdonságaira vonatkozó törvényszerűségeket,
- ezen összefüggéseknek az atomok oszthatóságára vonatkozó következményeit,
- megismeri a töltés legkisebb egységének, az elemi töltés meghatározásának módszereit, az elemi töltést hordozó elektron tulajdonságait,
- elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja, hogy mikro-rendszerekben a fizikai mennyiségek sok esetben kvantáltak.

Jelen fejezetben az elektromosság kvantált tulajdonságaira utaló, illetve azt bizonyító ismereteket összegezzük, melyek – az egyébként semleges – atom alkotórészei által hordozott töltés legkisebb egységének az ún. elemi töltés azonosítására/meghatározására is lehetőséget nyújtanak.

A tárgyalás során felhasználjuk a korábbi tanulmányok során szerzett elektromosságtani ismereteket.

A daltoni felfogás szerint az atom oszthatatlan, e megfontolás alapján viszont nem lehet az elemek alapvető építőköve, hiszen ekkor az összes elemet különböző atomoknak kellene felépíteniük, ami ellentétben áll a fizikai gondolkodásmód egységes világgépével. Az előző fejezetben már találkoztunk Prout hipotézisével, aki kimutatta, hogy a legtöbb elem atomsúlya nagyjából egész szám, és a hidrogéné  $\approx 1$ , amiből azt a következtetést vonta le, hogy minden elem hidrogénből áll. A későbbiekben a nehezebb elemeknél ez a hipotézis megdőlni látszott, de az izotópok felfedezésével ismét előtérbe került.

Először *Mengyelejev (1834-1907)* ismerte fel, hogy ha az elemeket növekvő atomsúly szerint rendezzük, azok kémiai és fizikai tulajdonságai periodicitást mutatnak. A Mengyelejev-féle *periódusos rendszer* sorokra (*periódusokra*) és oszlopokra (*csoportokra*) tagolható. Az elemek szokásos jelölése, hogy az elem *rendszáma* a vegyjel előtt felül, míg az atomsúly a vegyjel előtt alul van feltüntetve, pl.  ${}^2_4\text{He}$ . Ezek az ismétlődések arra utalnak, hogy az atomok kisebb alkotóelemekből állnak, melyek bizonyos rendszer szerint csoportosulnak.

A következőkben megemlítünk néhány olyan kísérletet, amelyek bizonyítékul szolgáltak az atomok oszthatóságára.

### 2.1 Az elektrolízis

A kémiailag tiszta folyadékok általában rossz vezetők, de pl. desztillált vízben NaCl vagy kénsav feloldása után mérhető áram alakul ki az elektródák között, ugyanakkor az elektródokon kémiai változásokat figyelhetünk meg (pl. gázképződés, anyagkiválás). Például  $\text{CuCl}_2$  vizes oldatát

elektrolizálva a katódon réz válik ki, míg az anódon klórgáz keletkezik. A folyadékban az elektromos vezetést az oldódásnál pozitív és negatív ionokra disszociáló oldott anyag okozza.

Az elektrolízis törvényeit *Michael Faraday (1791-1867)* állította fel 1833-ban. Különböző elektrolitok esetén az elektródokon kiváló anyag mennyiségét, az áramerősséget és az elektrolízis időtartamát vizsgálva arra a következtetésre jutott, hogy

*Az elektródokon kiváló anyag mennyisége (tömege) arányos az áramerősség és az eltelt idő szorzatával, vagyis az áthaladt elektromos töltéssel:*

$$m = KIt = KQ, \quad (2-1)$$

ahol  $K$  az anyag *elektrokémiai egyenértéke*. Faraday második törvénye az egyes anyagok elektrokémiai egyenértéke közt teremt kapcsolatot:

*Különböző anyagok elektrokémiai egyenértékei úgy aránylanak egymáshoz, mint egyenértéksúlyaik.*

Az adott anyag egyenértéksúlyának az atomsúly és a vegyérték hányadosát tekintjük, azaz az  $A/z$  mennyiséget. Ebből a dimenziótlan mennyiségből származtatjuk a *gramm-egyenértéket*, mely az adott anyag  $A/z$  grammnyi mennyisége. Az  $1/K$  mennyiség a *Faraday-féle állandó*:

$$F = 96485 \frac{C}{(A/z) \text{ gramm}} = 96485 C \cdot \text{mol}^{-1}. \quad (2-2)$$

A fentiek szerint az elektródon kiváló anyag tömege:

$$m = \frac{It}{F}. \quad (2-3)$$

Az  $m = 1 \text{ g-ekv}$  esetre  $It = F \cdot 1 \text{ g-ekv} = 96485 C$ , azaz 1 g-ekv tömegű anyag (pl. 107.87 g ezüst) kiválasztásához 96500 C töltés átáramlása szükséges. 1 mol 1 vegyértékű ion semlegesítéséhez  $F$  töltés szükséges, amiből arra következtethetünk, hogy minden egy vegyértékű ion töltése

$$e = \frac{F}{N_A} = 1.602 \times 10^{-19} C, \quad (2-4)$$

valamint minden  $z$  vegyértékű ion töltése  $ze$ .

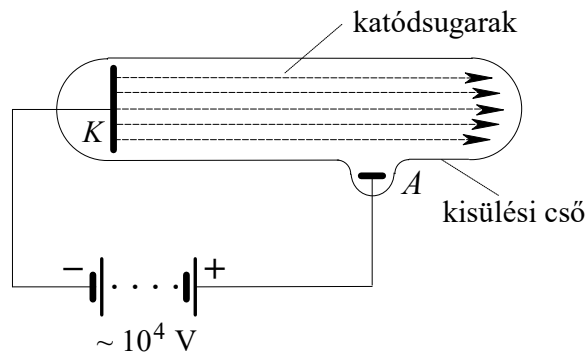
A Faraday-törvényekből következő fenti gondolat vezetett el arra a felismerésre, hogy az elektromosság is „atomos” szerkezetű, azaz létezik egy *elemi töltés*, és bármely töltés ennek egész számú többszöröse.

## 2.2 Katódsugarak

Felmerül a kérdés, hogy milyen összetevőkkel rendelkezik egy atom, milyen erők tartják ezeket össze és egy ilyen modellel hogyan magyarázhatók az anyag makroszkopikus tulajdonságai?

Az atomok szerkezetére vonatkozó ismereteinket *Julius Plücker (1801-68)* és *Johann Wilhelm Hittorf (1824-1914)* kísérletei bővítették, akik gázkisülési csövekkel végeztek kísérletet.

Alacsony nyomású csövekkel végzett kísérleteik során azt tapasztalták, hogy a gáz nyomását egyre jobban csökkentve a gázkisülés megszűnik, viszont a cső katóddal szembeni oldalán a cső fala fluoreszkál (5.1 ábra). A csőbe valamilyen akadályt helyezve – ezáltal annak árnyékát vetítve a cső falára – *Hittorf* volt az első, aki feltételezte, hogy a katódból valamilyen sugarak vezetnek a cső faláig. *Eugen Goldstein* (1850-1930) nevezte el ezeket a sugarakat *katódsugaraknak*. *Hittorf* további kísérletei mágneses tér alkalmazásával kimutatták, hogy a sugarakat alkotó részecskék töltése negatív.



2.1 ábra A katódból kilépő sugarak alacsony nyomású kisülési csőben

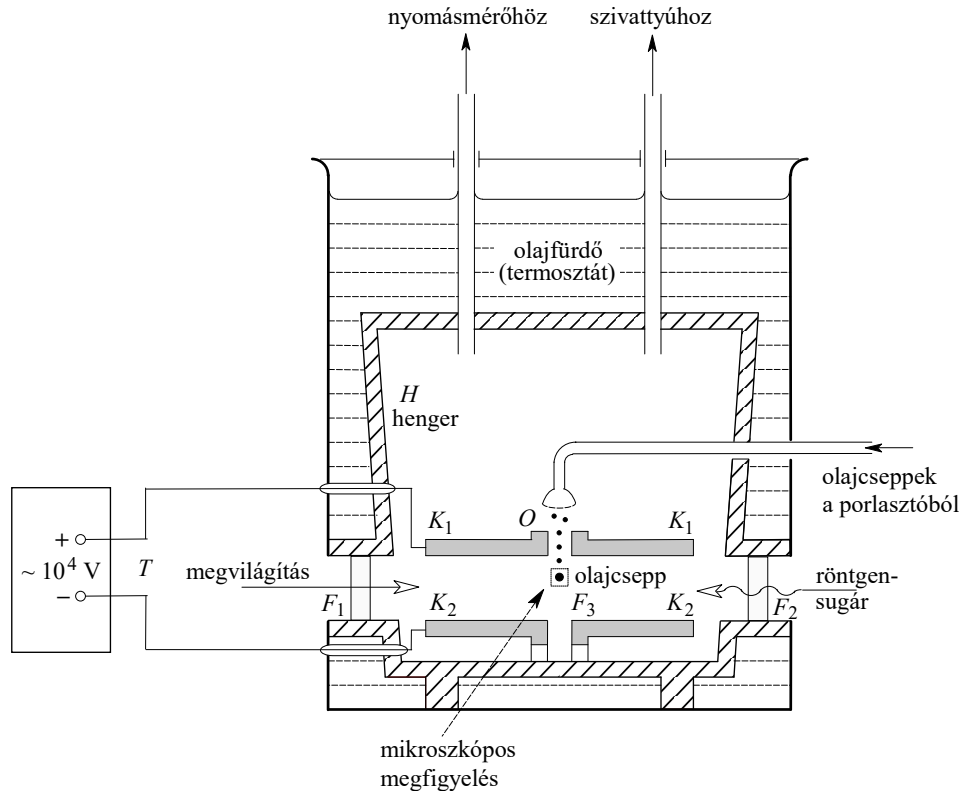
A katódsugarakat alkotó részecskék fajlagos töltése *Joseph John Thomson* (1856-1940) kísérletei alapján kb. 1800-szor nagyobbak adódtak, mint a H-ion elektrolízissel meghatározott fajlagos töltése. A katódsugarakat alkotó részecskék tehát a hidrogénatomnál kb. 1800-szor kisebb tömegű, vele azonos, de ellentétes töltésű *elektronok* (*George Johnstone Stoney*, 1826-1911). *Thomson* kísérletei alapján az is bizonyossá vált, hogy az elektronok fajlagos tömege független a katód anyagától és a kisülési csőben levő gáztól is, tehát egyértelműen az atomot alkotó elemi részecskék egyike.

Az elektront, mint az atomok egyik alkotórészét feltételezve született meg a *Thomson-féle atommodell*, ennek továbbfejlesztése volt a katódsugarak anyaggal való kölcsönhatását is figyelembe vevő *Lenard-féle atommodell*.

### 2.3 Az elemi töltés meghatározása

#### a) Millikan-kísérlet

Az elemi töltés létezésének közvetlen bizonyítékát a *Millikan-kísérlet* (1910) adta. *Robert Andrews Millikan* (1868-1953) kis olajcseppek mozgását vizsgálta párhuzamos vezetőik, mint egy kondenzátor fegyverzetei között. A kondenzátor vízszintes fegyverzetei közé spriccelt olajcseppeket ívlámpával világították meg és mozgásukat mikroszkópon keresztül vizsgálták (2.2 ábra). Az olajcseppek a porlasztás miatt, vagy röntgensugárzás hatására már bizonyos  $q$  töltéssel rendelkeznek.



2.2 ábra A Millikan-féle kísérleti berendezés az elemi töltés meghatározására

Amikor a kondenzátorra nem kapcsoltak feszültséget, az olajcseppek mozgását a gravitációs és a súrlódási (viszkózus) erők egyensúlya határozza meg, ekkor az olajcseppek konstans  $v_0$  süllyedési sebessége

$$v_0 = \frac{4\pi}{3} r^3 \frac{g(\rho_{olaj} - \rho_{lev})}{6\pi\eta r}, \quad (2-5)$$

ahol  $\eta$  a levegő viszkozitása és amiből meghatározható az olajcseppek sugara:

$$r = \sqrt{\frac{9\eta v_0}{2g(\rho_{olaj} - \rho_{lev})}}. \quad (2-6)$$

Ha a fegyverzetek közt egy olyan  $E_0$  elektromos térerősség van, hogy egy  $q$  töltésű olajcsepp állandó magasságban tartózkodik, akkor a rá ható erők egyensúlyára felírható, hogy

$$\frac{4\pi}{3} r^3 (\rho_{olaj} - \rho_{lev}) g = qE_0, \quad (2-7)$$

amelyből az adott csepp töltése meghatározható. A részecskék Brown-mozgása miatt ez a mérés elég pontatlan.

Pontosabban mérhető a csepp töltése, ha nem lebegni hagyjuk, hanem olyan feszültséget kapcsolunk a fegyverzetekre, hogy a csepp *állandó*  $v_1$  sebességgel *felfelé* mozogjon. Ekkor a cseppre ható erők eredője zérus és a csepp  $v_1$  sebességét kifejező egyenlet:

$$v_1 = \frac{qE_1 - \frac{4\pi}{3}r^3(\rho_{olaj} - \rho_{lev})g}{6\pi\eta r}. \quad (2-8)$$

Millikan azt találta, hogy *a cseppek töltése*, ill. röntgensugárzás hatására történő *töltésváltozása mindig csak egy minimális töltésmennyiség egész számú többszöröse*. A pontos mérések szerint ez az *elemi töltés*:

$$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}, \quad (2-9)$$

amely egyúttal az *elektron töltése*.

Megjegyezzük, hogy az eredeti Millikan-kísérletből kapott elemi töltésértékek függtek a csepp méretétől. Ennek oka, hogy a közegellenállást leíró Stokes-törvény csak akkor érvényes, ha a cseppek sugara nagyobb, mint az átlagos szabad úthossz. *1 bar* nyomáson a részecskék szabad úthossza kb.  $5 \mu\text{m}$ , tehát a  $10 \mu\text{m}$ -nél kisebb sugarú cseppekre egy korrekciót kell alkalmazni.

*h) A sörétzaj*

Az elemi töltés nagyságának meghatározására egy további lehetőséget jelent az elektronikus berendezésekben mérhető ún. *sörétzaj (shot noise)* vizsgálata. Ahogy a fény esetén, az „atomos” szerkezetű elektromos jelenségek esetén is vannak infinitezimális statisztikai áramingadozások. 1918-ban *Walter Hans Schottky* a katódsugárcsővekből kilépő elektronoktól származó áramingadozásokat vizsgálta. Az izzókatódból akkor léphet ki elektron, ha energiája nagyobb, mint a katód és a vákuum közti potenciálját. Mivel az elektronok energiája véletlenszerű, az időegység alatt kilépő elektronok száma ingadozik.

A katódból  $\Delta t$  idő alatt kilépő  $n$  számú elektron

$$i = \frac{ne}{\Delta t} \quad (2-10)$$

nagyságú áramot kelt, melynek átlagos értéke a mérhető egyenáram:

$$\langle i \rangle = I = \frac{\langle n \rangle e}{\Delta t}. \quad (2-11)$$

Ha a kilépő elektronok számának négyzetes középértéke

$$D^2(n) = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle, \quad (2-13)$$

akkor az áramingadozás szórásnégyzete (felhasználva a fenti átlagos elektronszámot)

$$\langle i^2 \rangle = \langle (i - I)^2 \rangle = \left( \frac{e}{\Delta t} \right)^2 \langle n \rangle = \frac{e}{\Delta t} I, \quad (2-14)$$

amelyből az elektron töltése meghatározható.

Az elemi töltés jelenleg elfogadott legpontosabb értéke:

$$e = (1.60217733 \pm 0.00000048) \times 10^{-19} \text{ C}.$$

#### 2.4 Az elektron fajlagos töltése

Az elektronnak töltésén kívül a tömege is fontos jellemzője, melynek meghatározásához az elektron mozgását elektromos és mágneses térben kell vizsgálnunk, ahol a  $q$  töltésű,  $v$  sebességgel mozgó részecskére az

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2-15)$$

Lorentz-erő hat. Derékszögű koordináta-rendszerben felírva az elektron mozgásegyenleteit

$$\ddot{x} = \frac{q}{m}(E_x + v_y B_z - v_z B_y), \quad (2-16)$$

$$\ddot{y} = \frac{q}{m}(E_y + v_z B_x - v_x B_z), \quad (2-17)$$

$$\ddot{z} = \frac{q}{m}(E_z + v_x B_y - v_y B_x) \quad (2-18)$$

látható, hogy elektromos és mágneses térben vizsgálva a részecske pályáját, nem közvetlenül a tömeg, hanem a  $q/m$ , ún. fajlagos töltés határozható csak meg.

##### a) Az elektron mozgása elektromos térben

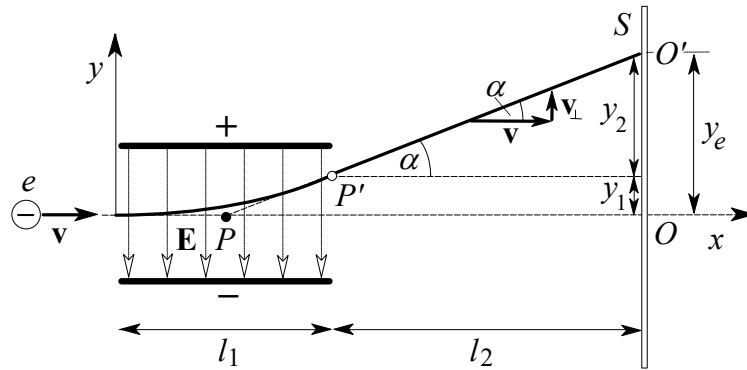
Időben állandó, homogén elektromos térben az elektronnra  $\vec{F} = -e\vec{E}$  erő hat. Ha a relativisztikus tömegnövekedéstől eltekintünk, az elektron mozgása hasonló a homogén, állandó gravitációs tér hatása alatt mozgó tömegpont mozgásához, általános esetben tehát pályája parabola lesz.

Tekintsünk egy olyan elrendezést, amikor a  $-e$  töltésű,  $v$  sebességű elektron egy síkkondenzátor homogén terébe lép, a fegyverzetekkel párhuzamosan (az elektromos térerősségre merőlegesen) (2.3 ábra).

Az elektron a kondenzátorlemezek közt parabolapályán mozog, majd  $l_1$  vízszintes távolság megtétele után a  $P'$  pontban elhagyja a kondenzátort. Ebből a pontból – erőhatás hiányában – egyenes vonalú egyenletes mozgással csapódik a kondenzátortól  $l_2$  távolságra elhelyezett ernyő  $O'$  pontjába. Egyszerű számolással igazolható, hogy az elektron eredeti (bemeneti) és becsapódási magassága közti különbség

$$y_e = \frac{e}{m} \frac{E}{v^2} l_1 \left( \frac{l_1}{2} + l_2 \right). \quad (2-19)$$

A berendezés geometriájából, a fegyverzetek közti feszültségből valamint az elektron kezdeti sebességéből a fajlagos töltés a fentiek alapján egyszerűen meghatározható.



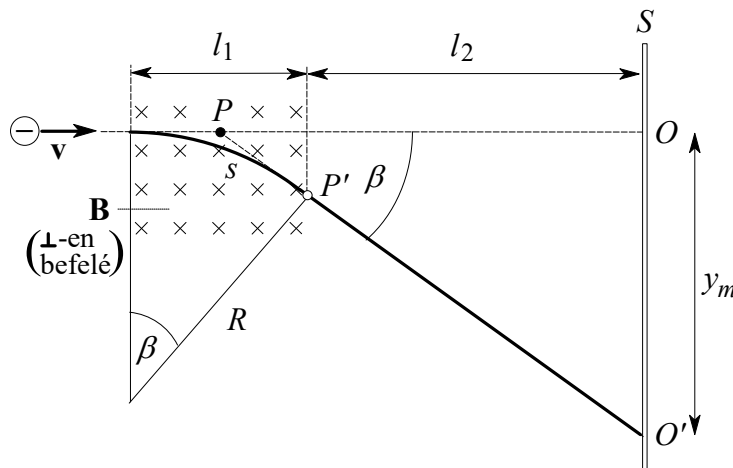
2.3 ábra Elektron mozgása a kezdeti sebességére merőleges elektromos térben

b) Az elektron mozgása mágneses térben

Az időben állandó, homogén mágneses térben mozgó  $q$  töltésű részecskére ható erő:

$$\vec{F} = q(\vec{v} \times \vec{B}). \tag{2-20}$$

Mivel ez az erő merőleges a sebességre, a részecske energiáját (sebességét) nem változtatja meg, csak az irányát. A részecske ilyen erő hatása alatt körpályán mozog. A következőkben megvizsgáljuk azt az egyszerű esetet, amikor az elektron kezdetben a  $\mathbf{B}$  térre merőlegesen mozog. Ekkor sebessége állandó, valamint állandó a rá ható Lorentz-erő is, melynek iránya mindig merőleges a sebességre. Ebből adódóan az elektron egy körpályán mozog, melynek síkja merőleges a mágneses térre.



2.4 ábra Elektron mozgása a pálya síkjára merőleges mágneses térben

A 2.4 ábrán látható,  $l_1$  szélességű mágneses térbe az elektron  $v$  sebességgel érkezik. A mágneses térben egy  $R$  sugarú köríven mozog, majd a teret a  $P'$  pontban elhagyva egyenes vonalú egyenletes mozgással csapódik a tértől  $l_2$  távolságban elhelyezett ernyő  $O'$  pontjába. Ha feltételezzük, hogy az

$$R = \frac{mv}{eB} \tag{2-21}$$

sugár sokkal nagyobb a mágneses tér  $l_1$  szélességénél, akkor egyszerű geometriai megfontolások alapján az  $y_m$  eltéréésre az

$$y_m = \frac{e B}{m v} l_1 \left( \frac{l_1}{2} + l_2 \right) \quad (2-22)$$

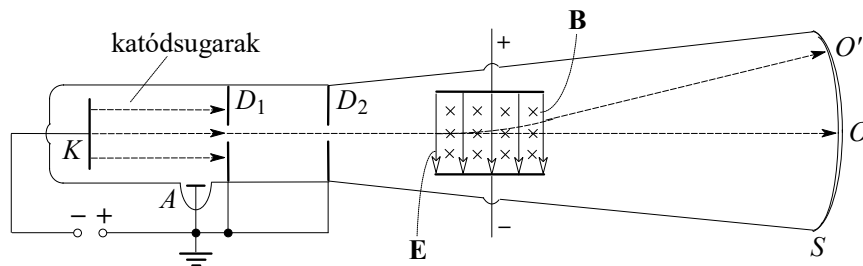
összefüggést kapjuk.

A következőkben néhány olyan alapvető, történetileg fontos kísérletet tárgyalunk, amelyek nagyban hozzájárultak az elektron fajlagos töltésének, ill. tömegének meghatározásához.

## 2.5 A fajlagos töltés meghatározása

### a) Thomson módszere

A fentiek alapján az elektromos és mágneses terekben mérhető eltérés függ a részecske (elektron) sebességétől is, így az  $e/m$  hányados közvetlenül nem határozható meg. *J. J. Thomson (1856-1940)* az általa végzett kísérletben (2.5 ábra) a terek irányát úgy választotta meg, hogy az eltérések ellentétes irányúak, de azonos mértékűek legyenek. A diafragmákkal kollimált elektronnyaláb a megfelelő irányú és nagyságú elektromos és mágneses tereken áthaladva nem szenved eltérést.



2.5 ábra Thomson módszere kombinált elektromos és mágneses terekkel

A két eltérítés nagyságának egyenlőségéből a fentiek szerint az elektron sebessége

$$v = \frac{E}{B}, \quad (2-23)$$

amelyből a mágneses tér kikapcsolása után az eltérítést már csak elektromos térben mérve a fajlagos töltés meghatározható:

$$\frac{e}{m} = \frac{E}{B^2} \frac{y_e}{l_1 \left( \frac{l_1}{2} + l_2 \right)}. \quad (2-24)$$

### b) Busch módszere

*Hans Walter Hugo Busch (1884-1973)* a fajlagos töltés meghatározására a mágneses fókuszálást alkalmazta. Az elektronnyaláb mágneses lencsékkel való fókuszálása az elektronmikroszkóp működésének alapja, ezért a tudományterületen végzett úttörő munkájáért Busch-t az elektronmikroszkóp atyjaként is emlegetik.



Korábbi tanulmányainkból tudjuk, hogy egy töltött részecske a sebességével  $\alpha$  szöget bezáró mágneses térben a térrel párhuzamos ill. arra merőleges sebességkomponenseitől függően csavarvonal mentén mozog. Elektron esetén egy körfordulás ideje

$$T = \frac{2\pi m}{B e}, \quad (2-25)$$

ugyanennyi idő alatt a térrel párhuzamosan megtett út (a „menetemelkedés”) pedig

$$s = Tv \cos \alpha, \quad (2-26)$$

ahol  $\alpha$  a sebességvektor és a tér által bezárt szög. Ha a mágneses tér egy pontjába azonos sebességű, de a tér irányával különböző (kicsiny)  $\alpha$  szögeket bezáró elektronok érkeznek, akkor a  $\cos \alpha \approx 1$  feltétel miatt ezek gyakorlatilag a térrel párhuzamosan ugyanakkora

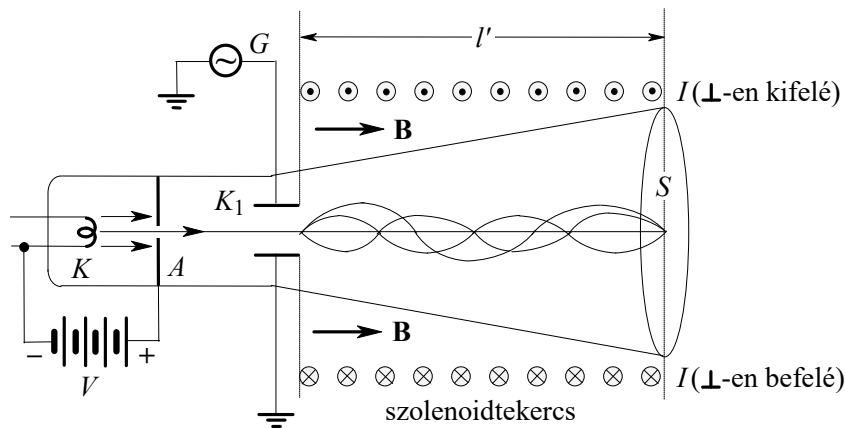
$$s = vT = 2\pi \frac{v m}{B e} \quad (2-27)$$

út megtétele közben tesznek egy teljes fordulatot, azaz a gyengén divergáló elektronnyaláb a mágneses térben  $s$  út megtétele után egy pontban fókuszálódik.

Busch kísérletében (2.6 ábra) a katódból kilépő,  $V$  feszültséggel

$$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}} \quad (2-28)$$

sebességre gyorsított és kollimált elektronnyalábot a  $K_1$  kondenzátorra kapcsolt váltakozó feszültség térítette el kis szögekkel. A katódsugárcső tengelyével párhuzamos mágneses teret a cső körül elhelyezett,  $l'$  hosszúságú áramjárta tekercs biztosította.



2.6 ábra A Busch-féle kísérleti elrendezés a fajlagos töltés meghatározására

Ha most a mágneses tér változtatásával olyan feltételt állítunk elő, hogy a mágneses tér  $l'$  hossza az  $s$  távolság egész számú többszöröse legyen

$$l' = nl, \quad (2-29)$$

akkor az elektronok az ernyő egy pontjába csapódva intenzív lumineszkáló pontot hoznak létre. A különböző  $n$  és nekik megfelelő  $B$  értékek mérésével a fenti egyenletek alapján az elektron fajlagos töltése kiszámítható:

$$\frac{e}{m} = \frac{8\pi^2 n^2}{l^2 B^2} V. \quad (2-30)$$

A fenti módszer alapján az elektron fajlagos töltésére

$$\frac{e}{m} = 1.7586 \times 10^{11} \frac{C}{kg}. \quad (2-31)$$

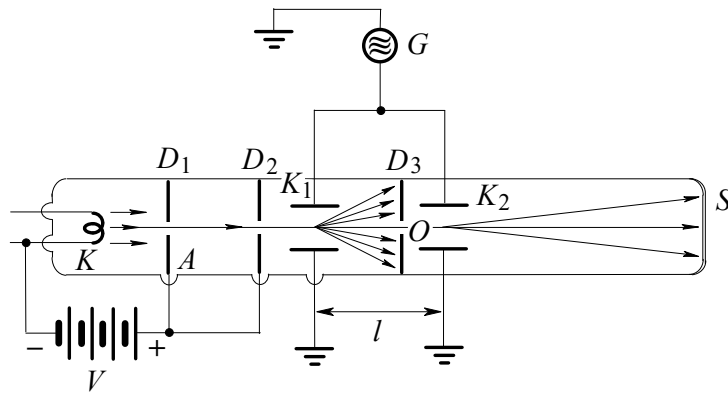
adódott.

### c) Kirchner módszere

A 2.7 ábrán látható Fritz Franz Kirchner (1896-1967) kísérleti elrendezésének sematikus rajza. A katódból kilépő elektronok a katód és az anód közti  $V$  feszültség hatására

$$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}} \quad (2-32)$$

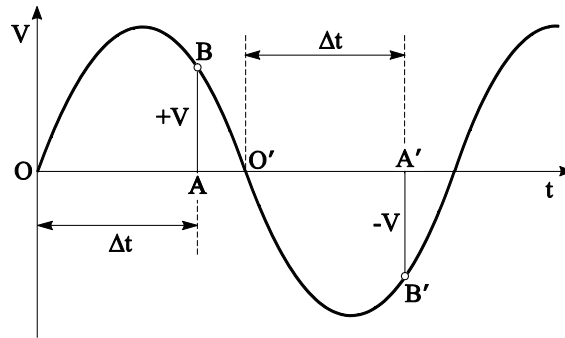
sebességre gyorsulnak, majd a  $D_1$  és  $D_2$  diafragmákon áthaladva egy párhuzamosított elektronnyalábot adnak.



2.7 ábra A Kirchner-féle elrendezés  $e/m$  meghatározására

A nyaláb áthalad a  $K_1$  kondenzátoron, amely a rákapcsolt váltófeszültség hatására periodikusan eltéríti őket. A kondenzátort követő diafragmán csak azok az elektronok jutnak át, melyek akkor haladták a  $K_1$ -en, amikor a fegyverzetek közti feszültség zérus volt. Ez a feltétel minden periódusban kétszer teljesül.

Tegyük fel, hogy egy  $K_1$ -ből kilépő elektron  $\Delta t$  idő alatt éri el  $K_2$ -t, amely ugyan arról a generátorról,  $K_1$ -gyel azonos fázisban kapja a feszültséget. A  $K_2$ -n való eltérítés iránya attól függ, hogy az elektron  $K_1$ -et a váltófeszültség milyen fázisánál hagyta el (2.8 ábra). Így a váltófeszültség frekvenciájától függően az elektronok a cső tengelye alatt és felett is becsapódhatnak az ernyőbe, ahol két világos pontot figyelhetünk meg.



2.8 ábra Az eltérítő feszültség irányának függése a fázistól

Ha az eltérítő feszültség frekvenciáját úgy választjuk meg, hogy az elektronok futási ideje a két kondenzátor közt megegyezik a periódusidő felével, akkor minden elektron eltérülés nélkül halad át a két kondenzátoron és az ernyőn egyetlen pontba csapódik be:

$$\Delta t = n \frac{T}{2} \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (2-33)$$

Ha tehát adott gyorsítófeszültség mellett az eltérítő kondenzátorokra adott feszültség frekvenciáját addig változtatjuk, míg az elektronok az ernyőn egyetlen pontba csapódnak be, akkor a fentiekből

$$\Delta t = \frac{l}{v} = l \sqrt{\frac{m}{2eV}} = n \frac{T}{2} = \frac{n}{2f}, \quad (2-34)$$

amiből

$$\frac{e}{m} = \frac{2f^2 l^2}{n^2 V}. \quad (2-35)$$

Az ezzel a módszerrel kapott érték:  $e/m = 1.7590 \times 10^{11} \text{ C/kg}$ .

Az elektron fajlagos töltésére ma elfogadott érték:  $e/m = (1.75890 \pm 0.00002) \times 10^{11} \text{ C/kg}$

## 2.6 Az elektron tömege

A fentiekben vázolt – az elektron töltésére és fajlagos töltésére vonatkozó – kísérletekből a jelenleg legpontosabb értékek felhasználásával az elektron *nyugalmi* tömege:

$$m_0 = (9.1083 \pm 0.0003) \times 10^{-31} \text{ kg} \quad (2-36)$$

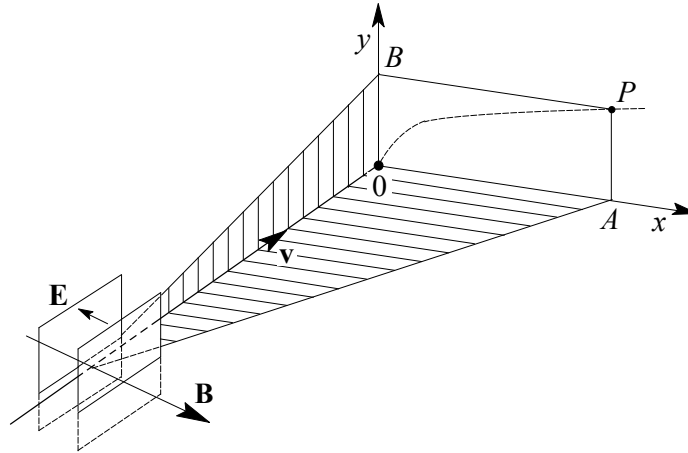
### a) A relativisztikus tömegnövekedés

A fajlagos töltés meghatározására irányuló kísérletekben azt tapasztalták, hogy a gyorsítófeszültség növelésével a mért fajlagos töltés csökken. Az elemi töltést változatlanul tekintve arra a következtetésre juthatunk, hogy az elektron tömege a sebesség növekedésével nő. A relativitáselmélet szerint ez a tömegnövekedés:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (2-37)$$

ahol  $c$  a fénysebesség.

Walter Kaufmann (1871-1947) volt az első, aki kísérletileg kimutatta, hogy az elektronok tömege nő a sebességükkel. Bár a mérések pontatlanok voltak, ez az Einstein-féle relativitáselmélet újabb bizonyítékát adta. Kísérleteiben Kaufmann az elektronnyaláb eltérítéséhez egyidejű elektromos és mágneses teret használt, melyek egymással párhuzamosan, de az elektronok sebességére merőlegesen voltak irányítva (2.9 ábra).



2.9 ábra Elvi vázlat az elektron tömege sebességfüggésének mérésére

Egy  $v$  sebességű elektront az elektromos tér az  $A$ -nak megfelelő vízszintes, a mágneses tér pedig a  $B$ -nek megfelelő függőleges pontokba térítené, ahogy azt már láttuk. Könnyen belátható, hogy ha  $e/m$  a sebességtől független, akkor a különböző sebességű elektronok által a becsapódáskor az ernyőn keltett görbe parabola lesz.

Ugyan az akkori mérések pontatlanok voltak, de jól látszott, hogy  $e/m$  függ a sebességtől, azaz a tömeg nő a sebességgel. Későbbi kísérletek eredményei a hibahatáron belül igazolták az elmélet által megjósolt tömegnövekedés nagyságát.

#### b) A tömeg és az energia

A speciális relativitáselmélet szerint a részecske  $m$  tömege és  $W$  energiája között fennáll:

$$W = mc^2, \quad (2-38)$$

ami a relativisztikus tömeg kifejezésével a következő alakba írható:

$$W = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (2-39)$$

Ha  $v \ll c$ , akkor sorfejtéssel kaphatjuk a következő eredményt:

$$W = m_0 c^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{v}{c} \right)^2 + \dots \right) = m_0 c^2 + \frac{1}{2} m_0 v^2 + \dots, \quad (2-40)$$

ami a részecske teljes energiáját jelenti. Látható, hogy eszerint még a nyugalomban lévő részecskének is van energiája, amit nyugalmi energiának neveznek. A teljes energia és a nyugalmi energia különbségét nevezzük a részecske kinetikai energiájának:

$$W_k = W - W_0 = m_0 c^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right). \quad (2-41)$$

A tömegnövekedést nem hanyagolhatjuk el, ha egy kölcsönhatás során az energianövekedés nem elhanyagolható a részecske nyugalmi energiájához képest. Ha a fenti egyenlet mindkét oldalát elosztjuk a nyugalmi energiával, kapjuk, hogy

$$\frac{W_k}{W_0} = \frac{m - m_0}{m_0} = \frac{\Delta m}{m_0}. \quad (2-42)$$

Például a kis nyugalmi tömegű, ezáltal kis nyugalmi energiájú elektront elektromos térben gyorsítva a tömegnövekedés már viszonylag kis gyorsítófeszültségek esetén érezhető hatását, ezért az elektron gyorsítására használt berendezésekben az elektronokat nem lehet csak a fénysebességet megközelítő és azt nem elérő sebességre gyorsítani. A gyorsításra gyakran használt ciklotronokban az elektronok nagy energiája esetén a tömegnövekedés miatt az elektronok „kiesnek” a gyorsító váltófeszültséggel való szinkronból. Az elektron nyugalmi energiája:

$$W_0 = m_0 c^2 = 5.11 \times 10^5 \text{ eV}, \quad (2-43)$$

tehát kb. 500 kV feszültséggel gyorsítva tömege megkétszereződik.

Ha egy  $e$  töltésű részecske  $V$  potenciálkülönbségen halad át, akkor energiájának növekedése:

$$\Delta W = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - m_0 c^2 = eV, \quad (2-44)$$

amiből

$$v = c \sqrt{1 - \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{eV}{m_0 c^2}\right)}}. \quad (2-45)$$

Ebből az látszik, hogy a gyorsítófeszültséget hiába növeljük a végtelenségig, a részecske sebessége a fénysebességhez tart. Ha  $V$  kicsi, akkor a fenti kifejezés átmegy a klasszikus

$$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}} \quad (2-46)$$

kifejezésbe.

### 2.7 Ellenőrző kérdések

- 1. Mondja ki Faraday első és második törvényét!
- Mi a fajlagos töltés? Hogyan viszonyul az elektron és a hidrogén-ion fajlagos töltése egymáshoz?
- Mi a praktikus jelentősége, ha az elektron eltérülését elektromos és mágneses tér együttese hatása alatt vizsgáljuk?
- Ismertesse az elektron fajlagos töltésének meghatározására vonatkozó Thomson-, Bush és Kirchner-féle kísérleti elrendezés lényegét!
- Váolja a „klasszikus” kinetikai energia és a relativisztikus tömegnövekedés kapcsolatát!

### 2.8 Feladatok

- Írja fel a Millikan-féle kísérletnek megfelelő körülményekre egy olajcsepp mozgását meghatározó dinamikai egyenletet! Milyen  $E$  térerősség tartozik az olajcsepp „lebegéséhez”?
- A Kirchner-féle módszer alkalmazásánál milyen frekvenciák esetén jön létre eltérülésmentes állapot, ha a gyorsító feszültség  $V = 500\text{V}$ , és a  $K_1$ ,  $K_2$  eltérítő lemezpárok távolsága  $l = 20\text{ cm}$ ?
- Milyen gyorsító feszültség tartozik az elektron nyugalmi tömegének 10%-os megnövekedéséhez?

### 3. Ionok, tömegspektrometria

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a szabad ionok keletkezéséhez vezető alapvető folyamatokat,
- ismeri az ionok fajlagos töltésének mérésén alapuló, tömegük mérésére szolgáló tömegspektrográfok működését,
- ismeri az izotópok szétválasztására szolgáló eljárásokat,
- képes értelmezni a tömegspektrográfokban alkalmazott irány és sebességfókuszálási módszereket.

Jelen fejezetben ismertetjük a szabad ionok keletkezéséhez vezető alapvető folyamatokat. Az olvasó megismeri a töltéssel bíró részecskék – elektromos és mágneses térben ható erők együttes hatására létrejövő – mozgását, a fajlagos töltés mérésén alapuló tömegspektrográfok felépítését, működését.

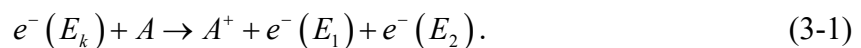
A fejezetben helyet kap az izotópok kérdésköre, beleértve az izotópok szétválasztására szolgáló technikákat.

Az előző fejezetben megismerkedtünk azokkal a kísérletekkel, melyek az elektron töltése és tömege hányadosának meghatározására irányultak. Szilárd fázisban az anyag ionizációja során általában csak az elektron válik le az atommagról, az így keletkezett pozitív ion rendszerint a kristályrácsban marad. A következőkben olyan jelenségeket tekintünk át, melyek szabad ionok, azaz egy vagy több elektronjuktól megfosztott atomok, atomcsoportok keletkezéséhez vezetnek. Gáz fázisban az ionizáció eredményeképp szabad elektronok és szabad ionok keletkeznek.

#### 3.1 Szabad ionok keletkezése

##### a) Ütközési ionizáció

A szabad ion-elektron párok keletkezésének legfontosabb folyamata az ún. *ütközési ionizáció*, amikor egy megfelelő nagyságú kinetikus energiával rendelkező elektron egy atomba ütközik és abból kilök egy másik elektront:



A folyamatra érvényes az energiamegmaradás, a beérkező  $E_k$  energiájú elektron egy  $E_i$  kötési energiájú (*ionizációs energia*) elektront kilök az atomból, majd a két elektron a fennmaradó energián osztozik:

$$E_k - E_i = E_1 + E_2, \quad (3-2)$$

vagy másképp: az elektron energiájának csökkenése a kötési energia és a kilökött elektron energiájának az összegével egyezik meg.

A folyamat valószínűsége függ az atomtól, a beérkező elektron kinetikus energiájától és az ionizációs energiától is. Általánosan ezeket az *ionizációs hatáskeresztmetszettel* vehetjük figyelembe, ami annak a körnek a területe az atom körül, melyen belül az elektronnak át kell

haladnia ahhoz, hogy az atomot ionizálja. Gázkisülésekben az ütközéses ionizáció a szabad töltéshordozók keletkezésének elsődleges folyamata.

Ha az ionizáló részecske nem elektron, hanem egy másik,  $B^+$  ion, akkor az ion kinetikus energiája jóval nagyobb kell legyen az elektron ionizációs energiánál, mert ütközés során a  $B^+$  ion csak energiájának kis hányadát adja át az elektronnak.

c) *Fotoionizáció*

Ha egy atomot megfelelően rövid hullámhosszú (általában UV) fénnel világítunk meg, az abszorbeált energia az ionizációs küszöb fölé is tud gerjeszteni egy elektront. E folyamat hatása pl. az ionoszférában igen jelentős, ahol a napsugárzás ultraibolya része szinte az összes atomot ionizálja. A fotoionizáció hatáskeresztmetszete kicsi, ezért kevés szabad elektron keletkezik. Az UV tartományban működő lézerek intenzitása nagy lehet, tehát még a kis valószínűség mellett is jelentős mértékű fotoionizáció hozható létre, ezért a folyamat tanulmányozását napjainkban fokozott érdeklődéssel végzik.

d) *Töltéskicserélődés ütközések folyamán*

Ha egy semleges  $A$  atomok alkotta gázban egy  $B^+$  ion közel halad el egy  $A$  atom mellett, akkor az egy elektront tud átadni neki, ha az  $A$  atomok ionizációs energiája kisebb, mint a  $B$  atomoké:



Negatív ionok keletkezhetnek, ha egy „lassú” elektron semleges  $A$  atomokból álló gázban befogódik:



Ez utóbbi reakció csak abban az esetben játszódik le, ha az elektron kezdeti és az ion végső kinetikus energiájának különbségét egy harmadik fél abszorbeálni tudja. A folyamat fontos szerepet játszik a Föld atmoszférájában és a Nap fotoszférájában, ahol a *hidrogén anion* (v. *hidridion*) keletkezése során emittált fotonok alkotják a spektrum látható és közeli infravörös részét:

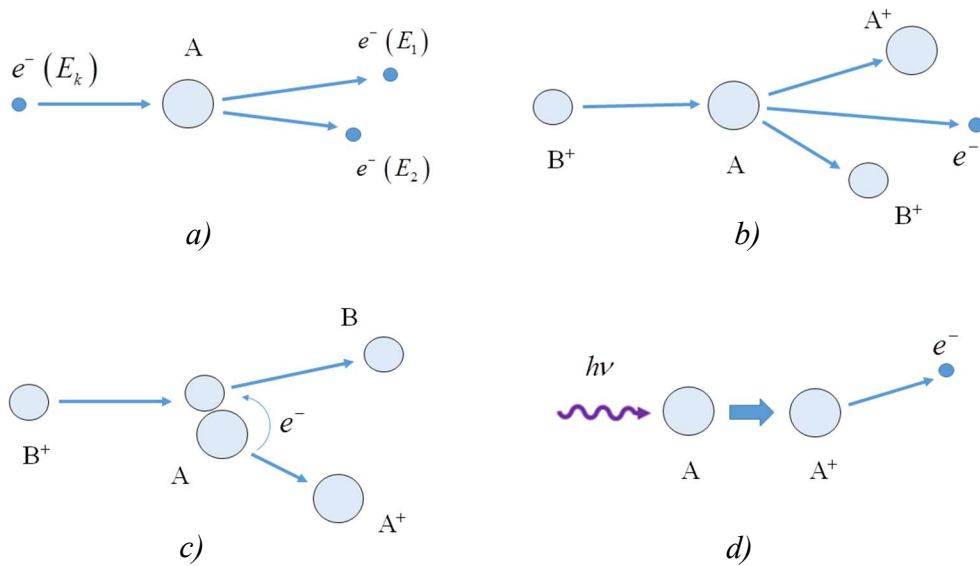


e) *Termikus ionizáció*

Nagyon magas hőmérsékleten az atomok kinetikus energiája már megfelelően nagy lehet az ionizáló atomi ütközésekhez. Ilyenkor az ütköző atomok relatív energiájától függően történhet ionizáció; az ütközésben résztvevő atomok bármelyike vagy mindkettő is ionizálódhat.

Néhány fentebb tárgyalt folyamat sematikus ábrája látható a 3.2 ábrán.



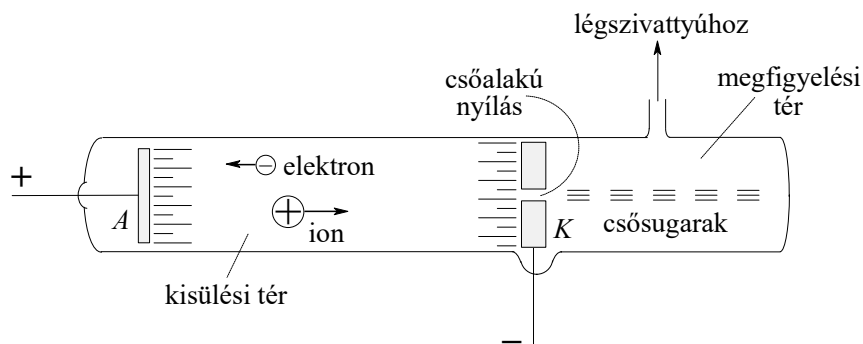


**3.1 ábra** Ionok keletkezése. a) elektronütközéses ionizáció, b) ionütközéses ionizáció, c) töltéscsere, d) fotoionizáció.

### 3.2 Csősugarak

A vákuumtechnika fejlődésével a kisülési csövekkel végzett kísérletek nagyban hozzájárultak az atomok elektronszerkezetének megismeréséhez. Többek közt *Plucker*, *J. J. Thomson*, és *Lénárd Fülöp* (*Philipp Lenard*, Nobel-díj, 1905) katódsugarakkal végzett kísérletei derítették fényt az elektron létezésére és alapvető tulajdonságaira, fajlagos töltésére.

1886-ban *Eugen Goldstein* (1850-1930) fedezte fel az ún. *csősugarakat*, melyek a kisülési csőben egy, a katódon vágott lyukon keresztül a katódsugárással (elektronokkal) ellentétes irányban repültek (3.1 ábra). 1897-ben *Wilhelm Wien* (1864-1928) a csősugarak fajlagos töltésének mérésével bizonyította, hogy azok a kisülési csőben található gáz pozitív töltésű atomjai. Az elektrolízisből már ismert töltéssel rendelkező atomok nyomán ezeket ionoknak nevezték el.



**3.2 ábra** A csősugarak kisülési csőben

A csősugarak elektromos és mágneses térben való eltérülése lehetőséget ad az ionok tömeg szerinti osztályozására, amely a modern tömegspektrometria alapja. A következőkben két alapvető korabeli technikát ismertetünk, melyek a mai tömegspektrométerek egyszerűsített modelljei.

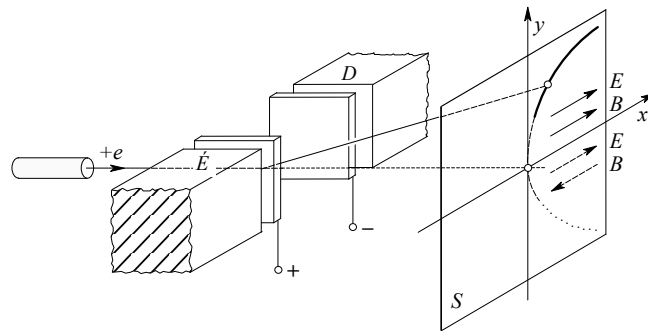
### 3.3 A Thomson-féle parabolamódszer

Az elektron fajlagos töltésének mérésekor megvizsgáltuk, hogyan viselkedik egy elektron elektromos ill. mágneses térben. Ha a 3.3 ábrán látható módon, egymással parallel vagy antiparallel irányítású elektromos és mágneses teret egyszerre alkalmazunk, akkor az azonos  $q/m$  fajlagos töltéssel rendelkező, de különböző sebességű részecskék egy parabolaívét írnak le. Egy ionforrásból származó, rögzített feszültséggel gyorsított részecskék az egymással párhuzamos, megfelelő geometriájú elektromos és mágneses térbe lépve eltérülnek eredeti irányuktól. Az elektromos tér  $x$ , a mágneses tér  $y$  irányba téríti el a  $v_0$  sebességű részecskét, a következő összefüggések alapján:

$$x = \frac{E}{v_0^2} \frac{q}{m} l_1 \left( \frac{1}{2} l_1 + l_2 \right), \quad (3-6)$$

$$y = \frac{B}{v_0} \frac{q}{m} l_1 \left( \frac{1}{2} l_1 + l_2 \right), \quad (3-7)$$

ahol  $l_1$  és  $l_2$  az elrendezés geometriájára jellemző állandók.



3.3 ábra Töltött részecske eltérése egymással párhuzamos elektromos és mágneses térben

Az előző fejezetben megismertek alapján, a  $v_0$  sebesség kiküszöbölésével a parabola egyenlete:

$$x = \frac{1}{(q/m)} \frac{E}{B^2} \frac{1}{l_1 \left( \frac{1}{2} l_1 + l_2 \right)} y^2. \quad (3-8)$$

A csak elektromos vagy csak mágneses teret alkalmazó módszerek esetén rögzített  $U$  gyorsítófeszültség esetén  $v_0$  függ a fajlagos töltéstől, hiszen

$$v_0 = \sqrt{\frac{2qU}{m}} = \sqrt{\frac{q}{m}} \sqrt{2U}. \quad (3-9)$$

A Thomson-féle parabolamódszernél a részecskék sebességeloszlása bármilyen lehet, egy adott  $q/m$  esetén a részecskék ugyanannak a parabolának a ( $v_0$ -tól függő) pontjaiba csapódnak be, más  $q'/m$  esetén pedig egy másik parabola pontjaiba.

A kísérletek szerint bizonyos elemek többféle variációban előfordulhatnak, annak ellenére, hogy kémiai tulajdonságaik azonosak. Az azonos töltésű, de különböző tömegű részecskék a fotolemezen százalékos előfordulásukkal arányos feketedést (a modern detektorokon magasabb

időegységenkénti beütésszámot) produkálnak. Protonszámuk megegyezik, de tömegük különböző lehet; ezeket a periódusos rendszerben „azonos helyet” elfoglaló atomokat *izotópoknak* nevezzük. Thomson neongázzal töltött kisülési csőben a fenti módszerrel sikeresen különválasztotta és kimutatta a *Ne* 20-as és 22-es tömegszámú izotópjainak létezését. A *Ne* egyébként még rendelkezik egy harmadik (21-es tömegszámú) stabil izotóppal is, de annak előfordulása nagyon ritka.

### 3.4 Tömegspektrográfok

A tömegspektrográfok az ionizált atomok, molekulák – elektromos és mágneses térben történő ellentéren alapuló – a tömeg meghatározására szolgáló berendezések.

A spektrográfok *felbontóképességét* az optikai felbontóképesség analógiájára az  $m/\Delta m$  hányadossal definiálhatjuk, amely a tömeg és a készüléssel még éppen mérhető minimális tömegkülönbség hányadosa. A Thomson-féle spektrográf felbontóképessége kb. 10-20, az Aston-féle 300 körüli érték, de a kettős fókuszalású spektrográfokkal akár  $10^4$ - $10^5$  érték is elérhető. A nagy felbontást igénylő precíziós magfizikai kutatásokon (pl. tömegdefektus mérése) kívül a kémiában (pl. gázanalízis), geológiában és az iparban kisebb felbontású tömegspektrométereket használnak.

Thomson eredeti módszerével a *Ne* 21-es tömegszámú izotópjá nem volt kimutatható. A tömegspektrométerek két alapvető fontosságú tulajdonsága az *érzékenység* és a *felbontás*. A Thomson-féle spektrométerben az eltérített részecskék térre merőleges hőmozgása miatt a parabolák kiszélesedettek, elmosódottak voltak, így nagyon kis  $q/m$  különbségű izotópok által kirajzolt parabolák átfednek, nem különíthetők el egymástól. A spektrométer *feloldásán* vagy *felbontásán* azt a relatív tömegkülönbséget értjük, ami már egyértelműen jelzi a különböző fajlagos töltésű részecskéket, azaz egy adott  $m$  tömegű részecskétől meg tudjuk különböztetni az  $m+\Delta m$  tömegűt:

$$\delta = \frac{m}{\Delta m}. \quad (3-10)$$

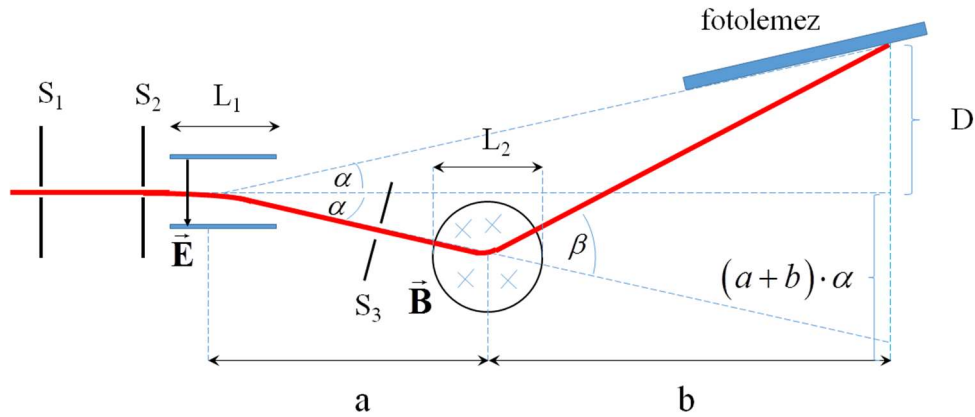
Értelemszerűen minél nagyobb a felbontás, annál jobb a spektrométerünk.

A spektrométer másik fontos paramétere az *érzékenység*, ami a minimális detektálható részecskék számát (beütésszám, feketedés) jelenti. A nagy érzékenység és nagy jel/zaj viszony érdekében az összes azonos tulajdonságú részecskét fel kell használnunk és a detektor egy pontjába kell irányítanunk.

Bár a modern transzmissziós elektronmikroszkópokban alkalmazott elektron- ill. ionoptika – azaz a mágneses és elektromos terekkel való részecskenyaláb-fókuszálás – túlmutat e jegyzet határain, mindenképpen meg kell említenünk a tömegspektrometria alapját képező *irány- és sebességfókuszálást*. A továbbiakban e két módszerre mutatunk példákat.

#### a) Az Aston-féle tömegspektrográf

Az azonos tömegű ionok egy pontba való fókuszálását *Francis William Aston (1877-1945)* oldotta meg, az ún. *sebességfókuszálás* módszerével. Ennél a módszernél az elektromos és mágneses terek térben külön vannak választva és orientációjuk olyan, hogy ellentétes irányban térítik el a részecskéket. Az Aston-féle tömegspektrográf felépítése a *3.4 ábrán* látható.



3.4 ábra Az Aston-féle tömegspektrográf sematikus vázlata

A beérkező ionsugarat az  $S_1$  és  $S_2$  rések kollimálják és párhuzamos nyalábként lép be az  $L_1$  hosszúságú elektromos térbe (pl. egy kondenzátor fegyverzetei közé). Az elektromos tér okozta eltérülésre:

$$\tan \alpha = \frac{qEL_1}{mv^2}. \quad (3-11)$$

Az eltérített nyaláb ezután egy  $L_2$  szélességű mágneses térbe jut, ahol az előbbivel ellentétes irányú eltérítés:

$$\tan \beta = \frac{qBL_2}{mv}. \quad (3-12)$$

Kis eltérítési szögekre a tangens az argumentumával helyettesíthető, amelyből:

$$\frac{d\alpha}{dv} = -\frac{2qEL_1}{mv^3} = -\frac{2\alpha}{v} \quad (3-13)$$

$$\frac{d\beta}{dv} = -\frac{qBL_2}{mv^2} = -\frac{\beta}{v}. \quad (3-14)$$

A teljes függőleges eltérítés:

$$D \approx (a+b)\alpha - b\beta. \quad (3-15)$$

Az azonos  $q/m$  fajlagos töltésű, de különböző sebességű ionok azonos eltérülésének feltétele:

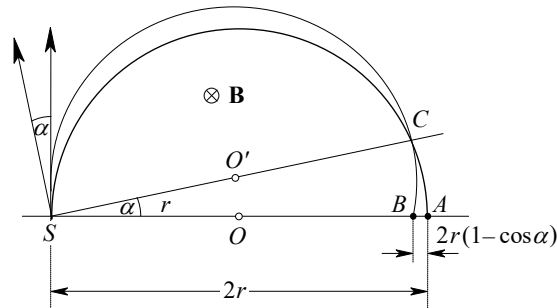
$$\frac{dD}{dv} = (a+b)\frac{d\alpha}{dv} - b\frac{d\beta}{dv} = -\frac{2\alpha(a+b)}{v} + \frac{\beta b}{v} = 0. \quad (3-16)$$

Ha tehát a fenti elrendezésben helyezzünk el egy detektort, akkor adott  $q/m$  esetén az ionok a detektor egyetlen pontjában fókuszálódnak, sebességüktől függetlenül. Az  $S_3$  rés segítségével szabályozhatjuk azt a szögtartományt (sebességtartományt), amelyet vizsgálni szeretnénk. Mivel a különböző sebességű, azonos  $q/m$ -mel rendelkező részecskék ugyanabba a pontba, és nem egy parabola különböző pontjaiba csapódnak be, az Aston-féle spektrográf sokkal érzékenyebb a Thomson-féle parabolamódszernél.

Aston volt az, aki tömegspektrográfja segítségével adott magyarázatot a *Prout-hipotézistől* való eltérésekre, azaz arra, hogy az elemek tömege nem mindig pontosan a hidrogénatom tömegének egész számú többszöröse. A neon 20.2-es tömegszámát azzal magyarázta, hogy a gáz két izotóp, a 20-as és a 22-es tömegszámú 9:1 arányú keveréke. Az elemek izotópjainak vizsgálatáért 1922-ben kémiai Nobel-díjat kapott.

### b) Irányfókuszálás

Az eddigiekben feltettük, hogy a spektrográfba jutó ionnyaláb párhuzamos. Bár ez közelítőleg mindig elérhető diafragmák használatával, az intenzitás négyzetesen csökken a kollimálás félszögével. Az *irányfókuszálás* módszerével a felbontás csökkenése nélkül elérhető, hogy a bemeneti résre kicsit eltérő irányból érkező részecskék a kimeneti rés egy viszonylag szűk tartományába fókuszálódnak. A módszert először *Arthur Jeffrey Dempster* (1886-1950) alkalmazta spektrográfjában. Az elrendezés alapja egy  $180^\circ$ -os középponti szögű körcikk, melyen belül a mágneses tér a lap síkjára merőleges (ld. 3.5 ábra).



3.5 ábra A Dempster-féle tömegspektrográf elve

Az  $S$  bemeneti réshez a lap síkjában az  $SO$  egyenesre merőlegesen érkező,  $v$  sebességű,  $q/m$  fajlagos töltésű részecske a mágneses tér hatása alatt egy félkörívet ír le, melynek sugara

$$r = \frac{mv}{qB}, \quad (3-17)$$

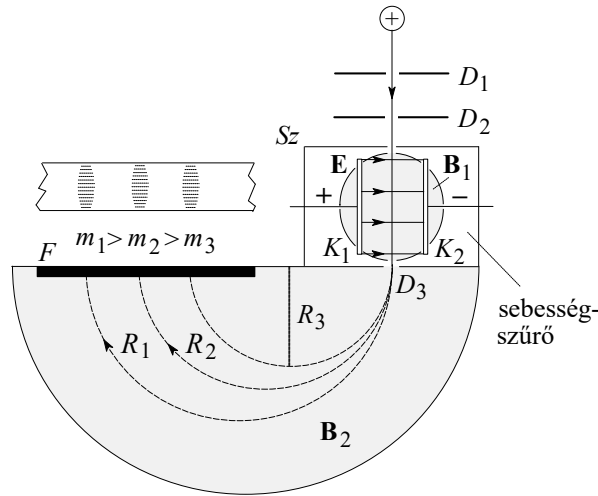
majd ezután becsapódik az  $A$  pontba. Egy azonos  $q/m$  fajlagos töltésű, az előbbivel  $\alpha$  szöget bezáróan érkező részecske ugyancsak  $r$  sugarú körpályán mozog, majd az  $SO$  egyenesen levő  $B$  pontba jut. Geometriai megfontolásokkal igazolható, hogy az  $AB$  távolság:

$$AB = 2r(1 - \cos \alpha) \approx 2r \frac{\alpha^2}{2} = r\alpha^2, \quad (3-18)$$

ahol a  $\cos$  függvény sorfejtését alkalmaztuk. Hasonlóan látható be, hogy az  $SO$  normálisától ellentétes irányba  $\alpha$  szöggel elhajló nyaláb is ugyanabba a  $B$  pontba jut, az  $\alpha$ -nál kisebb szögeltéréssel induló részecskék pedig valahol az  $A$  és  $B$  pontok között érik el a kimeneti rést. Például, ha a beérkező részecskéket a mágneses tér beállításával egy  $r = 10 \text{ cm}$  sugarú körpályára kényszerítjük, akkor a kilépő rés szélességét kb.  $275 \mu\text{m}$ -re állítva csak azok a részecskék jutnak át a résen, amelyek  $SO$  normálisával  $\pm 3^\circ$ -ot zárnak be.

## c) A Bainbridge-féle tömegspektrográf

A modern tömegspektrográfok a sebesség- és irányfókuszálást egymás után alkalmazzák, az egyik ilyen a Bainbridge-féle tömegspektrográf (Kenneth Bainbridge, 1904-1996), mely a 3.6 ábrán látható.



3.6 ábra A Bainbridge-féle tömegspektrográf elvi felépítése.

A  $D_1$  és  $D_2$  diafragmák által párhuzamosított ionnyalábot a rá merőleges  $\mathbf{E}$  elektromos, valamint a nyalábra és az elektromos térre egyaránt merőleg  $\mathbf{B}_1$  mágneses terek egymással ellentétes irányba térítik el. A  $D_3$  diafragmán csak azok a részecskék jutnak át, melyekre e két eltérítő erő kompenzálja egymást, azaz:

$$qE = qvB_1, \quad (3-19)$$

tehát

$$v = \frac{E}{B_1}. \quad (3-20)$$

A  $D_3$  résen kilépő részecskék egy a sebességükre merőleges  $\mathbf{B}_2$  mágneses tér hatására egy

$$R = \frac{v}{B_2} \frac{m}{q} \quad (3-21)$$

sugarú körpályára kényszerülnek, majd egy félkör megtétele után a detektorba csapódnak, ahol a különböző  $q/m$  fajlagos töltésű ionok egymástól elkülönülő nyomokat hagynak. Ebből következik, hogy ha a részecskék sebessége (a sebességfókuszálás miatt) és töltése megegyezik, akkor azok a tömegükkel arányos sugarú körpályán mozognak és ennek megfelelő jelet adnak a detektoron.

### 3.5 Izotópok

Az elemek túlnyomórészt különböző izotópjaik állandó arányú (relatív gyakoriságú) keverékei, amely arány független az elem eredetétől. Jelenleg 20 olyan tiszta elem (köztük pl. az arany) ismert, amely csak egyetlen izotópból áll. Az izotópok arányának állandóságának köszönhető, hogy az elemek tömegszáma (atomsúlya) állandó, hiszen ez utóbbi mennyiség az

izotópok előfordulási gyakoriságával súlyozott átlag. Az izotópok atomsúlya (tömegszáma) kerekítésével kapott egész számot az elem vegyjeléhez felső indexként írunk.

Az atomsúly az *atomi tömegegység* (angolul *AMU*, *Atomic Mass Unit*) a 12-es tömegszámú szénatom tömegének 1/12-ed része:

$$1 \text{ AMU} = \frac{1}{12} m(^{12}\text{C}) = 1.66044 \times 10^{-27} \text{ kg} . \quad (3-22)$$

A 3.1 táblázat az atomok tömegét tartalmazza, magának az atommagnak a tömegét az elektronok tömegének levonásával kaphatjuk meg. Az elektron tömege  $0.0005486 \text{ AMU}$ .

Elem	Izotóp	Tömeg [AMU]	Relatív gyakoriság [%]
${}_1\text{H}$	${}^1\text{H}$	1.007811	99.985
	${}^2\text{H}=\text{D}$	2.014085	0.015
	${}^3\text{H}=\text{T}^*$	3.016045	$\approx 10^{-10}$
${}_2\text{He}$	${}^3\text{He}$	3.015629	$1.3 \times 10^{-4}$
	${}^4\text{He}$	4.002587	$\approx 100$
${}_6\text{C}$	${}^{12}\text{C}$	<b>12.000000</b>	98.890
	${}^{13}\text{C}$	13.003354	1.110
${}_8\text{O}$	${}^{16}\text{O}$	15.994913	99.759
	${}^{17}\text{O}$	16.999131	0.037
	${}^{18}\text{O}$	17.998776	0.204
${}_{17}\text{Cl}$	${}^{35}\text{Cl}$	34.967720	75.400
	${}^{37}\text{Cl}$	36.965944	24.600
${}_{92}\text{U}$	${}^{234}\text{U}^*$	234.038570	0.006
	${}^{235}\text{U}^*$	235.050250	0.720
	${}^{238}\text{U}^*$	238.056290	99.274

3.1 táblázat Néhány elem természetes és radioaktív (\*) izotópjai

A hidrogén izotópjai az  ${}^1\text{H}$ , melynek magja a *proton*, a  ${}^2\text{H}$  vagy D (*deutérium*), melynek atommagja a *deuteron* és a  ${}^3\text{H}$  vagy T (*trícium*), melynek atommagja a *triton*. A trícium nem stabil,  $\beta$ -bomlás útján  ${}^3\text{He}$ -má alakul, felezési ideje kb. 12.32 év.

A hidrogén és az oxigén 3-3 izotópjá összesen 18, a trícium elhanyagolásával 9-féle vízmolekulát alkothat, melyek rendre  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$  és  $\text{D}_2^{16}\text{O}$ , valamint ugyanezek a 17-es és a 18-as tömegszámú oxigénnel. A hagyományosan *nehésvíznek* nevezett  $\text{D}_2\text{O}$  olvadás- és forráspontja  $3.81 \text{ }^\circ\text{C}$  ill.  $101.4 \text{ }^\circ\text{C}$ , sűrűségének maximuma  $11.2 \text{ }^\circ\text{C}$ -on van.

Egy elem izotópjai ill. az ezekből álló molekulák fizikai és kémiai tulajdonságai kissé eltérőek, ezt nevezzük *izotópeffektusnak*. Ilyenek pl. az atom- és molekulaszpektrumokban tapasztalható eltérések, melyek az izotópok (pl. H és D) vagy az ezekből álló molekulák (pl.  $\text{H}_2\text{O}$  és  $\text{D}_2\text{O}$ ) különböző tömege miatt lépnek fel; a deutériumot pont az *izotópeltolódás* miatt fedezték fel. További, az izotópeffektusra visszavezethető tulajdonságok pl. a gőznyomás, olvadás- és forráspont-különbség, diffúzió és reakciósebesség is.

Az izotópeffektusok a könnyű elemeknél könnyebben kimutathatók (hiszen nagyobb a relatív különbség), ezért ezt felhasználhatjuk az elemek izotópösszetételének meghatározására, valamint egy adott elem izotópjainak szétválasztására is.

### 3.6 Izotópok szétválasztása

Az elemek izotópjainak nagy mennyiségben való szétválasztásának igénye nem meglepő módon hadászati eredetű. Miután felfedezték az urán hasadásában rejlő lehetőségeket, hatalmas összegeket költöttek arra, hogy a 235-ös tömegszámú uránizotópot kinyerjék vagy *feldúsítsák* a természetes uránban. A természetben előforduló urán két leggyakoribb izotópjá az  $^{238}\text{U}$  (99.27%) és a  $^{235}\text{U}$  (0.72%), melyek közül az utóbbi képes láncreakcióra (a 238-as is hasítható, de spontán módon kisebb valószínűséggel hasad). Az önfenntartó nukleáris reakció eléréséhez a 235-ös urán arányát növelni kell az anyagban, melyre többféle – igen alacsony hatásfokú – módszert dolgoztak ki a II. világháború és a hidegháború idején, főként a *Manhattan Project* égisze alatt futó kutatások eredményeként.

Az izotópdúsítás ipari méretekben azóta is csak a nukleáris alkalmazásokkal összefüggően valósult meg, pl. urándúsítás reaktorok üzemanyagaként és nukleáris fegyverekhez, a hidrogén izotópjainak szétválasztása a reaktorokban moderátorként alkalmazott nehézvíz előállítására és a  $^6\text{Li}$  dúsítása termonukleáris fegyverekhez.

Mivel az izotópok kémiaiul ugyanúgy viselkednek, ezért kémiai úton történő szeparációjuk nem lehetséges. Az urán 235-ös és 238-as tömegszámú izotópjai tömegkülönbsége olyan kicsi, hogy a fizikai szétválasztás is rendkívül nehézkes, időigényes és drága. Kezdetben kézenfekvőnek tűnt, hogy az izotópok szétválasztására a fentebb megismert tömegspektrográfok módosított változatait használják, de a hatalmas energiaigény és a rendkívül kicsi hatásfok miatt ez a módszer egyáltalán nem terjedt el.

#### a) Centrifugálás

Egyik lehetséges módszerként a centrifugálás jöhet szóba, melynek lényege, hogy egy függőleges tengely körül forgó centrifugában a kisebb tömegű atomokra nem hat akkora centrifugális erő, ezért ezek a tengely környékén mozognak, míg a nagyobb tömegű izotópok nagyobb sugarú körön, a tartály falának közelében koncentrálódnak. A tengely közelében mozgó, könnyebb atomokat kivonják a centrifugából, a többi pedig további centrifugákba juttatják újabb dúsításra.

A módszert 1940-ben Jesse Beams alkalmazta először a klór 35-ös és 37-es tömegszámú izotópjainak szétválasztására, aki aztán kormányzati pénzt is nyert urándúsításra. A II. világháború alatt már kiderült, hogy sem a hatásfok, sem az ipari mennyiségű termelés nem volt megoldható ezzel a módszerrel; nem tudtak olyan stabil centrifugát készíteni, ami az elvárt mennyiséget produkálta volna. Természetesen több száz, több ezer egymás után következő (ún. kaszkád) egység működött, ami rendkívül drágává tette a berendezést.

A Szovjetunióban az 1950-es évek elején sikerült stabil centrifugát készíteni, majd az 50-es évek végén az Egyesült Államok is megoldotta a problémát és máig ez utóbbi módszer a legelterjedtebb a világon.

#### b) Gázdifúziós szeparáció

Miután az USA feladta a centrifugával való kísérletezést, érdeklődésük a gázdifúzió felé fordult. Gázmolekulák porózus membránon való átjutására jellemző, hogy az átjutás sebessége



fordítottan arányos a molekulatömeggel. Porózus falú csőben különböző izotópokból álló gázt áramoltatva a kisebb tömegű izotópok gyorsabban diffundálnak át a membránon, így az izotópok szétválaszthatók.

A urándúsítást  $\text{UF}_6$  (urán-hexafluorid) gázzal végezték, amely az egyik legkorrozívabb gáz. Ez további problémákat vetett fel pl. a csövek korrózióvédelme és a tömitések minősége terén. Ezeknek a főként hadászati fejlesztéseknek a manapság mindennapokban használatos „mellékterméke” a korrózióvédő nikkel-bevonat és a Teflon.

### c) Lézeres izotóp-szeparáció

Jóval a lézer megjelenése után, az 1970-es évektől kezdődően kezdték vizsgálni a lézeres urándúsítás lehetőségét. A magtömegek kis különbségének köszönhetően az atomok egyes izotópjainak energiaszintjei kismértékben el vannak tolódva egymáshoz képest. Megfelelően keskeny sáv szélességű sugárzást alkalmazva az izotópok szelektíven gerjeszthetők, azaz elérhető, hogy egy keskeny sáv szélességű lézerfény pl. csak a 235-ös tömegszámú uránt gerjessze, a 238-asat ne. Ezen módszer hatékony alkalmazásához természetesen az kellett, hogy kellően nagy intenzitású és precízen hangolható lézerek álljanak rendelkezésre, hogy a kis hullámhosszkülönbségű energiaszintek szelektíven gerjeszthetők (ionizálhatók) legyenek.

A folyamatban magas hőmérsékleten elpárologtatott uránatomokat használnak (*AVLIS, Atomic Vapour Laser Isotope Separation*). Az ionizáció több lépésben történik megfelelő hullámhosszra hangolt festéklézerek szinkronizációjával. Az ionizációs szintig gerjesztett  $^{235}\text{U}$  atom leadja egy elektronját, pozitív töltésű ionná válik, amit már elektromágneses módszerekkel elkülöníthetünk a 238-as tömegszámú, elektromosan semleges izotóptól.

A dúsítás mértékét a felhasználás szabja meg, reaktorok üzemanyagaként <20 %-os, nukleáris fegyverekben 20-85 %-os dúsítású uránt használnak. Emlékeztetünk, hogy a természetes uránban a 235-ös izotóp 0.7 %-os arányban fordul elő. A dúsítás során melléktermékként keletkezett, 0.7 %-nál kisebb  $^{235}\text{U}$  tartalmú, ún. szegényített uránt is felhasználják. Nagy sűrűsége (az ólom sűrűségének kb. 1.7-szerese) miatt pl. páncéltörő lövedékekben alkalmazzák, hiszen ugyanakkora méret mellett nagyobb energia érhető el vele, pirofóros tulajdonsága miatt pedig ideális gyújtólövedék alapanyag is. A civil szférában elsősorban radioaktív árnyékolásra, vitorlások tökesúlyaként ill. repülőgépekben ballasztanyagként használják.

### 3.7 Ellenőrző kérdések

- Milyen – ionizációhoz vezető – folyamatokat ismer?
- Mi a csősugárzás?
- Mik a tömegspektrográfok legfontosabb értékmérői?
- Mi a sebesség és irányfókuszálás lényege?
- Sorolja fel a legfontosabb tömegspektrográf típusokat!
- Mik az izotópok, illetve mi az izotópeffektus?
- Milyen lehetőségei vannak az izotópok szétválasztásának?

### 3.8 Feladatok

- Milyen felbontású tömegspektrográf szükséges a hidrogén, a klór és az urán izotópjainak szétválasztásához?
- A Bainbridge-féle tömegspektrográfban alkalmazott sebességfókuszálás esetén milyen pontosságú (szórású) elektromos és mágneses tér szükséges 1%-os sebességszórás eléréséhez? (A  $D_1$ ,  $D_2$  és  $D_3$  diafragmák elegendően kicsinyek.)
- A Dempster-féle tömegspektrométerben alkalmazott irányfókuszálás esetén mekkora kilépő rés szükséges, ha  $r = 25$  cm (lásd 3.5 ábra), és  $\alpha = \pm 5^\circ$ -os szögben érkező részecskéket kívánunk vizsgálni?

## 4. Atommodellek

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri az atomok felépítésére vonatkozó ismereteink fejlődésének legfontosabb mérföldköveit,
- ismeri az atommodelleket,
- képes értelmezni és magyarázni az elektron abszorpciójára, az  $\alpha$  részecskék szóródására vonatkozó kísérleti eredményeket, illetve ezeknek a különböző atommodellekhez való kapcsolatát,
- elfogadja és vizsgálataiban során szem előtt tartja az atommag tulajdonságaira vonatkozó új ismereteket.

Jelen fejezetben ismertetjük az atomok jelenleg elfogadott felépítésének megismeréséhez vezető út legfontosabb mérföldköveit; a Thomson, a Lenard és a Rutherford-féle atommodell legfontosabb alapvetéseit.

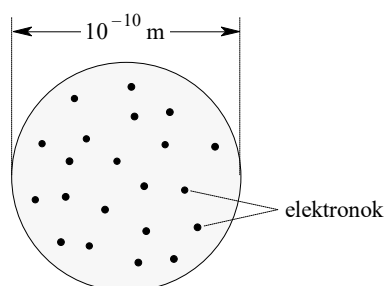
A fejezet az egyes atommodellek bemutatásával párhuzamosan – a történetiséget követve – ismerteti azon kísérleti megfigyeléseket, eredményeket, amelyek a kérdéses atommodellnek egy újabb modellel való felváltását tették szükségessé.

A fejezetben helyet kap a Rutherford-féle atommodell létrejöttéhez vezető Rutherford-féle szórás kísérlet részletes ismertetése, amely az atommag méretére (a magerők megjelenésének hatására) is becslést ad.

A kezdetben oszthatatlannak gondolt atom fogalmától néhány fontos, történelmi jelentőségű kísérleten és modellen keresztül juthatunk el a ma elfogadott atommodellig. A katódsugarak, röntgensugárzás és radioaktivitás felfedezése mind-mind közelebb vitték a kutatókat az atomok felépítésének és tulajdonságainak pontosabb megértéséhez.

### 4.1 A Thomson-féle atommodell

Az első atommodell, ami az elektront már az atom részének tekinti, a katódsugarak felfedezése után felállított *Thomson-féle* atommodell volt. Eszerint az atom pozitív töltése egyenletesen oszlik el egy pár angström sugarú gömbben (ld. az atomok sugarának meghatározásánál), az elektronok pedig a középpontra szimmetrikusan helyezkednek el („mazsolás puding” modell, *4.1 ábra*) és egyensúlyi helyzetük környezetében harmonikus rezgőmozgást végeznek.



*4.1 ábra* A Thomson-féle atommodell

A modell alapján jól lehetett értelmezni a diszperziót és az elektronok elrendeződése a periódusos rendszerrel is összhangban volt, de az atomok vonalas színeképét, ill. a katódsugarak és az  $\alpha$ -részecskék szórására kapott kísérleti eredményeket nem tudta megmagyarázni.

#### 4.2 Katódsugarak szórása, a Lenard-féle atommodell

*Philipp Lenard (Fülöp Lénárd, 1862-1947)* katódsugarak (elektronok) áthaladását vizsgálta gázokon és fémfóliákon. A katódsugárcsőre egy vékony (néhány mikrométeres) fóliaablakot (Lenard-ablak) szerkesztve a katódsugarak az ablakon kijutva levegőben még néhány cm-es hossz megtétele után is detektálhatók voltak. A szórás és az abszorpció mérése alapján arra a következtetésre jutott, hogy az atom nem lehet egy tömör, az elektronok által átjárhatatlan gömb, hiszen a katódsugarak több ezernyi atomi rétegen áthatolnak.

A Lenard-ablakon kijutó elektronok áramát (intenzitását) vizsgálhatjuk a fólia-detektor távolság, a katódsugárcsőben levő gáz nyomása és összetétele, valamint az ablak anyaga és vastagsága függvényében. A tapasztalatok szerint a fóliára beeső  $I_0$  intenzitás az  $x$  vastagságú fóliarétegen áthaladva az

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x} \quad (4-1)$$

törvény szerint csökken, ahol az  $\alpha$  abszorpció vagy szórás keresztmetszet arányos az anyag sűrűségével, ill. a csőben levő gáz nyomásával. A tapasztalat szerint a gyors elektronok (fénysebesség közelében) számára az anyag sokkal jobban „átjárhatóbb”, az ütközési hatáskeresztmetszet ezekre mintegy 6 nagyságrenddel kisebb.

Lenard az elektronáram mérésével meghatározta több anyag abszorpció hatáskeresztmetszetét és arra a következtetésre jutott, hogy a katódsugarak számára áthatolhatatlan térfogat a Thomson-féle atommodellben szereplő tömör gömb térfogatánál 8-9 nagyságrenddel kisebb, tehát az atom főleg üres részekből áll. A Lenard-féle atom kis pozitív és negatív töltéspárokból (ún. dinamidokból) és az ezektől származó térből áll.

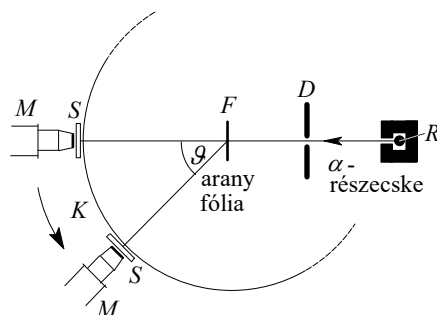
#### 4.3 A Rutherford-féle atommodell

Az atomok felépítésének alaposabb tanulmányozására *Ernest Rutherford (1871-1937)*, *Hans Wilhelm Geiger (1882-1945)* és *Ernest Marsden (1889-1970)*  $\alpha$ -részecskékkel végzett szórás kísérleteket, melyekből alapvető következtetések vonhatók le az atomok szerkezetére vonatkozóan.

Több radioaktív anyag bomlása során is  $\alpha$ -sugárzás keletkezik, melynek részecskéit mágneses és elektromos térben vizsgálva megállapították, hogy ezek kétszeresen pozitív töltésű He-ionok ( ${}^4_2\text{He}^{2+}$ ). A kibocsátott részecskék kezdősebessége anyagfüggő, de egy anyagra nézve állandó, energiájuk  $4-9 \text{ MeV}$ . Pályájuk során ionizálják az útjukba kerülő atomokat, ezáltal veszítenek energiájukból és levegőben néhány  $\text{cm}$  út megtétele után a környezet hőmérsékletének megfelelő termikus sebességre lassulnak.

##### a) $\alpha$ -részecskék szóródása fémfólián

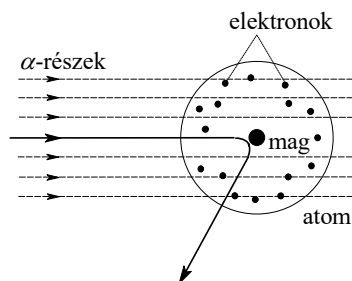
Rutherford és munkatársai fémfólián áthaladó részecskenyaláb szóródását vizsgálta a 4.2 ábrán látható berendezéssel.



4.2 ábra A Rutherford-féle szórási kísérlet

Az  $R$  radioaktív sugárforrásból származó részecskenyaláb a  $D$  diafragma után a néhány mikron vastagságú  $F$  fémfóliába ütközik és a részecskék a fólián való áthaladás után eredeti haladási irányukhoz képest  $\vartheta$  szöggel eltérülnek és egy  $S$  szcintillációs ernyőbe csapódnak. A részecskék becsapódását az ernyőn egy  $F$  középpontú körív mentén mozgatható mikroszkóppal figyelték meg.

A kísérlet eredményei azt mutatták, hogy a legtöbb  $\alpha$ -részecske eltérülés nélkül halad át az aranyfólián, de megfigyeltek  $90^\circ$ -nál nagyobb, sőt, közel  $180^\circ$ -os szórást is. Rutherford az eredményeket úgy értelmezte, hogy az atomban nagy elektromos tér van, mely egy kis térfogatban koncentrált nagy töltéstől származik. Rutherford modelljében az atom középpontjában egy kb.  $10^{-14}$  m sugarú,  $Ze$  pozitív töltésű mag van, a  $Z$  számú elektron pedig a mag körül a termodinamikai sugárnak megfelelő térfogatban helyezkedik el. A nagy szögű eltérések kis valószínűsége abból adódik, hogy a bombázó  $\alpha$ -részecskéknek csak kis hányada közelíti meg a magot (4.3 ábra).

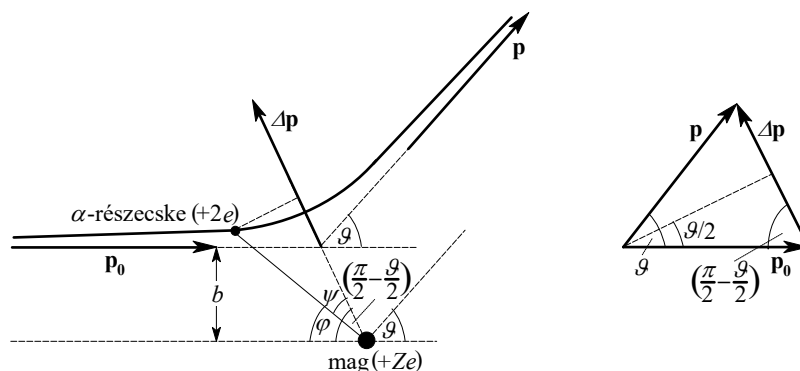


4.3 ábra  $\alpha$ -részecskék szóródása a Rutherford-modellben

A beérkező  $\alpha$ -részecske mozgását az relatíve kis tömegű elektronok elhanyagolható módon befolyásolják. A részecskére csak az atommagtól származó taszító *Coulomb-erő* hat, melynek nagysága:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2}. \quad (4-2)$$

A mechanikából ismeretes, hogy az ilyen centrális erőtér hatására a beérkező részecske pályája egy hiperbola lesz (4.4 ábra). Legyen a részecske eltérülésének szöge  $\vartheta$  (a szórási szög), ez egyben a hiperbola aszimptotái által bezárt szög.



4.4 ábra A Rutherford-szórás

A 4.4 ábrán szereplő  $b$  távolságot ütközési paraméternek nevezzük. Centrális ütközés esetén ez 0, és minél közelebb van a részecske eredeti pályája a maghoz, annál jobban eltérül. A részletes levezetést mellőzve, egy részecske  $\vartheta$  szórási szögére a következő formula érvényes:

$$\operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} = 4\pi\epsilon_0 \frac{m_\alpha v_0^2}{2Ze^2} b, \quad (4-3)$$

ahol  $v_0$  és  $m_\alpha$  a beérkező  $\alpha$ -részecske kezdősebessége ill. tömege. Mivel a  $b$  paraméter a kísérletekben ismeretlen, ezt a formulát nem tudjuk igazolni. Ha viszont azt vizsgáljuk, hogy a mikroszkóp látóterének megfelelő térszögbe időegység alatt mennyi részecske szóródik, akkor az elméleti eredményeket összevethetjük a kísérlettel. Kiszámítható, hogy ha egy  $D$  vastagságú fólián időegység alatt áthaladó  $n$   $\alpha$ -részecskéből  $dn$  szóródik a  $\vartheta$  szög körüli  $d\Omega$  szögtartományba, akkor

$$\frac{dn(\vartheta, d\Omega)}{n} = \frac{Ne^4 Z^2 D}{(4\pi\epsilon_0)^2 m_\alpha^2 v_0^4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} d\Omega, \quad (4-4)$$

ez a *Rutherford-féle szórási képlet*, ahol  $N$  az atomok száma egységnyi térfogatú fóliában. Ez a képlet megadja a szóródó részecskék relatív számát a fólia vastagsága ( $D$ ), a részecske kezdősebessége ( $v_0$ ) és a szórási szög ( $\vartheta$ ) függvényében. Látható, hogy a szórt részecskék száma négyzetesen függ a fóliát alkotó atomok atomsúlyától (a magtöltésszám megegyezik az elem rendszámával).

A fenti képletet megvizsgálva látható, hogy ha mind a fólia, mind a sugárforrás változatlan a kísérlet során, akkor

$$dn \sin^4 \frac{\vartheta}{2} = \text{konst.} \quad (4-5)$$

A szóródó részecskék számát a szórási szög függvényében vizsgálva Geiger és Marsden sikeresen bizonyította ezt az összefüggést. A kísérleti berendezés megfelelő módosításával sikerült igazolniuk a Rutherford-féle szórási formula által leírt függést a fólia vastagsága és az  $\alpha$ -részecskék kezdősebességének függvényében is.

b) *A magtöltés és a magtöltésszám (rendsszám) meghatározása*

A szórás törvény kísérleti igazolásánál a nehézséget az okozza, hogy az adott szögben szóródó részecskék száma kb. 10000-szer kisebb, mint a beeső részecskék száma, mely paramétereket egymástól függetlenül csak különböző feltételek mellett sikerült mérni.

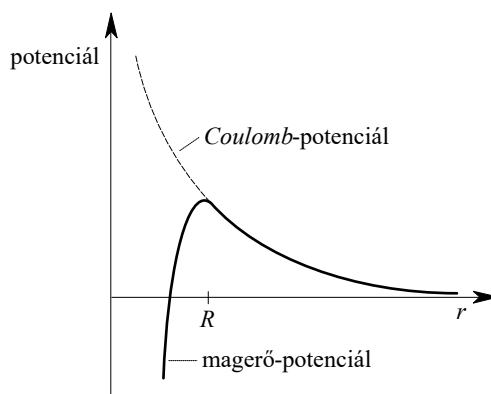
Az első olyan mérést, melyben  $n$  és  $dn$  ugyanazon kísérleti feltételek mellett voltak mérhetőek, *James Chadwick (1891-1974)* állította össze, melyből a  $Z$ -t nagy atomsúlyú elemekre kb. 1 %-os pontossággal határozta meg. Ez alapján igazolást nyert, hogy a  $Z$  *magtöltésszám* egyenlő a periódusos rendszerben az adott elemhez rendelt *rendszámmal*. Egy kémiai elem rendszáma ezzel háromféle tulajdonságot jelöl: a) az elem periódusos rendszerbeli sorszáma, b) a magban levő pozitív elektromos töltések száma ill. c) a semleges atom elektronjainak száma.

c) *Az atommag*

Ha az atomot bombázó részecske kinetikus energiája nagy (kb.  $> 6\text{MeV}$ ) és az eltérülés szöge is nagy (tehát  $b$  kicsi, azaz majdnem centrális ütközés történik), akkor a feltételezett Coulomb-erőn kívül egyéb, ún. *magerők* is fellépnek a kölcsönhatásban. Az atommag sugarának azt a távolságot tekintjük, ahol egy adott  $\vartheta$  szórás szögre a Coulomb-törvénytől való eltérés kezdődik, ami kb.  $1\text{ fm}$  ( $10^{-15}\text{ m}$ ).

A Rutherford-féle szórás formulától eltérő kísérleti eredményeket kapunk abban a esetben is, amikor az ütközési paraméter nagy, ilyenkor a magtól származó Coulomb-erőt az elektronok árnyékolják és az eltérülés szinte mérhetetlenül kicsi, néhány szögmásodperc lesz.

A maghoz közeledő  $\alpha$ -részecskére nagy távolságban az atommag taszító potenciálja hat. Ha a részecske elég közel kerül a maghoz, akkor a taszítóerőn kívül egy vonzó, ún. *magerő* is hat rá. Az atommag sugarának azt az  $R$  távolságot tekintjük, ahol a taszító és vonzó kölcsönhatások kiegyenlítik egymást (4.5 ábra).



4.5 ábra A magsugár a Coulomb- és a magerő-potenciálok egyenlőségéből

Az atommag sugarára egy durva becslést adhatunk a következők alapján. Rutherford mérései szerint a randomból kibocsátott  $\alpha$ -részecskék sebessége  $v_0 = 1.6 \times 10^7\text{ m/s}$ . Rézfóliával ( $Z=29$ ) végzett szórás kísérletek jól visszaadták az elméleti megfontolások alapján kapott értékeket, tehát elfogadhatjuk, hogy ebben az esetben érvényes a Coulomb-törvény. Egyszerűen kiszámolhatjuk, hogy a „végtelenből”  $v_0$  kezdősebességgel közeledő részecske milyen  $r_{min}$  távolságra közelíti meg a magot:

$$r_{\min} = \frac{1}{\pi \epsilon_0} \frac{Ze^2}{m_\alpha v_0^2}, \quad (4-6)$$

amelyből a megfelelő értékek behelyettesítésével  $r_{\min} = 1.6 \times 10^{-14} \text{ m}$  adódik, tehát az atommag sugara ennél biztosan kisebb. Az atommag sugarára egy jó empirikus közelítés az

$$R = (1.3 \pm 0.1) A^{\frac{1}{3}} \times 10^{-15} \text{ m}, \quad (4-7)$$

ahol  $A$  az atom tömegszáma.

A kísérletek eredményei alapján egy elem atomjai a  $Z$  rendszámmal és az  $A$  tömegszámmal jellemezhetők. Sir James Chadwick 1932-es felfedezése után egyértelművé vált, hogy az atommagot a *nukleonok*, azaz protonok ( $Z$  darab) és neutronok ( $A-Z$  darab) alkotják, a mag körül pedig  $Z$  darab elektron helyezkedik el. A proton töltése  $+e$ , tömege  $m_p = 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$ , a neutron semleges töltésű és tömege  $m_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$ , az elektron pedig  $-e$  töltésű, tömege pedig  $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ .

Az atommag tömege mindig kisebb alkotórészeinek össztömegénél, ez a jelenség a *tömegdefektus*. A

$$\Delta m = Zm_p + (A-Z)m_n - m_{\text{mag}} > 0$$

tömegkülönbségből adódó  $\Delta m \cdot c^2$  energia az atommag *kötési energiája*, ami az atommag felépítésekor felszabaduló energia, mely egyenlő azzal a munkával, amit a mag alkotórészeire bontásához kell végeznünk. A nehéz magoknál az egy nukleonra jutó kötésenergia kb.  $7-8 \text{ MeV}$ .

A Rutherford-féle atommodell tehát azt feltételezi, hogy a  $Z$  rendszámú elem atomjának tömege és  $Ze$  pozitív töltése egy kb.  $10^{-15} \text{ m}$  sugarú térfogatban koncentrálódik, és a mag körül kb.  $10^{-10} \text{ m}$ -re kering a  $Z$  darab elektron. Az elektronok a mag centrális terében kör- vagy ellipszispályán mozognak.

A Rutherford-modell nagy előrelépést jelentett az atom szerkezetére vonatkozó ismeretekben, de nagy hibája, hogy elektrodinamikailag nem stabil. Az atommag körül keringő elektron a klasszikus elektrodinamika törvényei szerint energiát sugároz, melynek hatására egyre kisebb sugarú, spirális pályán egy idő után a magba zuhanna. A modell szintén nem tudja megmagyarázni az atomok akkoriban már ismert vonalas színekét, hiszen a folytonosan változó energiájú elektron sugárzási spektruma folytonos kell legyen.

A Rutherford-modell hiányosságait csak az atom kvantummechanikai leírásával küszöbölhetjük ki.

#### 4.4 Ellenőrző kérdések

- Milyen feltevéseken alapult a Thomson-féle atommodell?
- Milyen kísérleti eredmények vezettek a Lenard-féle atommodell létrejöttéhez?
- Írja le a Rutherford-féle szórás kísérlet lényegét!
- Milyen feltételezéseken alapul a Rutherford-féle szórás kísérlet elméleti értelmezése?



- Mik a Rutherford-féle atommodell alapvetései és hiányosságai?
- Milyen képlettel adható meg egy  $A$  tömegszámú elem atomjának sugara? (Általában mit tekintünk egy atommag sugarának?)

#### 4.5 Feladatok

- Milyen minimális távolságra közelíti meg egy  $5 \times 10^7$  m/s sebességű  $\alpha$  részecske, egy réz atom ( $Z = 29$ ) magját (centrális ütközés esetén)?
- Egy ólom atommag (nukleonokból történő) keletkezésekor (kb.) mennyi energia szabadul fel? Mennyi az ennek megfelelő tömegdefektusf?

## 5. A sugárzás kvantumozott természete: a fotonok

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a hőmérsékleti sugárzás – manapság elfogadott – törvényszerűségeinek felismeréséhez vezető út főbb állomásait,
- képes értelmezni ezen törvényszerűségek és az elektromágneses sugárzási tér kvantumozott természete közötti összefüggéseket,
- elfogadja és későbbi munkája során szem előtt tartja az anyag és a sugárzási tér kapcsolatában megjelenő kvantumozott természetet.

Jelen fejezetben ismertetjük a hőmérsékleti sugárzás törvényszerűségeinek – a kísérleti tapasztalatokkal megegyező – leírására, értelmezésére irányuló megközelítések, elméletek történeti fejlődését, melyek a fizikai rendszereket (sugárzási teret) jellemző mennyiségek kvantumozott tulajdonságának felismeréséhez vezettek.

Ezek a felismerések az egész fizikai szemléletünket alapvetően átalakították és a kvantumelmélet megalapozásához vezettek.

Általános tapasztalat, hogy minden nem nulla kelvin hőmérsékletű test hősugárzást bocsát ki magából a környezetébe, a környezet hőmérsékletétől függetlenül. Ha pl. két, különböző hőmérsékletű testet vákuumba helyezünk, azok hőmérséklete a hővezetés és hőáramlás hiánya ellenére idővel kiegyenlítődik, tehát feltételezhető, hogy a testek energiát sugároznak, illetve nyelnek el. *Pierre Prévost* tételének értelmében, ha valamely test ugyanolyan hőmérsékletű, mint a környező testek (hőmérsékleti egyensúly), akkor az időegység alatt annyi hőt sugároz ki, mint amennyit a környező testek sugárzásából elnyel (dinamikai egyensúly).

Az általánosan ismert kvalitatív tapasztalatok azt mutatják, hogy

- a melegebb testek lehűlnek, a hidegebbek felmelegednek,
- a sugárzás erőssége függ a sugárzó test hőmérsékletétől,
- a test hőmérsékletével változik a sugárzás spektrális eloszlása is,
- azonos hőmérsékletű testek közül azok sugároznak jobban, amelyek a rájuk eső sugárzást jobban elnyelik.

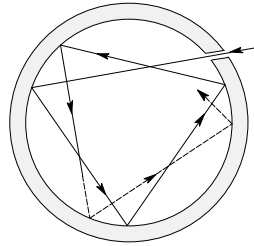
A kvantitatív értelmezés szempontjából hasznos néhány definíció bevezetése. Egy test *abszorpcióképessége* ( $A$ ) megmutatja, hogy a test a rá eső sugárzás mekkora hányadát nyeli el. Ugyanígy definiálhatjuk a *reflexió-* ( $R$ ) és *áteresztőképességet* ( $T$ ) is. A test emisszióképességén ( $E$ ) azt az energiát értjük, melyet a test időegység alatt egységnyi felületéről a felületre merőlegesen egységnyi térszög alatt kisugároz. Az abszorpció- és emisszióképesség a hullámhosszon kívül nagyban függ a test érdességétől, színétől, stb.

### 5.1 Kirchhoff törvénye

A sugárzás elektromágneses komponenseinek megismeréséhez érdemes figyelmünket az ún. *abszolút fekete test* által kibocsátott sugárzás vizsgálatára összpontosítani. Az abszolút fekete test egy olyan ideális test, amely a rá eső tetszőleges hullámhossz-összetételű sugárzást teljes

mértékben elnyeli. Az ilyen test abszorpcióképessége  $A = 1$ , emisszióképességét pedig jelöljük  $E_0$ -al.

Bár a valóságban abszolút fekete test nem létezik, de jó közelítéssel ilyen testnek tekinthetők a csillagok (pl. a Nap), az izzólámpa szála, stb. Jól modellezhető a fekete test egy nagyobb testbe vájt üreggel, amit kisméretű lyuk köt össze a külvilággal. Ha melegítjük a testet, akkor az üregben kialakuló üregsugárzás jól modellezi a fekete testet: az üregben kialakuló többszörös ütközés révén kialakul a termikus egyensúly, kicsi a valószínűsége, hogy a kicsi lyukon észrevehető sugárzás távozik (5.1 ábra).



5.1 ábra Üregezonátor

Bármennyire is különbözik az abszorpció- és emisszióképesség két test esetén, hányadosuk bármelyik testre ugyanaz:

$$\frac{E_1}{A_1} = \frac{E_2}{A_2} = E_0. \quad (5-1)$$

Ez *Kirchhoff törvénye*, melynek érvényességét egy egyszerű példán szemléltethetünk: egy abszolút fekete ( $A_1 = 1$ ) lappal szemben elhelyezünk egy  $A_2 < 1$  abszorpcióképességű másik lapot, és tegyük fel, hogy a két lap sugárzása csak egymást éri, más testeket nem. Ekkor egyensúlyban a második lap által kibocsátott  $E_2$ , és az általa elnyelt  $A_2 E_1$  energiák megegyeznek, amiből a fenti összefüggést kapjuk.

Ez a törvény nem csak az összes sugárzásra, hanem minden egyes komponensére igaz, tehát ha egy test valamilyen hullámhosszú sugárzást kibocsát, azt el is nyeli. Ez alapján értelmezzük a *spektrumvonalak megfordítását* is. Fémes nátriumot gerjesztve (pl. elégetve) annak  $\lambda = 589 \text{ nm}$ -es vonala spektrográffal vizsgálva, vagy ernyőre leképezve jól detektálható. Ha egy szélessávú fényforrással kivilágított spektrográf és a fényforrás közé nátrium (Na) gőzt vezetünk, akkor a lámpa fényének spektrumából pont az előbbi, 589 nm-es vonal hiányozni fog, helyén sötét vonal látható. Ennek magyarázata, hogy a Na-gőzök ezt a hullámhosszat elnyelik.

A fent tárgyalt Kirchhoff-törvényből látható, hogy az abszolút fekete test emisszióképessége minden hőmérsékleten nagyobb, mint egy másik testé, továbbá bármely test emisszióképességét megkaphatjuk a test abszorpcióképességének és a fekete test emisszióképességének szorzataként. Emiatt elegendő az abszolút fekete test sugárzási törvényeinek megállapítására szorítkoznunk.

Megmutatható, hogy az elektromágneses tér

$$u = \frac{1}{2} (\epsilon_0 \bar{E}^2 + \mu_0 \bar{H}^2) \quad (5-2)$$

*energiasűrűsége* és a (polarizált) sugárzás *fajlagos intenzitása* ( $K$ ) közt fennáll a

$$u = \frac{4\pi}{c} K \quad (5-3)$$

összefüggés, ahol  $K$  az egységnyi idő alatt az egységnyi felület normálisának irányába egységnyi térszögben áramló energia.

Mivel a hőmérsékleti sugárzás folytonos spektrumú, ezt az energiasűrűséget felfoghatjuk úgy, mint egy adott  $T$  hőmérsékleten a sugárzás egyes spektrális komponenseinek külön-külön vett energiasűrűségének összege (integrálja), azaz

$$u(T) = \int u(\nu, T) d\nu. \quad (5-4)$$

Ugyanígy bevezetve a sugárzás  $K(\nu, T)$  *spektrális fajlagos intenzitását* kaphatjuk, hogy

$$K(T) = \int K(\nu, T) d\nu \quad (5-5)$$

és polarizálatlan sugárzásra

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c} K(\nu, T), \quad (5-6)$$

polarizált sugárzásra (a kétféle polarizáció miatt) pedig ennek a fele. Ha a frekvencia helyett a hullámhosszal akarjuk kifejezni ezen mennyiségeket, akkor az energiasűrűség és a fajlagos intenzitás definíciói miatt a

$$K(\nu, T) = \frac{\lambda^2}{c} K(\lambda, T); \quad u(\nu, T) = \frac{\lambda^2}{c} u(\lambda, T) \quad (5-7)$$

összefüggéseket kapjuk.

A fentiek alapján tehát a Kirchhoff-törvényt a következő alakba írhatjuk:

$$\frac{E_1(\nu, T)}{A_1(\nu, T)} = \frac{E_2(\nu, T)}{A_2(\nu, T)} = \dots = K(\nu, T) = \frac{c}{8\pi} u(\nu, T). \quad (5-8)$$

## 5.2 A fekete test

A fent már említett *abszolút fekete test* abszorpcióképessége  $1$ , ekkor emisszióképesége megegyezik a vele sugárzási egyensúlyban lévő elektromágneses tér fajlagos intenzitásával:

$$E(\nu, T) = K(\nu, T) = \frac{c}{8\pi} u(\nu, T). \quad (5-9)$$

Ebből következően, ha az abszolút fekete testre jellemző  $u(\nu, T)$  függvényt ismerjük, akkor bármely test hőmérsékleti sugárzási spektrumát meghatározhatjuk, ehhez csak az adott test abszorpcióképességét kell ismernünk.

Ha egy test abszorpcióképessége független a hullámhossztól, akkor azt *szürke sugárzónak* nevezzük. Ekkor a test emisszióképeségének spektrális eloszlása hasonló a fekete testéhez, de az egész függvényt (ld. alább) a test abszorpcióképességével kell szorozni. Ha az abszorpcióképesség jelentősen függ a sugárzás hullámhosszától, akkor a test sugárzását *szelektív sugárzásnak* nevezzük.

## a) A Stefan-Boltzmann-törvény

A kísérletek alapján a fekete test sugárzásának energiasűrűsége a test hőmérsékletének negyedik hatványával arányos:

$$u(T) = \int_0^{\infty} u(\nu, T) d\nu = \sigma T^4, \quad (5-10)$$

ahol  $\sigma$  az ún. Stefan – Boltzmann-állandó, értéke

$$\sigma = 5.7 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}. \quad (5-11)$$

## b) A Wien-féle eltolódási törvény

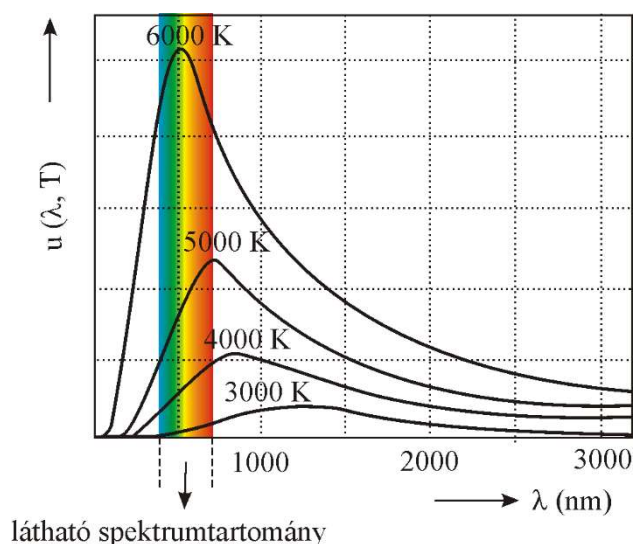
Ábrázolva a fenti teljesítménysűrűséget – különböző hőmérsékleteken – a hullámhossz (frekvencia) függvényében, megkapjuk a fekete test sugárzási spektrumát (5.2 ábra).

Jól látható, hogy az adott hőmérséklethez tartozó görbék maximumai a hőmérséklet növekedésével az alacsonyabb hullámhossz tartományok felé tolódnak el. Wilhelm Wien, (1864-1928) elméletileg kimutatta, hogy a sugárzást leíró függvény

$$u(\lambda, T) = \frac{c^4}{\lambda^5} f\left(\frac{c}{\lambda T}\right) \quad (5-12)$$

alakú, amiből a spektrum maximuma és a hőmérséklet kapcsolatáról számot adó Wien-féle eltolódási törvény származtatható (a konstans értékét kísérletileg határozták meg):

$$\lambda_{\max} T = \text{const} = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}. \quad (5-13)$$



5.2 ábra A fekete test sugárzási spektruma különböző hőmérsékleteken

## c) A Rayleigh-Jeans törvény

Az  $u(\nu, T)$  spektrális energiasűrűséget leíró függvény alakjának meghatározására több próbálkozás is történt. Ezek egyike a Rayleigh-Jeans formula, mely feltételezi, hogy az üregben kialakult sugárzás energiája az egyes sugárzási módusok, mint különböző frekvenciájú

harmonikus oszcillátorok energiájának összege. Az ekvipartíció szerint az elektromágneses tér energiája egy módusra  $kT$ , a módusok száma a  $(\nu, \nu+d\nu)$  frekvenciatartományban:

$$dn_\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu, \quad (5-14)$$

azaz a spektrumban inkább az rövidebb hullámhosszú sugárzás dominál. Ebből a spektrális energiasűrűsége

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 kT \quad (5-15)$$

vagy

$$u(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^4} kT \quad (5-16)$$

adódik. Eszerint minél kisebb a sugárzás hullámhossza, annál nagyobb az energiasűrűség, a hullámhossz csökkenésével ez az érték a végtelenbe tart, amit „*ultraibolya katasztrófa*” nevezünk. Integrálással könnyen látható, hogy egy adott hőmérsékleten a sugárzási teljesítmény végtelen lesz, ami ellentétben áll a tapasztalattal. A Rayleigh-Jeans formula csak a spektrum hosszabb hullámhosszú részén adja vissza a kísérletileg mért eredményeket.

#### d) A Wien-féle közelítés

A Rayleigh-Jeans-féle energia eloszlás helyett Wien feltételezte, hogy a sugárzási energia frekvencia szerinti eloszlása hasonló a Maxwell-féle sebességeloszláshoz (ld. hőtan), amiből

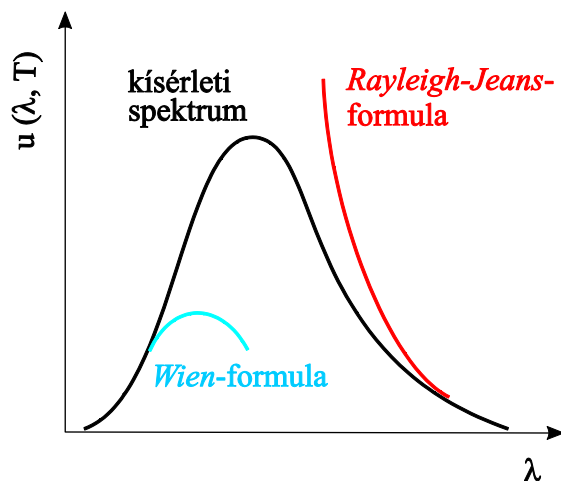
$$u(\nu, T) = a\nu^3 e^{-b\frac{\nu}{T}}, \quad (5-17)$$

kapható, ahol  $a$  és  $b$  állandók. Ezt a hullámhosszra átírva

$$u(\lambda, T) = c\lambda^{-5} e^{-\frac{d}{\lambda T}}, \quad (5-18)$$

ahol  $c$  és  $d$  szintén kísérletileg meghatározandó konstansok.

A Wien-féle közelítés jól visszaadta a sugárzási spektrum rövid hullámhosszú részét. A mért eredmények és az itt tárgyalt két közelítésből adódó spektrumok az 5.3 ábrán láthatóak.



5.3 ábra A sugárzás hullámhosszfüggése a Rayleigh-Jeans- és a Wien-féle közelítésből

### 5.3 A Planck-féle sugárzási törvény

A fentiekben tárgyalt sugárzási törvények csak a rövid- és hosszúhullámok tartományában írják le helyesen a sugárzás energiasűrűségének hullámhosszfüggését. A teljes tartományt helyesen leíró formulára még évekkel kellett várni, amit végül *Planck (1900)* adott meg. Az elméleti levezetés során Planck hipotézise a következő volt:

- A sugárzást abszorbeáló vagy emittáló oszcillátorok csak olyan állapotokban tartózkodhatnak, melyekben energiájuk egy minimális energiakvantum egész számú többszöröse, az  $n$ -edik (gerjesztett) állapotban levő oszcillátor energiája  $\varepsilon_n = n\varepsilon$ .
- Az oszcillátorok a sugárzás elnyelése/kibocsátása során ugrásszerűen mennek át az új állapotba, a két állapot energiájának a különbsége pedig arányos az elnyelt/kisugárzott sugárzás frekvenciájával:

$$\varepsilon = h\nu, \quad (5-19)$$

ahol  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ , a Planck-állandó.

Későbbi eredmények alapján az oszcillátorok energiájára az  $\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$  érték adódott.

E hipotézis és a Boltzmann-eloszlás felhasználásával kaphatjuk, hogy egy  $\nu$  frekvenciájú oszcillátor átlagos energiája

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \quad (5-20)$$

Felhasználva, hogy az egységnyi térfogatban és  $d\nu$  frekvenciaintervallumban található oszcillátorok száma

$$dn_\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu, \quad (5-21)$$

a spektrális energiasűrűséget a következőképp adhatjuk meg:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (5-22)$$

vagy a hullámhossz felhasználásával

$$u(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}. \quad (5-23)$$

Ez a Planck-féle sugárzási törvény. Könnyen belátható, hogy az egy oszcillátorra jutó energia mindaddig kisebb, mint  $kT$ , míg a klasszikus határesetnek megfelelő  $\varepsilon \rightarrow 0$  határesetre nem térünk át.

Megmutatható, hogy a Planck-formula a  $h\nu \ll kT$  határesetben a Rayleigh-Jeans formulába megy át, a  $h\nu \gg kT$  határesetben pedig visszaadja a Wien-féle közelítést.

#### 5.4 Magas hőmérsékletek mérése

A Planck-féle sugárzási törvényt magas hőmérsékletek mérésére használhatjuk, ahol a hagyományos módszerek már nem alkalmazhatók. Kb. 2600 °C felett már a termoelemek sem alkalmasak hőmérséklet mérésére, itt egyedül az *optikai pirometria* segíthet.

Ha a mérendő test fekete testnek tekinthető, akkor a teljes sugárzási spektrum mérésével a valódi hőmérséklete a *Stefan-Boltzmann-törvény*ből kiszámolható. A másik módszer a sugárzás maximális hullámhosszának meghatározása, majd egy ismert feketetest-sugárzó spektrumával való összehasonlítás a *Wien-törvény* alapján. Egy adott hullámhossztartományon való emisszióképesség mérésével és illesztéssel közvetlenül a Planck-formulából is meghatározható a test hőmérséklete.

Ha a test nem tekinthető abszolút fekete testnek, akkor is léteznek módszerek a hőmérsékletének meghatározására.

##### a) Sugárzási hőmérséklet

A mérendő test emisszióját (sugárzását) egy adott hullámhossztartományon (pl. szűrővel kiválasztva) összehasonlítjuk egy ismert hőmérsékletű fekete sugárzóéval. Ha a sugárzás erőssége azonos, akkor a fekete test hőmérsékletét definiáljuk az adott test *fekete vagy sugárzási hőmérsékleteként*. A mérésnél a reprodukálhatóság kedvéért fel kell tüntetni azt a spektrális tartományt, ahol a mérés történt. Mivel a mérendő test a feltételezések szerint nem abszolút fekete, a hőmérséklete ennél a hőmérsékletnél nagyobb, mert az egynél kisebb abszorpcióképessége miatt nem adhatná ugyanazt a spektrális eloszlást.

Az optikai pirométereknél (ld. még hőtan) a mérendő felületet szűrőkön keresztül egy távcső okulárjának gyújtósíkjába képezik le. Itt egy izzószál is van, melyet a rajta átfolyó áram erősségének változtatásával addig izzítunk, míg az „beleolvad” a felület képébe, azaz az általa kibocsátott sugárzás szűrőkön átengedett spektrális tartománya megegyezik a mérendő testével. Ekkor a mérendő test hőmérséklete megegyezik az izzószáléval, amit előzőleg egy ismert fekete sugárzóval kalibrálva az áramerősség alapján megmondhatunk.

##### b) Színhőmérséklet

A szemünk által érzékelt színeket csak a relatív spektrális eloszlás szabja meg, tehát két különböző (állandó) abszorpcióképességű szürke sugárzó test ugyanolyan színűnek látszik, hiszen a fekete test emisszióképességétől az egész tartományon csak egy konstans szorzóval különböznek, ami a relatív spektrális eloszlást nem befolyásolja. Ebből adódik a definíció: a mérendő test *színhőmérséklete* megegyezik annak az abszolút fekete testnek a hőmérsékletével, amely ugyanolyan színűnek látszik, mint a kérdéses test. A fentiek szerint a szürke sugárzók színhőmérséklete megegyezik valódi hőmérsékletükkel, a két hőmérséklet között csak a szelektíven sugárzó testek esetén van eltérés.

##### c) A Nap és a Föld hőmérséklete

Stefan egy izzó fémkorong által kibocsátott sugárzását hasonlította össze a detektor számára ugyanakkora szög alatt látszó Nap sugárzásával. Feltételezve, hogy a Föld atmoszférája a rá eső sugárzás 1/3-át elnyeli, a Nap felszíni hőmérsékletére 5400-5700 K hőmérsékletet kapott (a mai elfogadott érték 5778 K).

Ha a Földnek nem lenne atmoszférája, akkor a fekete test sugárzás törvényei alapján (a Napot és a Földet is fekete sugárzónak tekintve) termodinamikai egyensúlyban a felszíni hőmérséklete



6 °C lenne. Ismert, hogy a Nap sugárzásának kb. 30 %-a elnyelődés nélkül visszaszóródik az űrbe (a Föld *albedoja* 0.3), ennek és az *üvegházhatásnak* betudhatóan a Föld átlagos (effektív) hőmérséklete kb. 15 °C. A fenti közelítések feltételezik, hogy a Föld felszíne mindenhol egyenlő hőmérsékletű.

Érdekes még megemlíteni, hogy ha a Föld felszínén elhelyezünk egy fekete testet, az a merőlegesen beeső kb.  $1120 \text{ W/m}^2$  (intenzitású) besugárzás hatására kb. 100 °C-os lenne a sugárzással való termikus egyensúlyban.

### 5.5 Ellenőrző kérdések

- Definiálja az abszorpció- és emisszióképességet!
- Mondja ki Kirchoff törvényét!
- Miért nevezzük a fekete test sugárzását üregsugárzásnak?
- Milyen feltételezések vezettek a Planck-féle sugárzási törvény létrejöttéhez?
- Milyen kapcsolatban van a Planck-féle törvény a Stefan-Boltzmann, a Wien-féle eltolódási törvényekkel, továbbá a Rayleigh-Jeans és Wien-féle közelítésekkel?
- Mi a sugárzási és a színhőmérséklet?

### 5.6 Feladatok

- Milyen sugárzási maximummal jellemezhető a kozmikus háttérsugárzás, illetve ez milyen hőmérsékletű fekete testtel azonosítható?
- Egy csillag sugárzása felhasználható-e a „feketesség”-től való eltérés, a felszíni hőmérséklet, illetve a jelenlévő elemek meghatározására/azonosítására?
- A nap hőmérsékletének kicsiny (pl. 1%-os) változása milyen változást okoz a teljes sugárzás tekintetében, a sugárzási maximum helyében, illetve a sugárzás spektrális intenzitásában 400 nm-en, 550 nm-en és 700 nm-en?

## 6. Fényelektromos jelenségek

A fejezet elsajátítása után az olvasó

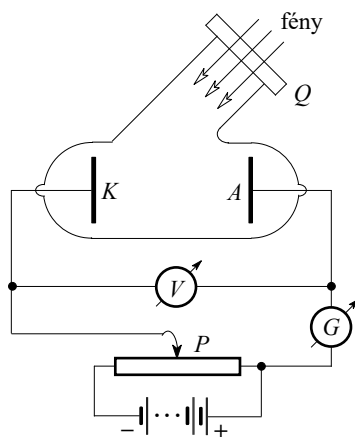
- ismeri a fotonhipotézis kialakulásához vezető kísérleti megfigyeléseket, eredményeket,
- ismeri a röntgenső segítségével keltett röntgensugárzás spektrális tulajdonságait,
- képes értelmezni és magyarázni a fotoeffektust leíró Einstein-féle egyenletet,
- képes értelmezni a fékezési sugárzás spektrumának tulajdonságait a fotonelmélet alapján,
- elfogadja és vizsgálatait során szem előtt tartja a fékezési sugárzás keletkezésére vonatkozó – a fotonelméleten alapuló – képet,
- elfogadja és vizsgálatait során szem előtt tartja a fénynek – a fényelektromos jelenségekre vonatkozó – korpuszkuláris jellegét.

Jelen fejezetben ismertetjük a fényelektromos jelenségekre vonatkozó kísérleti megfigyeléseket, mérési eljárásokat, a fotonhipotézis kialakulásához vezető eredményeket, az emissziós röntgenspektrumok főbb tulajdonságait, a fékezési sugárzásnak – a fotonelméleten alapuló – magyarázatát.

A fejezetben helyet kapnak a fotoeffektus igazolásának/mérésének kísérleti részletei, továbbá a fotoeffektus gyakorlati alkalmazásai.

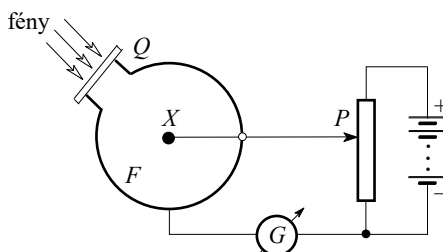
Az 1800-as évek végén *Alexandr Stoletov (1839-1896)* és *Wilhelm Hallwachs (1859-1922)* azt tapasztalták, hogy fémelektródok közt keltett szikrakisülés UV megvilágítás mellett intenzívebb, illetve a negatív töltésű fémlapok szintén UV fény hatására elvesztik töltésüket. Ez utóbbi jelenség pozitívan töltött fémlapok esetén nem jelentkezett, amiből azt a következtetést vonták le, hogy megvilágítás hatására a felületből negatív töltések lépnek ki. A jelenség egyes fémeknél már látható fény alkalmazása esetén is fellépet bizonyos határhullámhosszak alatt. Ezek a kísérletek voltak a *külső fotoeffektus* vagy *külső fényelektromos hatás* első megfigyelései.

1899-ben Lenard már tudatosan, sokkal precízebben végezte a jelenség megismerésére irányuló kísérleteit (6.1 ábra); méréseit vákuumban végezte és az emittált részecskék fajlagos töltésének meghatározásával bizonyította, hogy a fémből elektronok távoznak.



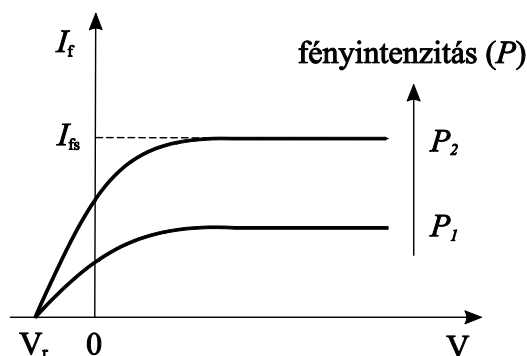
6.1 ábra A fotoáram mérése

A fenti ábrán a fény egy jó átteresztőképességű (pl. kvarc)  $Q$  ablakon keresztül érkezik a vizsgálandó anyagból készült  $K$  katódra. Ha az elektródok közé feszültséget kapcsolunk, akkor a  $G$  árammérő áramot jelez (*fotoáram*). Abból, hogy feszültség nélkül is mérhető gyenge fotoáram, arra következtethetünk, hogy az elektronok zérustól különböző sebességgel hagyják el a katódot. A kilépő elektronok sebessége a Lenard-féle ellentér-módszerrel vizsgálható (6.2 ábra).



6.2 ábra A Lenard-féle ellentér-módszer sematikus rajza

A vizsgálandó anyagot vákuumban egy vezető gömb középpontjába helyezzük és a feszültségforrás pozitív sarkával kötjük össze. A feszültség növelésével az árammérő egyre kisebb áramot jelez, mert az  $X$ -ből kilépő elektronokat az ellentér taszítja  $F$ -től. Bizonyos feszültség hatására még a leggyorsabb kilépő elektronok sem érik el az anódot, az áram megszűnik. A kísérletek eredményeként kapott feszültség-áram karakterisztikákat az 6.3 ábrán láthatjuk két különböző fényintenzitás esetén.



6.3 ábra A fotocella  $I$ - $V$  karakterisztikái kétféle fényintenzitás esetén

Az ábráról látszik, hogy elegendően nagy *gyorsító* tér esetén a fotoáram telítésbe megy, ezt a telítési áramot a katódból egységnyi idő alatt kilépő elektronok száma határozza meg. Tér nélkül ( $V=0$ ) az áramot azon egységnyi idő alatt kilépő elektronok száma határozza meg, melyek kezdősebessége elég nagy ahhoz, hogy elérjék az anódot. A  $V=V_r$  *ellentér* hatására még a leggyorsabb elektronok sem érik el a katódot. Az ellentérrel szemben haladó elektronok mozgási energiája folyamatosan nullára csökken, amiből  $V_r$  mérésével a maximális sebesség meghatározható:

$$\frac{1}{2} m_e v_{\max}^2 = eV_r. \quad (6-1)$$

A klasszikus fizikai alapokon nyugvó megfontolásokkal ellentétben, adott anyagú katód esetén a kilépő elektronok maximális  $v_{\max}$  sebessége független a fény intenzitásától és csak a megvilágító fény hullámhosszától függ. Csökkenő hullámhosszú fény esetén az elektronok

sebessége növekszik. A fényintenzitás növelésével a kiváltott elektronok száma nő, azaz az  $I_{fs}$  telítési áram is növekszik. Ha egy adott fotokatódot különböző hullámhosszú fényel világítunk meg, akkor a fotoáram csak egy, az adott anyagra jellemző  $\lambda_h$  határhullámhossz alatt jelenik meg. A vizsgálatok megállapították, hogy kis fényintenzitás esetén a jelenség pillanatszerű, azaz az elektronok az akkor elérhető időfelbontás időtartamán belül kilépnek a katódból.

### 6.1 A fotonhipotézis, a fényelektromos jelenség

A klasszikus hullámelmélet szerint az elektron a sugárzás energiájából mozgási energiára tesz szert, amivel legyőzheti az atommag vonzóerejét és elhagyhatja az atomot. Ekkor a kilépő elektron sebességének is az elnyelt sugárzás energiájával nőnie kellene, ami a kísérletek szerint nem így van. Egy minden irányban sugárzó gyenge fényforrás esetén a klasszikus elmélet szerint napokig tartana, hogy az elektron helyén annyi energia összegyűljön, hogy az elektron elhagyhassa a mag vonzását, de a kísérletek során észlelt spontaneitás miatt ez az elmélet sem állja meg a helyét.

A fényelektromos jelenségek alapján úgy tűnt, hogy a fényenergia a terjedés során nem oszlik el, hanem kis helyeken egyesül, mintha a fény is részecskékből állna. A fényel, mint elektromágneses hullámmal végzett addigi sikeres kísérletek (interferencia, elhajlás) után 1905-ben *Albert Einstein (1879-1955)* javasolta először a korpuszkuláris felfogást. *Planck* hipotézise szerint egy atomi oszcillátor energiája csak  $h\nu$  nagyságú kvantumok egész számú többszörösével változhat. Einstein azt feltételezte, hogy a fény diszkrét,  $h\nu$  nagyságú energiakvantumokból, ún. *fotonokból* áll, melyek fénysebességgel terjednek.

A fotonhipotézis alapján a fényelektromos jelenséget a következőképp magyarázhatjuk meg: a fotokatód anyagában az elektronok kinetikus energiája  $K_0$ , ami egy foton elnyelésével

$$K' = K_0 + h\nu \quad (6-2)$$

energiára növekszik. Az elektron a felület felé mozogva a többi elektronnal való ütközések miatt  $\Delta K$  energiát veszít, ezért a felületre érkeve kinetikus energiája:

$$K'' = K_0 + h\nu - \Delta K . \quad (6-3)$$

Ha ez elektron elhagyja a fémet, akkor kinetikus energiája

$$\frac{1}{2} m_e v^2 = K'' - e\varphi , \quad (6-4)$$

ahol  $e\varphi$  az ún. *kilépési munka*, ami a fotokatód anyagára jellemző érték. Az ekvipartíció tétele szerint a szabad elektron energiája a fotokatódban  $K_0 \approx 3/2kT$ , ami szobahőmérsékleten néhányszor 10 meV, ez a tag elhanyagolható, tehát

$$\frac{1}{2} m_e v^2 = h\nu - \Delta K - e\varphi . \quad (6-5)$$

A kilépő elektron sebessége akkor lesz maximális, ha a folyamat során nem veszít energiát, azaz  $\Delta K=0$ , ekkor

$$\frac{1}{2} m_e v_{\max}^2 = h\nu - e\varphi = h\nu - A . \quad (6-6)$$

Az utóbbi, ún. Einstein-féle fényelektromos egyenlet alapján a fotoeffektusra vonatkozó ismereteinket az alábbiak szerint foglalhatjuk össze.

A katód felületére eső fényintenzitás  $N_f h\nu$ , ahol  $N_f$  a katód felületegységére időegység alatt beeső fotonok száma, tehát minél nagyobb  $N_f$ , annál több elektron lép ki a felületből. Ez összhangban van azzal, hogy a fényintenzitás növelése a fotoáramot növeli. A kiváltott *fotoelektron* energiája lineáris függvénye a fotonenergiának, azaz a kilépő elektronok maximális sebessége lineárisan függ a fény frekvenciájától.

A katódra érkező foton csak akkor válthat ki elektront a felületből, ha energiája nagyobb az anyagra jellemző kilépési munkánál:

$$h\nu > A = h\nu_h, \quad (6-7)$$

ahol  $\nu_h$  a *határfrekvencia*, ami alatt a fényelektromos hatás nem jön létre. A fény határfrekvenciájának megfelelő hullámhossz a fényelektromos effektus *vörös határának* nevezzük. A határfrekvencia mérésével meghatározhatjuk a fémre jellemző kilépési munkát is.

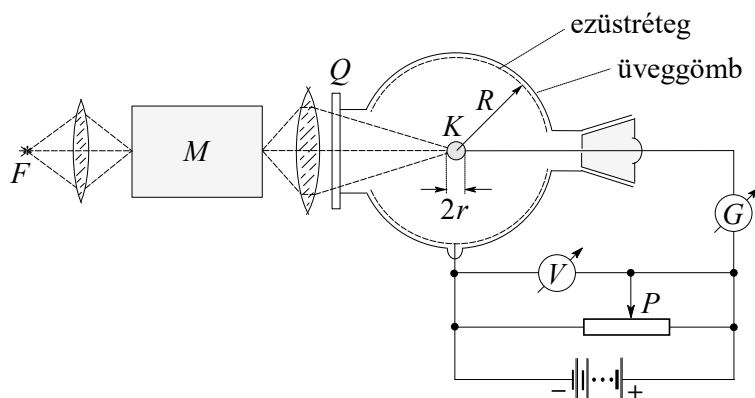
A határfrekvencia felhasználásával a fényelektromos egyenlet:

$$\frac{1}{2}mv^2 = h(\nu - \nu_0) - \Delta K \quad (6-8)$$

alakba írható, amiből látszik, hogy  $\nu \approx \nu_0$  esetén csak azok az elektronok tudnak kilépni, amelyekre az ütközési veszteség kicsi, tehát a felület közelében találhatók. A frekvencia növelésével már a katód mélyebb rétegeiből érkező elektronok is elegendő energiával rendelkeznek (a veszteségek levonása után) a kilépéshez, így a frekvencia növelésével nő a kilépő elektronok száma, tehát a fotoáram is.

## 6.2 A fotoeffektus kísérleti igazolása

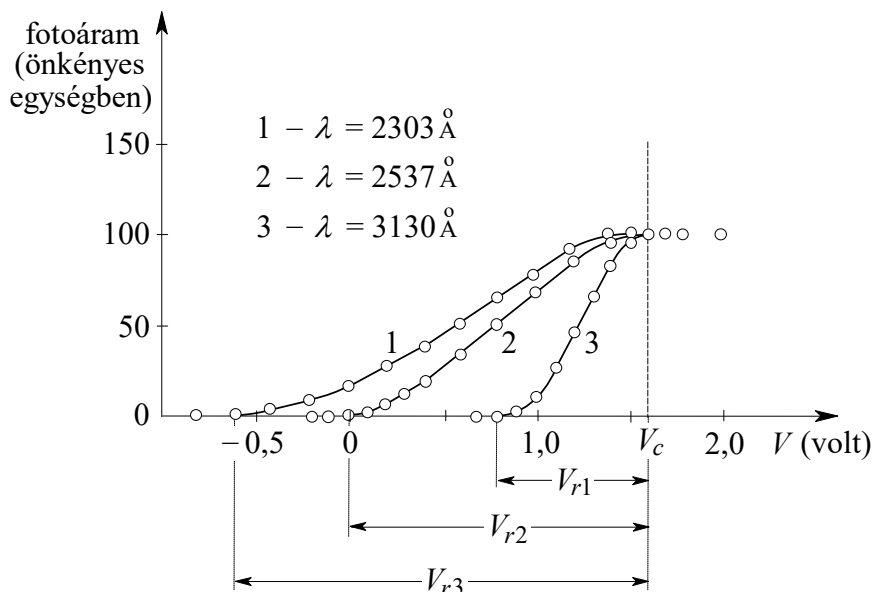
A fényelektromos hatás kísérleti igazolása nehézségekbe ütközik, mert a fotoáramot kiváltó elektronok sebessége nem egyforma, hanem folytonos eloszlású, ezért a fotoáram megszűnéséhez tartozó ellentér értéke egyszerű módszerekkel nem határozható meg pontosan. 1916-ban *Millikan* volt az, aki a Lenard által javasolt ellentér-módszer segítségével kísérletileg igazolta Einstein fotoeffektusra vonatkozó elméletét és egyúttal a Planck-állandót is pontosan meghatározta.



6.4 ábra A fényelektromos jelenség vizsgálata ellentér-módszerrel

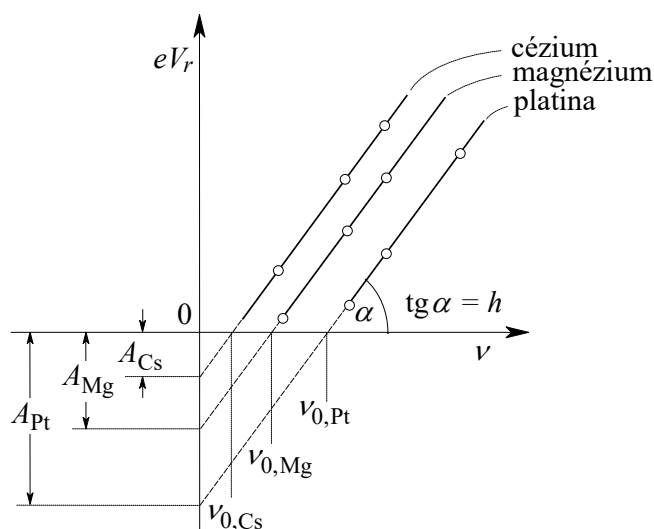
A legpontosabb méréseket az 6.4 ábrán látható gömbkondenzátoros elrendezéssel végezték. Az  $F$  higanygőzlámpa fénye az  $M$  monokromátor után jut a gömbkondenzátorba. Ez egy légritkított üveggömb, melynek belső falán ezüstréteg van, ez a külső fegyverzet, míg a belső fegyverzet a vizsgált anyagból készült  $K$  golyó.

A módszer nagy előnye, hogy elegendően kicsi  $r/R$  esetén a fotokatódból kilépő minden azonos sebességű elektronra teljesül, hogy ugyanannál a fékező potenciálnál éppen nem éri el a külső fegyverzetet. Az 6.5 ábra a gömbkondenzátor három olyan áram-feszültség karakterisztikáját mutatja, amikor a  $K$  cinkgömböt különböző hullámhosszú fényel világították meg.



6.5 ábra  $I$ - $V$  karakterisztikák különböző hullámhosszú megvilágítás esetén

Látható, hogy mindhárom görbe a  $V_c$  feszültségnél kezd el esni, ez a kondenzátor fegyverzeteire vonatkozó *kontaktpotenciál*. A különböző  $V_r$  értékekből meghatározható az elektronok maximális sebessége, azaz a maximális kinetikus energia, amit a frekvencia függvényében, immár három különböző fotokatódra az 6.6 ábrán láthatunk.



6.6 ábra A kilépő elektronok maximális energiája a frekvencia függvényében

A maximális kinetikus energiát a beérkező fény frekvenciájának függvényében ábrázolva látható, hogy az elektronok csak egy, az adott fémre jellemző  $\nu_0$  frekvencia felett hagyják el a fémot, ez a határfrekvencia. Az  $E(\nu)$  függvény az elmélet alapján várt lineáris függést mutatja, az egyenesek meredeksége megadja a Planck-állandó értékét, az ordinátával való metszéspontjuk abszolútértéke pedig az adott fémre jellemző kilépési munkát.

### 6.3 Egyéb fényelektromos jelenségek

#### a) Normális és szelektív fotoeffektus

A fotoeffektus *kvantumhatásfoka* az egy fotonra jutó fotoelektronok száma, amely függ a fény hullámhosszától és az anyag tulajdonságaitól is. A kvantumhatásfok frekvenciafüggését hívjuk a fotoeffektus *spektrális karakterisztikájának*. Fémek esetén a kvantumhatásfok  $(\nu - \nu_0)^2$ -tel arányosan nő, maximumát ( $\approx 0.1 - 0.15$ ) kb.  $18 \text{ eV}$ -nál éri el. Ha az egyenlő elnyelt fényenergia-mennyiségek esetén a felületet elhagyó elektronok száma a frekvenciával nő, *normális fotoeffektusról* beszélünk.

Alkálifémeknél a kvantumhatásfok a frekvenciatartomány egy bizonyos részén megnő, illetve egy adott frekvenciánál maximumot mutat, ezt szelektív fotoeffektusnak hívjuk. Ekkor a hatásfok nagyban függ a beesési szögtől és a beeső fény polarizációjától. Például egy sík fémfelületre való ferde beeséskor s-polarizáció esetén (azaz, amikor a beeső fény polarizációja a beesési síkra merőleges) nincs szelektív fotoeffektus.

#### b) Többfotonos fotoeffektus

Lehetséges olyan eset, hogy egy elektron több fotonból kap energiát. A nemlineáris jelenségek általában csak nagy intenzitások esetén észlelhetők, ezért a többfotonos fényelektromos jelenséget csak a lézerek elterjedése után kezdték vizsgálni. Ebben az esetben egy elektron nem csak egy, hanem  $N=2,3, \dots$  fotonból szerez energiát. A többfotonos fotoeffektusra az Einstein-féle fényelektromos egyenlet a következő alakban érvényes:

$$N h \nu = \frac{1}{2} m_e v_{\max}^2 + A, \quad (6-9)$$

tehát a határfrekvencia  $N$ -ed részére csökken, a fotoáram pedig a fényteljesítmény  $N$ -edik hatványával lesz arányos. Megjegyeznénk, hogy a nemlineáris fotoeffektust a lézerek megjelenése tette lehetővé, amelyek Einstein korában még nem álltak rendelkezésre.

#### c) Belső fotoeffektus

Szilárdtestekben és folyadékokban fellép az ún. *belső fotoeffektus* is, amikor az elektronok nem hagyják el az anyagot, de energiájuk megváltozik. Ha félvezetőkben és szigetelőkben az elnyelt foton energiája nagyobb a tiltott sáv szélességénél, akkor a vegyértéksávból egy elektron juthat a vezetési sávba, következésképpen nő az anyag vezetőképessége. Ezt a jelenséget, amikor fény hatására egy anyag vezetőképessége megváltozik, *fotovezetésnek* hívjuk. Ezen a jelenségen alapulnak a *fotoellenállások*, amelyek anyaguk szerint különböző hullámhossztartományban érzékenyek (látható tartomány: CdS, IR: PbS, PbSe, PbTe, InSb, ...).

#### d) Záróréteges fotoeffektus

Félvezetők  $p$ - $n$  átmeneténél vagy vezetők félvezetőkkel érintkező határán a fény által keltett kisebbségi töltéshordozók akadály nélkül áthaladhatnak, így a  $p$ - $n$  átmeneten ún.

*fotoelektromotoros* erő jelenik meg, ami arányos a fény intenzitásával, ezért ezt a jelenséget fotométerek kialakítására használhatjuk fel. A fotonok energiáját közvetlenül elektromos energiává alakító eszközöket *fényelemeknek* nevezzük.

#### 6.4 Alkalmazások

A fényelektromos jelenség számos gyakorlati alkalmazásban szerepet játszik, melyek segítségével a fényenergiát elektromos energiává konvertálva végezhetjük a méréseket, vagy vezérelhetünk különböző eszközöket.

##### a) *Fényelektromos fotometria*

A fotoáram a beérkező fény intenzitásával arányos, ezért a fotocellák fénymérésre használhatók, pl. a detektálandó sugárzás hullámhossztartományára érzékeny anyagból készítve abszorpciós vagy emissziós spektrofotométerek detektorait képezhetik. Egy ismert spektrális eloszlású fényforrásból érkező fényt monokromátorral kis hullámhossztartományokra bontva pl. oldatok vagy vékony filmek abszorpciós/transzmissziós spektrumát vizsgálhatjuk. A filmnél érzékenyebb elektronikus detektorok, mint a CCD kamera lehetővé teszik, hogy ne használjunk monokromátort, hanem a kísérleteket szélesebb spektrális tartományban, diffrakciós rácsok alkalmazásával végezzük el. A szélesebb hullámhossztartomány lefedésére több spektrállámpát tartalmazó spektrofotométerek állnak rendelkezésre.

A *fotoelektron-sokszorozókban* (PMT, *PhotoMultiplier Tube*) a fotokatódból fény hatására kiváló elektronok több fokozaton, ún. dinódákon keresztül a szekunder elektronok miatt már kis fényintenzitás hatására is könnyen mérhető áramot produkálnak.

##### b) *Fotoelektromos kapcsolók*

A fotocellák alapkapsolásában az árammérő helyére egy elektromágneses kapcsolót (relét) helyezve egy másik áramkört nyithatunk vagy zárhatunk, amivel pl. kapcsoló, tűzjelző, biztonsági, stb. berendezések alakíthatók ki.

Manapság igen elterjedt az *optocsatolók* használata. Gyakran van szükség olyan eszközre, ahol egy kis áramú áramkör által detektált jel (pl. távirányítóból érkező infravörös impulzus) hatására egy nagyáramú berendezést (pl. garázkaput mozgató motort) kell vezérelni. Az optocsatoló egy integrált áramkör, melynek egyik (gyengeáramú) része pl. egy integrált LED, amelynek jelét egy, az erősáramú körrel kapcsolatban levő fotodióda vagy fototranzisztor detektálja és kapcsolja a megfelelő berendezést. Az integrált áramkörön belül a két áramkör galvanikusan szeparált, csak a fényjel útján kommunikálnak egymással.

#### 6.5 A fékezési sugárzás

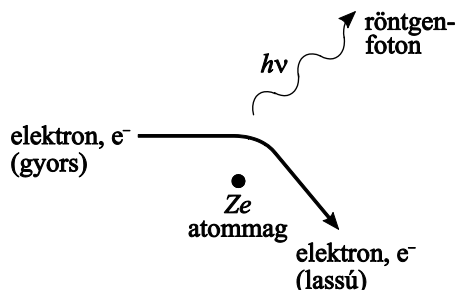
A röntgensugárzás előállításáról már beszéltünk az anyagszerkezet röntgendiffrakciós vizsgálatánál. Megállapítottuk, hogy az anódba csapódó gyors elektronok hatására abból egy (kvázi) folytonos spektrumú és éles spektrális csúcsokat tartalmazó sugárzás lép ki. A folytonos, ún. fékezési sugárzásra jellemző egy minimális határhullámhossz, amely csak a gyorsítófeszültségtől függ, az anód (antikatód) anyagától nem.

A fékezési sugárzás keletkezése a klasszikus elmélet szerint úgy történik, hogy az anyagba csapódó elektronok lefékeződnek, ekkor elektromágneses sugárzást bocsátanak ki, amelynek energiája arányos sebességük négyzetével. A lefékeződő elektronnak a teljes



hullámhossztartományban, azaz minden hullámhosszon sugározni kellene, a tapasztalatok viszont azt mutatják, hogy a fékezési sugárzásnak van egy nagyenergiás (alacsony hullámhosszú) letörése.

A fotonelmélet alapján az antikatódba csapódó gyors elektronok az atomok terében lefékeződnek, energiájuk egy részét egy röntgenfoton formájában kibocsátják (6.7 ábra).



6.7 ábra A fékezési sugárzás keletkezése

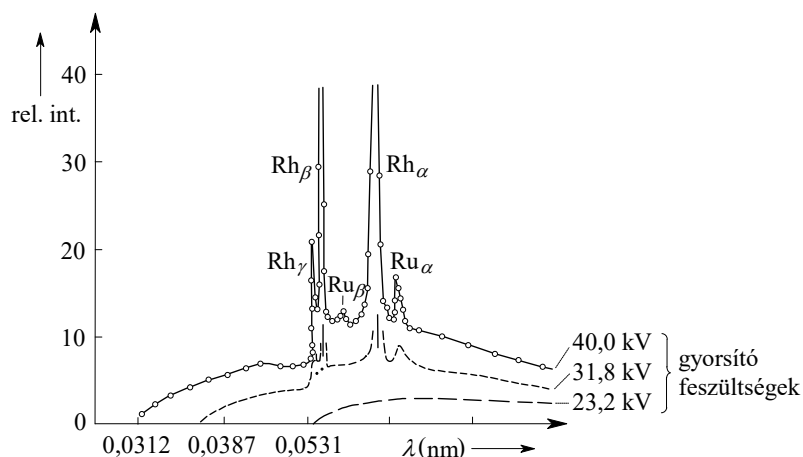
A szabad elektron energiája nem kvantált, ezért az emittált fotonoké sem, így a fékezési sugárzás folytonos. A határfrekvenciát abból a megfontolásból kapjuk, hogy ha az elektron teljes energiája átalakul a fékezés során, akkor a kisugárzott röntgenfoton energiája az  $U$  feszültséggel gyorsított elektron kezdeti mozgási energiájával lesz egyenlő:

$$h\nu_{\max} = eU \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{c}{\nu_{\max}} = \frac{hc}{eU} \approx \frac{12400}{U}, \quad (6-10)$$

ahol  $U$  voltban mérendő, az eredményt pedig angströmben kapjuk. A letörési hullámhossz mérése különböző anyagokból készült anódok vizsgálata esetén lehetőséget ad a Planck-állandó meghatározására.

## 6.6 A karakterisztikus röntgensugárzás

Ha az elektronok energiája elég nagy, akkor megfigyelhető, hogy az emittált sugárzás spektrumában a folytonos fékezési sugárzáson kívül diszkrét, éles csúcsok is jelentkeznek. A csúcsok helyzete (az emittált röntgenfoton hullámhossza) csak az anód anyagára jellemző és nem függ a gyorsítófeszültségtől, valamint független az attól is, hogy az adott anyag milyen vegyületben szerepel. Az 6.8 ábrán ismételtén megmutatjuk egy ruténiummal szennyezett ródium anód röntgenspektrumát.



**6.8 ábra** *A karakterisztikus röntgensugárzás spektruma*

Látható, hogy a gyorsítófeszültség növelésével a folytonos spektrumra egyre intenzívebb csúcsok rakódnak, melyek az antikatód anyagának karakterisztikus sugárzásából adódnak.

A karakterisztikus röntgensugárzás tulajdonságaival a jegyzet későbbi részében – az elektronburok héjszerkezetének a bevezetése után – ismerkedünk meg.

**6.7 Ellenőrző kérdések**

- Ismertesse a fényelektromos jelenségekre vonatkozó alapkísérleteket, és a Lenard-féle ellentér módszer lényegét!
- Ismertesse a fotonhipotézishez vezető kísérleti tapasztalatokat, illetve az Einstein-féle fényelektromos egyenletet!
- Mi a kilépési munka, illetve a határfrekvencia?
- Vázolja a fotoeffektus kísérleti demonstrálására szolgáló berendezést!
- Hogyan függ a fotoeffektus kvantumhatásfoka a fény frekvenciájától?
- Mi a többfotonos, az ún. belső, illetve a záróréteges fotoeffektus?
- Mondjon példát a fényelektromos jelenségek gyakorlati alkalmazására!
- Jellemezze a „klasszikus” röntgensővel keltett sugárzás spektrumát! Mi a különbség a klasszikus, illetve a fotonelméleten alapuló magyarázat között?

**6.8 Feladatok**

- Milyen hullámhosszúságú fény szükséges fotoeffektus létrehozásához egy – 4,8 eV kilépési munkával rendelkező – fotokatód esetén?
- Normális fotoeffektus feltételezésével milyen hullámhossztartományon várható a maximális kvantumhatásfok?
- Adott frekvenciájú fény, illetve fotokatód esetén a fényáram 3,2 V esetén csökken nullára. Mi a katódból kilépő fotoelektronok maximális sebessége?
- Mekkora gyorsító feszültség esetén éri el a fékezési sugárzás minimális hullámhossza a  $\lambda_{\min} = 0,1 \text{ nm}$ -t?
- Ez esetben mekkora az anódba csapódó elektronok sebessége?
- Mekkora  $\lambda_{\min}$  hullámhossz tartozik az 1%-os relativisztikus tömegnövekedést „elszenvedő” elektronokhoz?

## 7. A fény kettős természete

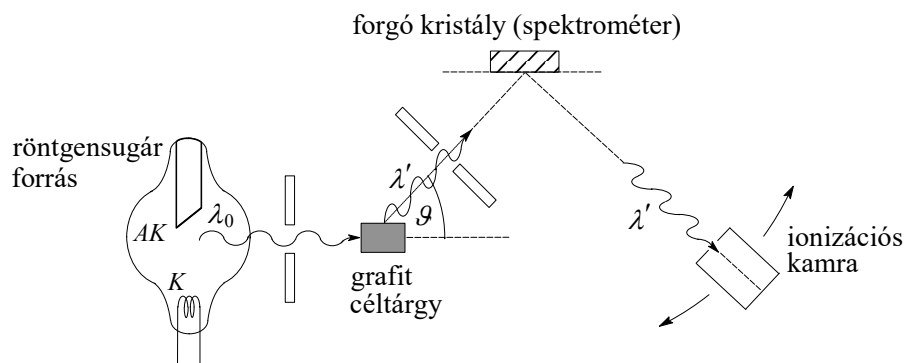
A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a fény kettős természetét igazoló kísérleti megfigyeléseket,
- képes értelmezni és magyarázni ezen megfigyeléseket a hullám-, illetve a fotonelmélet segítségével,
- elfogadja és vizsgálata során szem előtt tartja a kettős természetből eredő, a fény különböző kölcsönhatásaira vonatkozó értelmezéseket, különös tekintettel a hullám- és fotonelmélet együttes alkalmazásának ellentmondásaira.

Jelen fejezetben ismertetjük a fény kettős természetét igazoló kísérleti eredményeket; bemutatjuk mindkét elmélettel (mind a hullám- mind a fotonelmélettel), továbbá csak az egyikkel értelmezhető megfigyeléseket, külön fejezetet szentelve a két elmélet együttes alkalmazásának nehézségeire.

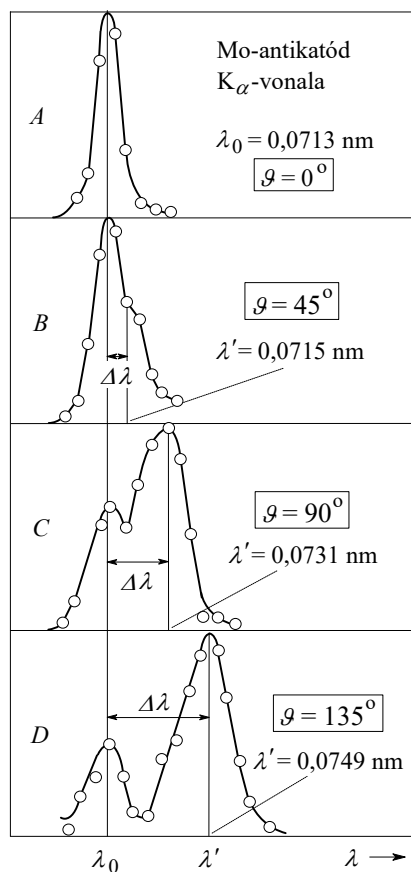
### 7.1 A Compton-effektus

A fényelektromos jelenségek és a röntgenspektrumok magyarázatán kívül a fény részecsketermészetét támasztja alá az alábbiakban tárgyalt *Compton-effektus* is (*Arthur Compton, 1892-1962, fizikai Nobel-díj 1927-ben*). Az eredeti kísérletben grafitdarabra monokromatikus ( $\lambda_0$ ) röntgensugárzást bocsátva (7.1 ábra) a szórt sugárzásban az eredeti hullámhosszon kívül megjelenik egy annál nagyobb, ( $\lambda'$ ) hullámhosszúságú sugárzás is.



7.1 ábra Kísérleti elrendezés a Compton-szórás mérésére

A szórt sugárzás intenzitását és hullámhosszát a szórási szög függvényében vizsgálva a 7.2 ábrán látható eredményeket kapjuk.



7.2 ábra A primer és a szórt sugárzás spektruma a szórési szög függvényében

A mért görbéről a következőket állapíthatjuk meg:

- A primer sugárzáson kívül megjelenik egy annál nagyobb hullámhosszú sugárzás is, ahol a  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0$  eltolódás annál nagyobb, minél nagyobb a  $\vartheta$  szórési szög.
- A szórési szög növekedtével a primer sugárzás intenzitása csökken, az eltoló vonal intenzitása növekszik.

Többféle anyaggal elvégezve a kísérletet, további megállapítások tehetők:

- A  $\Delta\lambda$  eltolódás független az anyagi minőségtől.
- A szóró anyag rendszámának növelésével a primer sugárzás intenzitása nő, míg az eltoló sugárzás intenzitása csökken.

A kísérleti tapasztalatok egyszerűen magyarázhatók, ha a röntgensugárzást részecskék (fotonok) áramának képzeljük el, melyek az atom egy elektronjával rugalmatlanul ütközve nem csak energiát, hanem impulzust is adnak át az elektronnak. Egy  $E = h\nu$  energiájú,  $c$  fénysebességgel mozgó foton impulzusa:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k. \quad (7-1)$$

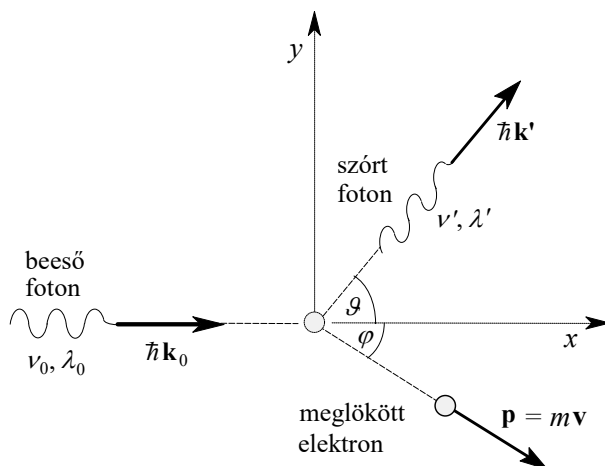
A Compton szórás magyarázatához tegyük fel, hogy az  $x$  tengely mentén érkező  $\lambda_0$  hullámhosszú foton meglöki a kezdetben mozdulatlanul tekintett, álló elektront. Energiájának egy részét átadja az elektronnak, majd a foton az  $x$  tengellyel  $\vartheta$  szöget, az elektron pedig  $\varphi$

szöget bezáró irányban halad tovább (7.3 ábra). A nagy sebesség miatt az elektronra a relativisztikus formulákat kell alkalmaznunk; az elektron mozgási energiája

$$E = (m - m_0)c^2, \quad (7-2)$$

ahol  $m_0$  az elektron nyugalmi tömege,

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (7-3)$$



7.3 ábra A Compton-effektus

A folyamatra felírva az energiamegmaradást, valamint a komponensenkénti impulzusmegmaradást, a foton hullámhossz-eltolódására a következő kifejezést kapjuk:

$$\Delta\lambda = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = \lambda_c (1 - \cos \vartheta), \quad (7-4)$$

ahol

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0 c} = 2.427 \text{ pm} \quad (7-5)$$

az elektron *Compton-hullámhossza*. Ez univerzális állandó, annak a hullámhossz-eltolódásnak a mértéke, amely  $\vartheta = 90^\circ$ -nál mérhető.

Foton- ill elektronszámlálókkal kimutatták, hogy a szórt foton és az elektron egyidejűleg (kb. 10 ps-on belül) repülnek szét (többek közt *Bay Zoltán (1900-1992)*), valamint ködkamrás felvételekkel bizonyították azt is, hogy a  $\vartheta$  szögben szórt fotonhoz pontosan a  $\varphi$  szögben meglökött elektron tartozik. Ezek alapján az energia- és impulzusmegmaradás elemi folyamatokra is érvényesnek bizonyult, nem csupán azok átlagértékeire.

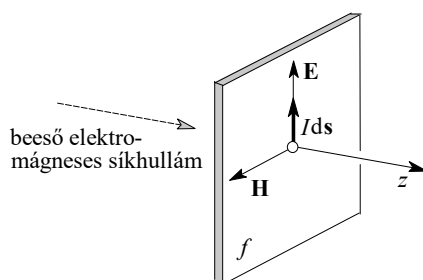
A szórt sugárzásban észlelt primer sugárzás hullámhosszának megfelelő jel annak tulajdonítható, hogy az atomokban erősen kötött elektronokon a fotonok energiaátadás nélkül szóródnak. A kis rendszámú elemekben az elektronok a nagyenergiás röntgenfotonok számára könnyebben kiszakíthatók, így ezekben a szórt, eltolt hullámhosszú sugárzás intenzitása nagyobb. Látható fényvel végzett kísérletekben az eltolódás nem tapasztalható, mert a fotonok energiája nem elegendő az elektronok kiszakításához.

Mint már említettük, a fotoeffektus és a Compton-effektus a fény hullámtermészete alapján nem értelmezhető, kielégítő válaszokat csak a fotonelmélet ad. A fénynyomás és az optikai Doppler-effektus mind a hullám-, mind a fotonelmélet segítségével megmagyarázható, ezt a két jelenséget az alábbiakban tárgyaljuk.

## 7.2 A fénynyomás

### a) A fénynyomás magyarázata a hullámelmélet alapján

Legyen a koordináta-rendszerünk  $z$  tengelye merőleges az  $f$  felületre, ekkor a felületre merőlegesen beeső elektromágneses síkhullám elektromos és mágneses térerősségei a 7.4 ábrán láthatóak.



7.4 ábra Az  $f$  felületre beeső elektromágneses síkhullám  $\mathbf{E}$  és  $\mathbf{H}$  vektorai

A periodikus  $\mathbf{E}$  elektromos tér hatására a felületen töltésmozgás, áram jön létre, ennek infinitezimális  $I ds$  elemére a mágneses tér a Biot-Savart törvény alapján  $z$  irányú erőt gyakorol, ami egy, az  $f$  felületre ható nyomást jelent.

Az elektromágnesség kurzus alapján ismeretes, hogy a felületre ható nyomást az egységnyi idő alatt, egységnyi felületre vonatkoztatott impulzusátadás adja meg, amely *tökéletesen elnyelő* felületre

$$p = \bar{w}, \quad (7-6)$$

ahol  $\bar{w}$  a fényhullám energiasűrűségének időbeli átlagértéke.

*Tökéletesen visszaverő* felületre (az impulzusátadást tökéletesen rugalmas „ütközésnek” tekintve) pedig

$$p = 2\bar{w}. \quad (7-7)$$

Ha a felület a rá  $\vartheta$  szögben érkező sugárzás energiájának  $r$ -ed részét visszaveri,  $d$ -ed részét átérteszti, akkor a nyomást a

$$p = \bar{w}(1 + r - d) \cos \vartheta \quad (7-8)$$

összefüggés adja.

### b) A fénynyomás magyarázata fotonokkal

A Compton-effektus tárgyalásánál láttuk, hogy egy foton  $h\nu/c$  impulzussal rendelkezik. Vizsgáljunk egy  $f$  felületű lemezt, melynek a merőlegesen ráeső párhuzamos,  $n$  fotonsűrűségű nyalábra vonatkoztatott visszaverő- és elnyelőképesége  $r$  ill.  $d$ . Így a felületet  $\Delta t$  idő alatt

$$\Delta N = nfc\Delta t \quad (7-9)$$

foton éri el. A lemezről visszaverődő

$$\Delta N_1 = r\Delta N \quad (7-10)$$

számú foton a lemeznek

$$\Delta I_1 = \Delta N_1 \cdot 2 \frac{h\nu}{c} = r\Delta N \cdot 2 \frac{h\nu}{c} \quad (7-11)$$

impulzust, a lemezben elnyelődő

$$\Delta N_2 = \Delta N(1-r-d) \quad (7-12)$$

számú foton pedig

$$\Delta I_2 = \Delta N_2 \frac{h\nu}{c} = \Delta N(1-r-d) \frac{h\nu}{c} \quad (7-13)$$

impulzust ad át. A teljes impulzusátadás e két folyamat során:

$$\Delta I = \Delta I_1 + \Delta I_2 = (1+r-d)nfc\Delta t \frac{h\nu}{c}. \quad (7-14)$$

A fénynyomás a felületegységre időegység alatt átadott impulzus:

$$p = \frac{\Delta I}{f\Delta t} = (1+r-d)n h\nu, \quad (7-15)$$

ahol  $n h\nu$  pontosan az elektromágneses tér energiasűrűsége (a fotonok sűrűsége szorozva az energiájukkal), tehát

$$p = (1+r-d)\bar{w}. \quad (7-16)$$

A fotonelmélet alkalmazásával ugyanazt az eredményt kaptuk, mint a fény hullámelméletével. A Nap sugárzása a Föld felszínén kb.  $1 \text{ kW/m}^2$ , az ebből származó fénynyomás kb.  $10^{-6} \text{ Pa}$ .

### 7.3 Az optikai Doppler-effektus

A relativisztikus sebességű mozgások esetén (pl. fény) két, egymáshoz képest  $v$  sebességgel mozgó koordináta-rendszer közti kapcsolatot a *Lorentz-transzformáció* írja le. A speciális relativitás témakörén belül már részletesen tárgyaltuk a Lorentz-transzformáció következményeit, úgymint egyidejűség, hosszkontrakció, idődilatáció, a fénysebesség határsebesség jellege, stb.

Tekintsünk egy, a rögzített  $(x,y,z)$  koordináta-rendszer kezdőpontjában ( $x_1 = 0$ ) levő  $\lambda$  hullámhosszon sugárzó fényforrást, a detektorunk pedig mozogjon az  $x$  tengely mentén állandó  $v$  sebességgel (*longitudinális effektus*). Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a  $t_1 = 0$  időpontban a két koordináta-rendszer kezdőpontja egybeesik és a fényforrás fázisa éppen 0. A detektorunk koordinátái a mozgó koordináta-rendszerben ekkor:

$$x'_1 = \gamma(x_1 - \beta ct_1) = 0 \quad (7-17)$$

$$ct'_1 = \gamma(ct_1 - \beta x_1) = 0. \quad (7-18)$$

A fényforrásunk a sugárzás végső fázisát a nyugvó rendszerben éppen  $t_2 = T = \lambda/c$  idő múlva éri el, helyzete ekkor  $x_2 = 0$ . Ezek a koordináták a  $v$  sebességgel mozgó detektor szempontjából

$$x'_2 = \gamma(x_2 - \beta ct_2) = -\beta\gamma cT, \quad (7-19)$$

$$ct'_2 = \gamma(ct_2 - \beta x_2) = \gamma cT, \quad (7-20)$$

amelyből a sugárzás periódusideje a mozgó koordináta-rendszerben  $T' = \gamma T$ .

A fényhullám végső fázisa a mozgó detektort a detektor sajátideje szerint a kezdőfázis után

$$t'_{2d} = t'_2 - \frac{x'_2}{c} = \gamma T + \beta\gamma T = \gamma T(1 + \beta) \quad (7-21)$$

idővel éri el, tehát a detektor által érzékelt frekvencia:

$$\nu' = \nu \sqrt{\frac{1 - \beta}{1 + \beta}}. \quad (7-22)$$

Az optikai Doppler-effektus a hangtanban megismerttől annyival különbözik, hogy a relativisztikus idődilataciót is figyelembe kell venni.

Az optikai Doppler-effektust *Ives és Stilwell* igazolta kísérletileg, homorú tükrök közt ide-oda verődő csősugarakkal. A kék- és vöröseltolódott hullámhosszak számtani közepét mérve a relativisztikus Doppler-effektus által jósolt eredményt kapták. Megjegyezzük, hogy rendkívül pontos atomórákkal sikerült kimutatni az effektust már kb.  $10 \text{ m/s}$  sebességgel mozgó források esetén is.

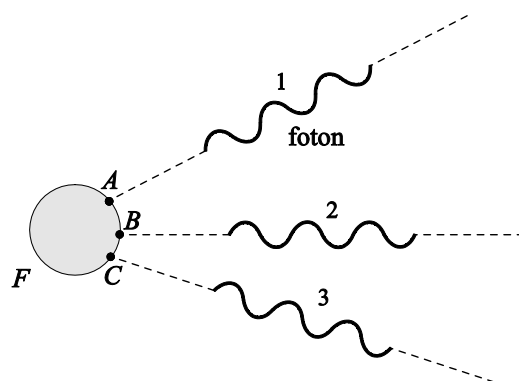
#### 7.4 A fény kettős természete

Az előbbieken láttuk, hogy a fénynyomás és az optikai Doppler-effektus mind a hullám, mind a fotonelmélet segítségével értelmezhető. Ugyanakkor az elektromágneses sugárzás hullámelmélete nem alkalmas a fotoeffektus és a Compton-szórás magyarázatára, valamint nem tudja megmagyarázni a fény abszorpciójával és emissziójával kapcsolatos jelenségeket sem. Ezekre a fotonelmélet ad magyarázatot, mely szerint a  $\nu$  frekvenciájú fény anyaggal való kölcsönhatása  $h\nu$  energiájú korpuszculák (fotonok) segítségével történik, melyek egyúttal  $h\nu/c$  impulzust is szállítanak. A fentiekén kívül a fotonelmélet egyik bizonyítéka a látható fény fluktuációja is.

*Vavilov* kísérletében másodpercenként kb.  $0.1 \text{ s}$ -os látható fényimpulzusokkal bombázta a retina érzékenyebb, pálcákat tartalmazó részét. Azt tapasztalta, hogy egy bizonyos fényintenzitás alatt a megfigyelő nem látja a felvillanásokat, melyből arra a következésre jutott, hogy a fény fotonok árama, és a retina csak bizonyos mennyiségű minimális (*számításai szerint*  $n \approx 10$ ) foton elnyelése esetén gerjesztődik. További probléma, hogy a mikrorészecskék nagy térszögben történő emissziója nehezen értelmezhető térben lokalizált fotonok segítségével.

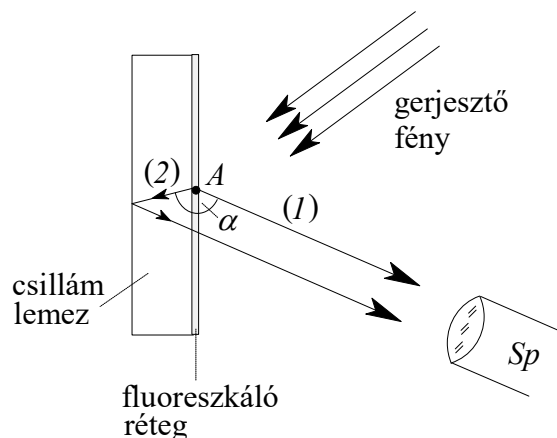
Ennek a részecske-hullám kettősségnek a feloldására, egyesítésére több próbálkozás született, közülük talán a leghíresebb Einstein ún. *tűsugárzás* elmélete. Eszerint a fényforrás különböző atomjai által emittált fotonok egy-egy kis térszögben haladó, méteres hosszúságú hullámvonulatnak felelnek meg (*7.5 ábra*). A hullámcsomag hosszát az atomok gerjesztett állapotának élettartamából (kb.  $10^{-8} \text{ s}$ ) számolhatjuk ki. Az elmélet szerint egy ilyen hullámvonulat kettéosztható, majd újból egyesítve interferenciát tapasztalhatunk.





7.5 ábra A túsugárzás-modell

Az elmélet ellen szól, hogy ha nem egyesítjük újra a kettéosztott fotont, akkor a „félfotonok” becsapódásakor  $h\nu/2$  energiát kellene észlelni, azonban ilyet nem tapasztaltak. A túsugárzás modell ellen szól Selényi Pál (1884-1954) nagyszögű interferencia-kísérlete is, melyben egy vékony mica (csillámlemez) rétegre fluoreszkáló réteget vitt fel majd a réteget gerjesztve az emittált hullám egy része közvetlenül, másik része a csillámlemez alsó felületéről visszaverődve jutott a levegőbe (7.6 ábra). A Selényi-féle kísérlet volt az első, amely atomi méretű, pillanatnyi fényforrásokat használt a nagyszögű interferencia elérésére. A két fénysugarat egyesítve interferenciát tapasztalt, tehát a kísérlet eredményei azt mutatták, hogy a gerjesztett atomok gömbhullámot bocsátanak ki.



7.6 ábra A Selényi-féle nagyszögű interferencia-kísérlet

Jánossy Lajos (1912-1978) kétféle, Michelson-interferométeren alapuló kísérletei a fény hullám- és részecsketermészetét is igazolták. Ha az interferométert olyan gyenge fénnel világítjuk meg, hogy abban elvileg csak egy foton tartózkodhat, a felfogó ernyőn akkor is olyan interferenciaképet kapunk, mintha nagy intenzitással világítanánk meg. Ez annak a bizonyítéka, hogy a fény gömbhullám formájában terjed, a kettéosztott hullám részei a tükrökről visszaverődve interferálnak.

Ha a két tükör helyére fotoelektron-sokszorozókat teszünk és a detektorok jelének egyidejűségét vizsgáljuk (csak azokat a jeleket nézzük, melyek a két detektorban egyszerre jelentkeznek), azt tapasztaljuk, hogy a két detektor egyidejűleg nem jelez. Ha a fény gömbhullám formájában terjedne, akkor egyszerre érné el a két detektort. A kísérlet

tapasztalatai szerint viszont az emittált gömbhullámban csak egy foton van, amely vagy az egyik, vagy a másik detektorba csapódik.

Ezen kísérletek tanulsága szerint, az adott kölcsönhatás szabja meg, hogy a fény részecske vagy hullám tulajdonságai dominálják a kölcsönhatás jellegét.

### 7.5 A mikrorészecskék kettős természete, anyaghullámok

Míg számos fizikus a fénynél mutatkozó „részecske-hullám” kettősség áthidalására törekedett, *L. de Broglie* 1924-ben azt a merész gondolatot vetette fel, nem kell-e a „közönséges” anyagi részecskéknek is kettős természetet tulajdonítani, azaz a részecskemodell mellett a hullámmodellt is alkalmazni. Relativitáselméleti megfontolások alapján felállította azt a hipotézist, hogy minden minden mozgó részecskéhez hullám tartozik, amelynek hullámhossza ( $\lambda$ ) és frekvenciája ( $\nu$ ) a részecske  $p = mv$  impulzusával és  $E = mc^2$  energiájával ugyanolyan kapcsolatban van, mint a fény hullámhossza és frekvenciája a foton impulzusával és energiájával. Mivel a fényhullám (foton) esetében ismeretesen  $p = h/\lambda$  és  $E = h\nu$ , a részecskéhez tartozó *de Broglie-féle* vagy „anyaghullámok” hullámhossza és frekvenciája:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}, \quad (7-23)$$

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}, \quad (7-24)$$

ahol  $m = m_0 \sqrt{1 - (v/c)^2}$ ,  $m_0$  a részecske nyugalmi tömege;  $v \ll c$ -re  $m \approx m_0$ .

A jól ismert  $m_0 v^2/2 = eU$  egyenlet alapján a  $v$  helyett a „voltsebesség”  $U_v$  számértékét bevezetve azt kapjuk, hogy a  $v/c \ll 1$  esetben az „ $U_v$  voltsebességű” elektronokhoz rendelt *de Broglie* hullámok hullámhossza:

$$\lambda_{el} \approx \sqrt{\frac{150}{U_v}} \text{ \AA} \quad (U_v < 20\,000\text{-re } 1\%\text{-nál kisebb hibával)}. \quad (7-25)$$

Például a 150 V feszültséggel felgyorsított elektronokhoz tartozó hullámhossz  $1 \text{ \AA} (= 10^{-10} \text{ m})$ , akkora, mint a rövidhullámú röntgensugaraké. Ha tehát a hipotézis helyes, az elektronsugaraknak kristályokra való bocsátásakor a röntgensugarakéhoz hasonló interferencia- vagy elhajlásjelenségek várhatók. Valóban, az anyaghullámok kísérleti bizonyítékát először ilyen elektroninterferenciák szolgáltatták, később pedig a *de Broglie-féle* hipotézis helyessége az elektronokon kívül más mikrorészecskékre is beigazolódott. A makroszkópikus testekhez tartozó anyaghullámok nem nyilvánulnak meg észlelhető módon, mert (7-23) szerint a hullámhossz rendkívül kicsiny, pl.  $m = 1 \text{ g}$  és  $v = 1 \text{ cm/s}$  esetén  $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-27} \text{ cm}$ .

Az elektronok diffrakcióját (elhajlását, interferenciáját) és ezzel az anyaghullámok létezését meggyőzően először *Davisson* és *Germer* mutatták ki 1927-ben a röntgensugaraknál megismert *Laue-módszernek* megfelelő kísérlettel.

Elektrondiffrakció a *Debye-Scherrer-módszer* mintájára is előállítható (*G.P. Thomson*, 1927). A néhány tízezer volt feszültséggel felgyorsított keskeny elektronnyaláb jó vákuumban elforgatható és eltolható, igen vékony ( $100 \text{ \AA}$ ) preparátumon halad át, és az így keletkező elhajlási kép – esetleg fluoreszkáló ernyőn való megfigyelés után – megfelelő detektoron rögzíthető.

Az elektronok elhajlását – hasonlóan, mint a röntgensugarakét – sikerült később éleken és fémrácsokon (surlódó beesés mellett), valamint gázsugarakon is kimutatni, és az eredményeket az elektronokhoz tartozó anyaghullámokkal értelmezni. Ezek a hullámok szabják meg nagy részben az elektronmikroszkóp feloldóképességét, illetve a  $d = \lambda/n \sin u$  feloldási határt is, amely a megvalósítható viszonylag kis  $u$  apertúra ellenére sokkal kedvezőbb a fénymikroszkópénál, mert a szokásos  $U \approx 10^5$  V gyorsító feszültség mellett a  $\lambda$  csak kb. 0,04 Å.

### 7.6 Ellenőrző kérdések

- Ismertesse a Compton effektus lényegét, illetve az atomfizikai jelentőségét!
- Fejezze ki a mozgó foton impulzusát a hullámszám vektor segítségével!
- Mit ért a fény kettős természete alatt?
- Mondjon példát csak a hullám, csak a foton elmélet segítségével magyarázható jelenségekre!
- Milyen ellentmondást lát a két elmélet együttes alkalmazását illetően?

### 7.7 Feladatok

- Állítson fel kvantitatív összefüggést a Selényi-féle interferencia kísérletben alkalmazott csillámlemez maximális vastagságára vonatkozóan!
- A Compton-effektus értelmezésével az elektron mozgási energiájára alkalmazott relativisztikus formula szükségességét hozza kapcsolatba a beeső foton frekvenciájával.

## 8. A Bohr-féle atommodell

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a Bohr-féle, illetve a Bohr-Sommerfeld modell alapvetéseit,
- ismeri a Bohr-féle atommodell kísérleti bizonyítékait,
- a modell alapján képes értelmezni a hidrogén atom termrendszerét, spektrumát,
- elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja az atom rendszerek energiájának kvantáltságára, diszkrét meghatározott energiaállapotaira vonatkozó tényeket.

Jelen fejezetben ismertetjük a Bohr-féle, illetve a Bohr-Sommerfeld atommodell alapvetéseit.

A fejezetben helyet kapnak a Bohr-féle atommodell kísérleti bizonyítékai, illetve a modellből a hidrogén atom felépítésére, termrendszerére, spektrumára vonatkozó következtetések.

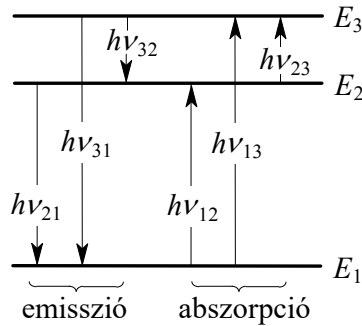
A Rutherford-féle atommodell nem adott magyarázatot az atomok vonalas színeképre és elektrodinamikai stabilitására. A fotonelmélet segítségével korábban már sikerült megmagyarázni azokat a jelenségeket is, amelyek a fény hullámtermészetével nem voltak összeegyeztethetők (pl. hőszugárzás (ld. később), fotoeffektus, ...), így kézenfekvőnek tűnt, hogy a Rutherford-modellben is szerepet játszhat a fény kvantumtulajdonsága.

*Niels Bohr (1885-1962)* a Planck-féle kvantumfeltétel és az Einstein-féle fotonhipotézis segítségével próbált magyarázatot adni a Rutherford-modell hiányosságaira. Bohr feltételezései a következők voltak (*Bohr-féle posztulátumok*):

- Az atomok elektronjai a klasszikus mechanika és klasszikus elektrodinamika által megengedett pályák közül csak az ún. stacionárius pályákon mozoghatnak, ahol energiájuk állandó és sugárzást nem bocsátanak ki.
- Emisszió csak akkor lehetséges, amikor egy elektron az  $E_n$  energiájú állapotból az  $E_m$  energiájú állapotba megy át, ekkor a kisugárzott foton energiájára érvényes, hogy  $h\nu = E_n - E_m$  (Bohr-féle frekvenciafeltétel).

A posztulátumok tehát kimondják, hogy az atom stabilan csak stacionárius (vagy kvantum-) állapotokban létezhet, melyekben energiája állandó (nem sugároz). Sugárzás elnyelése vagy kibocsátása csak két stacionárius állapot közti átmenet során lehetséges, ekkor az elnyelt vagy kibocsátott foton energiája megegyezik a két állapot energiakülönbségével.

A Bohr-féle posztulátumokat egy atom három energiaszintje esetén a *8.1 ábra* szemlélteti. A legalacsonyabb energiájú ( $E_1$ ) állapot az atom *alapállapota*, az  $E_2$  és  $E_3$  szintek a *gerjesztett* állapotok. Az atom egy alacsonyabb energiájú állapotból *abszorpció* útján egy magasabban fekvő állapotba kerülhet, ha a ráeső sugárzásból a két állapot energiakülönbségének megfelelő energiájú fotont nyel el. Ugyanakkor egy magasabb energiájú állapotból egy alacsonyabba való relaxáció során szintén a két állapot energiakülönbségének megfelelő energiájú fotont *emittál*. A Bohr-féle frekvenciafeltétel alapján magyarázhatjuk az atomok vonalas színeképet.

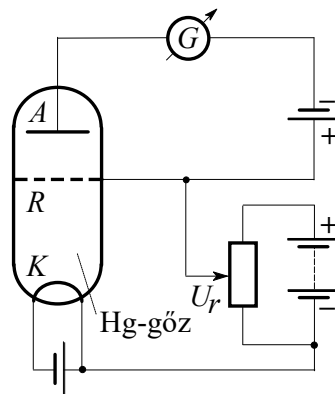


8.1 ábra Abszorpció és spontán emisszió három energianívó esetén

### 8.1 A Franck-Hertz-féle elektronütközési kísérletek

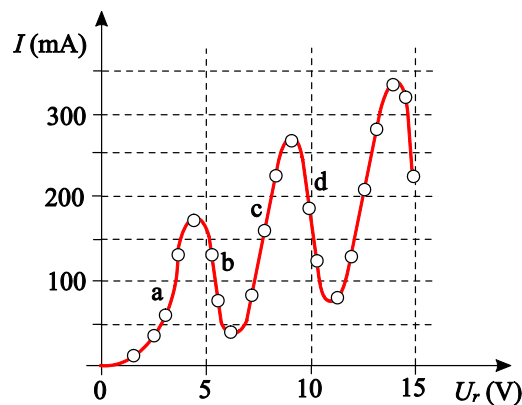
A Bohr-féle posztulátumok meggyőző bizonyítéka volt a Franck és Hertz által végzett kísérlet, melyben alacsony nyomású gázok atomjait ütköztették gyorsított elektronokkal. Az elektronok sebességeloszlásából az elektronok és az atomok közti energiaátadás rugalmas ill. rugalmatlan voltára lehet következtetni.

A kísérlet elvi elrendezése a 8.2 ábrán látható. A kisnyomású higanygőzt tartalmazó – elektromos szempontból egy vákuumtriódához hasonló – csőben a  $K$  izzókatódból kilépő elektronokat az  $R$  rácsig a tetszőlegesen változtatható  $U_R$  rácfszfűltség gyorsítja, majd a rác és az anód között gyenge ellentérben mozognak.



8.2 ábra A Franck-Hertz-kísérlet vázolata

Az anódra eljutó elektromos áramot egy  $G$  galvanométer méri. A  $G$  galvanométer által mért áramnak az  $U_R$  rácfszfűltségtől való függését a 8.3 ábra mutatja.



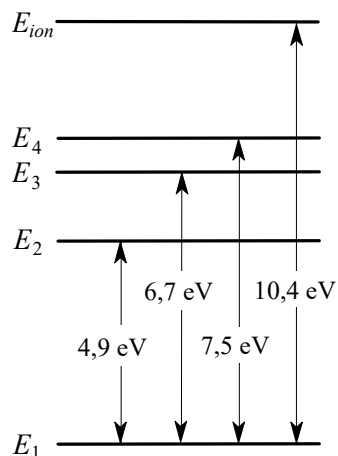
8.3 ábra Az elektronok áramának függése a rácfszfűltség függvényében

A mérési eredményeket a következőképp értelmezhetjük:

- Az „a” szakaszon a feszültség növelésével az áramerősség is nő. A nehéz Hg-atomokkal ütköző elektronok az R és A közti ellentér ellenére egyre növekvő számban érik el az anódot, energiát alig veszítenek. Ebből az ütközések rugalmas mivoltára következtethetünk. 1 V gyorsítófeszültség hatására az elektronok kb.  $6 \times 10^5$  m/s sebességre tesznek szert, míg az ekvipartíció tételéből adódóan a nehéz Hg-atomok sebessége szobahőmérsékleten csak 200 m/s, tehát a Hg-atomoknál mintegy 400000-szer kisebb tömegű elektronok az állónak tekinthető atomokról egyszerűen „visszapattannak”.
- Az  $U_R = 4.9$  V-os feszültséget elérve az áram csökkenni kezd („b” szakasz), ami az ütközések rugalmatlan jellegére utal, az elektronok energiájuk egy részét átadják a Hg-atomoknak.
- A rácsfeszültséget tovább növelve az áram növekedni kezd, mert az ütközések során „lelassított” elektronok a rácsig újból felgyorsulnak annyira, hogy az ellenteret le tudják győzni, tehát az ábra „c” szakaszán az áramerősség ismét növekszik.
- A rácsfeszültséggel elérve a 9.8 V-ot az áram ismét csökken, mert az első ütközés során energiájukat elvesztett elektronok ismét nyernek 4.9 eV energiát, így újra rugalmatlan ütközésekben vesznek részt. A feszültséget tovább növelve ezek a folyamatok ismétlődnek.

A kísérletet higanyon kívül több másik atom gőzét tartalmazó csövekkel elvégezve azt tapasztalták, hogy az atomok csak a rájuk jellemző, pontosan meghatározott energiát tudják felvenni az elektronoktól. A mérési elrendezés itt nem részletezett módosításával kimutatták, hogy a Hg több különböző nagyságú (pl. 4.9 eV, 6.7 eV, 7.5 eV) energiát képes átvenni az elektronoktól, valamint 10.4 eV energiájú elektronokkal ütközve ionizálódik.

A kísérlet meggyőzően bizonyította a Bohr-posztulátumok érvényességét, melyek értelmében a Hg-atom energianívóit a 8.4 ábra szerint képzelhetjük el.



8.4 ábra A Hg energiaszintjei a Franck-Hertz-kísérlet alapján

Az  $E_1$  alapállapotban levő Hg-atom 4.9 eV energia elnyelésével az  $E_2$  gerjesztett állapotba jut, a más, meghatározott energiaadagok segítségével pedig az  $E_3$ ,  $E_4$  magasabb gerjesztett állapotokba kerül (alapállapotból). Ha egy alapállapotban levő Hg-atom az *ionizációs*

energiájának megfelelő  $10.4 \text{ eV}$  energiát abszorbeál, akkor elveszíti egy elektronját, azaz ionizálódik.

A fenti alap- és gerjesztett állapotok a Bohr-féle posztulátumokban szereplő stacionárius állapotok. A frekvenciafeltétel bizonyítéka, hogy a higanygőz  $4.9 \text{ V}$  gyorsítófeszültség alkalmazása esetén  $\lambda = 253 \text{ nm}$  hullámhosszúságú fényt bocsát ki, ez pedig megfelel az első gerjesztett állapot és az alapállapot közti energiakülönbségnek.

## 8.2 A hidrogénatom Bohr-féle modellje

A következőkben megvizsgáljuk, hogy a Rutherford-féle atommodell a Bohr-féle posztulátumokkal kiegészítve milyen új információval szolgál az atom szerkezetéről. A hidrogénatom egy  $M$  tömegű,  $e$  töltésű magból (proton) és egy  $m$  tömegű,  $-e$  töltésű elektronból áll. Feltesszük, hogy az elektronnál sokkal nehezebb mag nyugvó állapotban van és az elektron  $r$  sugarú körpályán, állandó  $v$  sebességgel kering körülötte. Az atommagot  $Ze$  töltésűnek tekintjük, ezzel az általánosítással következtetéseket vonhatunk le a szintén egy elektront, de több protont tartalmazó  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ , ... ionokra is.

Az elektron körpályán való mozgásához szükséges centripetális erőt a mag vonzásából származó Coulomb-erő szolgáltatja:

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (8-1)$$

A Bohr-elmélet szerint ez a sugár nem lehet akármilyen, hiszen az elektron csak a stacionárius pályákon keringhet. Bohr azzal a feltételezéssel élt, hogy az elektron impulzusmomentuma (amely *energia*  $\times$  *idő* dimenziójú) csak  $h/2\pi$  egész számú többszöröse lehet, ez a Bohr-féle kvantumfeltétel:

$$mrv = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar; \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (8-2)$$

ahol az  $n$  számot kvantumszámnak hívjuk. Ezekből az  $n$  kvantumszámhoz tartozó pályasugár és az elektron sebessége származtatható:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mZe^2} n^2 \quad (8-3)$$

$$v_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar n} \quad (8-4)$$

tehát az elektronpályák sugara az  $n$  kvantumszám növelésével négyzetesen nő, az adott pályákon az elektron sebessége pedig a kvantumszámmal fordított arányban változik.

A hidrogénatomnál  $Z = 1$  és  $n = 1$  esetén, tehát a maghoz legközelebbi, legbelső elektronpálya sugara  $r_1 = 0.53 \text{ \AA}$ , az ún. *Bohr-sugár*. Az elektron sebessége ezen a pályán  $v_1 = \alpha c$ , ahol  $\alpha = 1/137$  az ún. finomszerkezeti állandó.

Az elektron energiája a mozgási és a potenciális energia összege, melyre egyszerű számolással adódik, hogy

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (8-5)$$

Ezen összefüggés szerint az atom energiája az  $n = 1$ , ún. alapállapotban a legkisebb, a nagyobb  $n$ -ekhez tartozó gerjesztett állapotokban pedig növekszik, míg az  $n = \infty$ -nek megfelelő esetben energiája zérus és végtelen távolságra van a magtól. Az energia nullpontjának tetszőleges megválasztása miatt tekinthetjük az alapállapotú atom energiáját zérusnak, ekkor az  $n$  kvantumszámmal jelzett állapot energiája:

$$E'_n = E_n - E_1 = \frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right). \quad (8-6)$$

Így a hidrogénatom első gerjesztett állapotának energiájára  $10.16 \text{ eV}$ , míg az ionizációs energiára  $13.6 \text{ eV}$  adódik.

A Bohr-elmélet szerint a hidrogénatom az  $n \rightarrow k$  kvantumszámokkal jelzett pályák közti átmenet során

$$\Delta E = |E_k - E_n| = \frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left| \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right| \quad (8-7)$$

energiájú fotont emittál vagy abszorbeál. Ha  $k > n$ , akkor gerjesztésről van szó, tehát abszorpció történik,  $k < n$  esetben pedig emisszióhoz kötődő relaxáció.

A fenti eredményhez kötődően, érdemes hangsúlyozni, hogy a spektrumok értelmezésének kiindulópontja a Bohr-féle fрекvencia feltétel, mellyel a fény frekvenciája

$$\nu = \frac{E_k - E_n}{h} \quad (8-8)$$

összefüggés alapján – az atomok lehetséges energia nívói közötti energia különbség és a Planck-állandó hányadosával – fejezhető ki.

A spektroszkópiában használatos hullámszámmal ( $\bar{\nu} = 1/\lambda$ , ahol  $\lambda$  a cm-ekben kifejezett hullámhossz) a frekvenciafeltétel a

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{E_k - E_n}{hc} = \frac{E_k}{hc} - \frac{E_n}{hc} = T_k - T_j \quad (8-9)$$

alakot ölti, ahol a  $\text{cm}^{-1}$ -ben kifejezett  $T = hc$  mennyiséget termnek nevezzük. Ily módon a (8-9) összefüggés szerint bármely spektrumvonal hullámszáma két term különbségeként áll elő.

A fenti terminológiában a hidrogénatom kísérletileg mért színeképe – ami a látható tartományban négy vonalból áll – a sugárzás hullámszámával kifejezve *Balmer* szerint a

$$\bar{\nu} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right); \quad (n = 3, 4, 5, \dots) \quad (8-10)$$

formulával írható le, ahol  $R_H$  a H-atomra vonatkozó *Rydberg-állandó*, amelynek értéke:

$$R_H = 109677.58 \text{ cm}^{-1} \equiv 13.59 \text{ eV}. \quad (8-11)$$

A H-atom lehetséges term értékeit a

$$T_n = \frac{R_H}{n^2}; \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (8-12)$$

összefüggés írja le.



A (8-10) összefüggésből látható, hogy az  $n$  kvantumszám növelésekor a szomszédos spektrumvonalak közti hullámszám-különbség fokozatosan csökken és az  $n \rightarrow \infty$  esetben a fenti képletből a Balmer sorozat határára (amely egyben az ionizáció határa is) a

$$\bar{\nu} = R_H / 4 \quad (8-13)$$

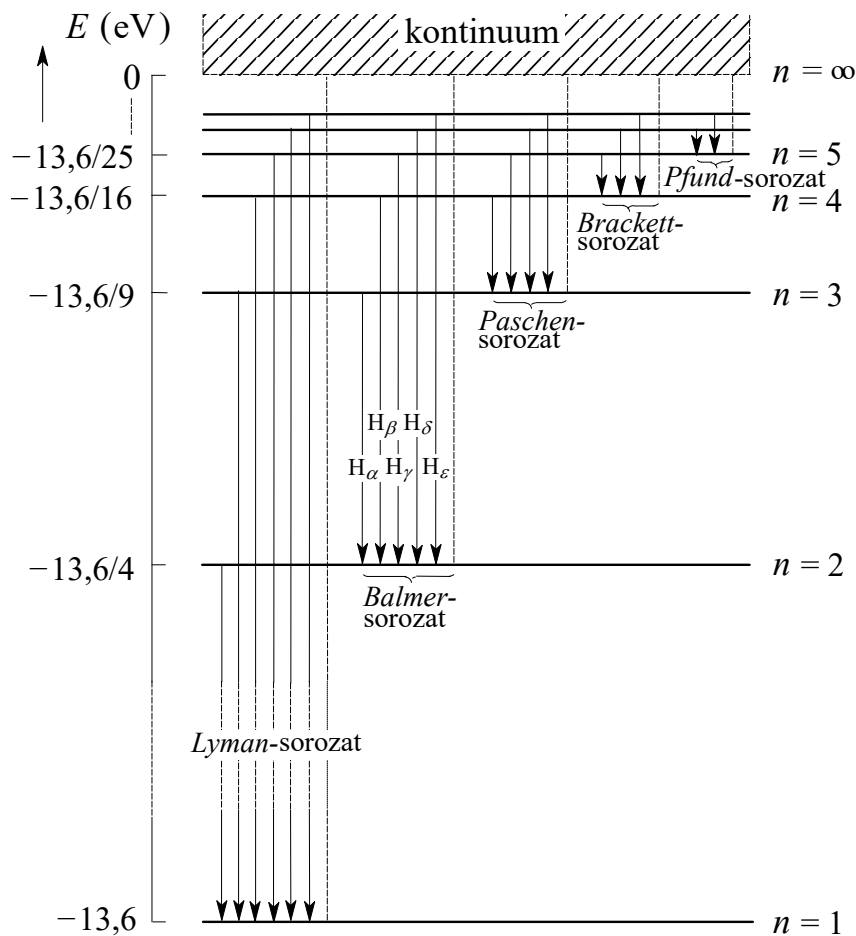
határ adódik. A hidrogénatom emissziós színeke a látható tartományon kívül is tartalmaz vonalakat, melyek  $n$  és  $k$  különböző értékeire a következők:

- Lyman-sorozat (1906) :  $k=1, n=2,3,\dots$  (ultraibolya)
- Balmer-sorozat (1885) :  $k=2, n=3,4,\dots$  (látható, közeli ultraibolya)
- Paschen-sorozat (1908) :  $k=3, n=4,5,\dots$  (infravörös)
- Brackett-sorozat (1922) :  $k=4, n=5,6,\dots$  (távoli infravörös)
- Pfund-sorozat (1924) :  $k=5, n=6,7,\dots$  (távoli infravörös)

A fenti sorozatok határához (az  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  pályákról történő ionizációhoz) tartozó hullámszámok rendre:

$$R_H, \frac{R_H}{4}, \frac{R_H}{9}, \frac{R_H}{16}, \frac{R_H}{25}.$$

A fentiek alapján a hidrogénatom termsémáját a 8.5 ábra alapján szerkeszthetjük meg.



8.5 ábra A hidrogénatom termsémája az emissziós sorozatokkal

A klasszikusan értelmezett „keringési” frekvencia a hidrogénatomban:

$$\nu_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \frac{v_n}{r_n} = \frac{me^4}{32\pi^3 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \frac{1}{n^3}, \quad (8-14)$$

ami általában teljesen más, mint a fenti energiakülönbségnek megfelelő frekvencia. Ha viszont  $n$  elég nagy és szomszédos energiaszintek közti átmeneteket vizsgálunk, akkor  $k = n-1$  miatt

$$\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} = \frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} = \frac{2n-1}{n^2(n-1)^2} \approx \frac{2}{n^3}, \quad (8-15)$$

akkor

$$\nu = \frac{|E_{n-1} - E_n|}{h} = \frac{me^4}{32\pi^3 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \frac{1}{n^3} \quad (8-16)$$

adódik, tehát nagy kvantumszámokra a szomszédos energiaszintek közti átmenetkor kisugárzott foton frekvenciája közelít/megegyezik az elektron keringési frekvenciájával, amint az a klasszikus elméletből következne.

Bohr korrespondencia-elve kimondja, hogy a kvantummechanika határesetben átmegy a klasszikus mechanikába. Ennek megfelelően a (8-16) egyenlet értelmezése a *korrespondencia-elv* egyik következménye, amely kimondja, hogy *a kvantummechanika törvényei nagy kvantumszámok esetén egyre jobban megközelítik a klasszikus elméletet és határesetben utóbbiakba mennek át.* Ebben az esetben világos, hogy nagy  $n$ -re a  $\Delta n = 1$  változás szinte elhanyagolható, így az ugrásszerű változás nem sokban különbözik a klasszikus elmélet által jósolt folytonos átmenettől.

A Bohr elmélet jelentősége, hogy az atom stacionárius állapotaira, illetve az ezek közötti átmenetekre vonatkozó két posztulátum felállításával lehetővé tette a vonalas színekpek keletkezésének megértését, valamint kvantitatív szempontból is pontosan értelmezte a hidrogén atom és a hidrogénszerű ionok spektrumát.

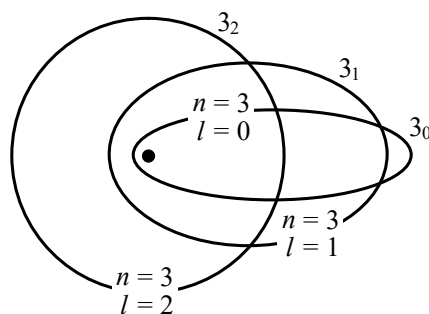
### 8.3 A Bohr-Sommerfeld-modell

A hidrogénatom színekp-vonalait nagyfeloldású spektroszkóppal vizsgálva azt tapasztaljuk, hogy a színekp-vonalak több, egymáshoz nagyon közeli komponensből állnak. A  $H_\alpha$  vonal pl. három különböző hullámhosszúságú színekp-vonalból áll, melyek közül a két legintenzívebb közti különbség mindössze  $0.33 \text{ cm}^{-1}$ . A Bohr-modell erre az ún. *multipllett* szerkezetre nem ad magyarázatot. *Arnold Sommerfeld (1868-1951)* az adott  $n$  kvantumszámmal jellemzett (közelítőleg) állandó energiájú pályákat a Kepler-törvények alapján nem csak körnek, hanem ellipszisnek feltételezve, ezek megkülönböztetésére egy  $l < n$  ún. *mellékkvantumszámot* vezetett be.

Könnyen megmutatható, hogy az  $n$  fő-, ill.  $l$  ( $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ) mellékkvantumszámokkal jelzett állapotban az elektron lehetséges ellipszis pályáinak nagy- és kistengelyét a következő módon számíthatjuk ki ( $r_l$  a Bohr-sugár, a legkisebb körpálya sugara):

$$a_n = \frac{r_1}{Z} n^2; \quad b_n = a_n \frac{l+1}{n} = \frac{r_1}{Z} n(l+1). \quad (8-17)$$

Így egy adott  $n$  főkvantumszámhoz egy kör ( $l = 0$ ) és  $n-1$  ellipszispálya tartozik (ld. 8.6 ábra). A fentiekhez hasonló számolások alapján adódik, hogy egy adott pályán az elektron energiája a már megismert képlet szerint csak az  $n$  főkvantumszámtól függ, azaz az állapot  $n$ -szeresen *elfajult (degenerelált)*.



**8.6 ábra** Az  $n = 3$  főkvantumszámhoz tartozó elektronpályák

A Bohr-Sommerfeld-elmélet szerint az  $l$  mellékvantumszámmal jelölt pályán az elektron pályaimpulzusmomentuma (az impulzusmomentum-vektor nagysága) (8.1 táblázat)

$$|\mathbf{l}| = l\hbar. \quad (8-18)$$

Erre az értékre a későbbi kvantummechanikai leírás adott megfelelő eredményt, ami szerint ez

$$|\mathbf{l}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}. \quad (8-19)$$

$l =$	0	1	2	3	4	5
$ \mathbf{l}  =$	0	$\sqrt{2}\hbar$	$\sqrt{6}\hbar$	$\sqrt{12}\hbar$	$\sqrt{20}\hbar$	$\sqrt{30}\hbar$
az elektron vagy az állapot elnevezése	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>

**8.1 táblázat** Az elektronállapotok elnevezése a mellékvantumszám alapján

Az ellipszispályákon tartózkodó elektronok  $r$  és  $\varphi$  polárkoordinátáihoz tartozó  $p_r$  és  $p_\varphi$  impulzusokra vonatkozó feltételek:

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad (8-20)$$

$$\oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h, \quad (8-21)$$

ahol  $n_r$  és  $n_\varphi$  az ún. *radiális* és *azimutális* kvantumszámok, melyekre  $n = n_r + n_\varphi$  és  $n_\varphi = l + 1$ .

A Bohr-Sommerfeld-modell csak azt az új eredményt adja, hogy az elfajulás miatt egy energianívóhoz az elektronok többféle elrendezése tartozhat. Mivel a degenerált állapotokban az energia ugyanakkora, az átmenetek során sem tapasztalhatnánk különböző hullámhosszúságú emissziót, azaz az energiaszintek felhasadását ez a modell sem magyarázza meg.

A felhasadást relativisztikus effektusok okozzák, mely szemléletesen a következőket jelenti. A bolygómozgás törvényeit az elektronra alkalmazva, Kepler második törvénye értelmében az ellipszispályán keringő elektron a maghoz közeli helyzetben gyorsul. A relativisztikus tömegnövekedés miatt a Bohr-sugár kisebb lesz, ami nagyobb kötési (azaz alacsonyabb)

energiát eredményez, így minél kisebb az ellipszis kistengelye, annál nagyobb korrekció szükséges. Sommerfeld szerint az  $n, l$  kvantumszámokkal jelzett állapotban az energia:

$$E_{n,l} = -Rhc \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right], \quad (8-22)$$

ahol  $R$  a rydberg-állandó,  $h$  a Planck-állandó és

$$\alpha = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 hc} = \frac{1}{137} \quad (8-23)$$

pedig az ún. *finomszerkezeti állandó*.

A modell sikeresen megmutatta, hogy atomi szinten a klasszikus fizika törvényei nem alkalmazhatóak. A Bohr elmélet kiegészítéseként, a stacionárius állapotok közti átmeneteket leíró posztulátumok segítségével értelmezte a vonalas színeképek keletkezését. Az elmélet az elektronspint is felhasználva nagy segítséget nyújtott az atom- és molekulaszíneképek egységes értelmezéséhez, valamint a periódusos rendszer felépítéséhez.

Fő hiányossága, hogy az elmélet sem nem klasszikus, sem nem következetesen kvantum, az elektronpályák kiválasztása önkényesnek tűnik. A spektrumvonalak intenzitásáról, polarizációjáról sem tudunk semmit. A Bohr-modellben az atommag körül az elektronok síkban keringenek, míg a kísérletek szerint az atom alapállapotban gömbszimmetrikus. Az elmélet hiányosságaira csak az új, az ún. *hullámelmélet* nyújt megoldást. A kvantummechanikai tárgyalás – a külön feltételezések nélküli, korrekt matematikai tárgyalás mellett – a korai modellek sok eredményét visszaadja, viszont sok eredmény módosítását tette szükségessé.

#### 8.4 Ellenőrző kérdések

- Ismertesse a Bohr-féle posztulátumokat!
- Hogyan támasztja alá a Bohr-féle modellt a Frank-Hertz-féle elektronütközési kísérlet?
- Milyen összefüggésekre épül a hidrogénatom Bohr-féle modellje?
- Hogyan függ az  $n$  (fő)kvantumszámtól a Bohr-féle modellből származtatható elektron pálya sugár, sebesség és teljes energia?
- Mi a Rydberg-állandó?
- Milyen sorozatok alkotják a hidrogén emissziós színeképét?
- Mi a korrespondencia elv?
- Ismertesse a Bohr-Sommerfeld-modell alapvetéseit, az  $l$  mellékkvantumszám jelentését!
- Mi a finomszerkezeti állandó?

#### 8.5 Feladatok

- Két – egymástól 8,44 eV-nyi „távolságra” lévő – energianívóval milyen hullámhosszúságú elektromágneses sugárzás van rezonanciában?

- 
- A Franck-Hertz-kísérlet anódáramának modulációs mélysége a kísérlet mely paraméterével hozható kapcsolatba?
  - Higanyal végzett Franck-Hertz (alap) kísérlet esetén 9,8 V-nál másodszor is megfigyelhető az anódáram visszaesése. Mit feltételez az emissziót mutató Hg atomok térbeli elhelyezkedéséről?
  - Adja meg a hidrogén színeképvonalak alkotta sorozatok határát (a határhullámszám, frekvencia és hullámhossz adatokkal)!

## 9. Egyszerű kvantummechanikai rendszerek

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a kvantummechanika kialakulásának mérföldköveit, a Schrödinger egyenlethez, a hullámmechanika alapegyenletéhez vezető megfontolások alapvetéseit,
- képes értelmezni a legfontosabb mikrorendszerekre kapott eredményeket,
- elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja a mikrorendszerek viselkedésének valószínűségi jellegét a mikrorendszereket jellemző fizikai mennyiségek kvantáltságát.

Jelen fejezetben ismertetjük az atomi rendszerekre vonatkozó Bohr elmélet hiányosságait, a kvantummechanika kialakulásához vezető utat. A fejezetben helyet kapnak a hullámmechanika alapegyenletéhez, a Schrödinger egyenlethez vezető megfontolások, továbbá a Schrödinger egyenletnek a legfontosabb mikrorendszerekre vonatkozó megoldásai.

A klasszikus fizikai képpel ellentétben a mikrorendszerek viselkedését valószínűségi törvények írják le, a rendszerekre jellemző fizikai mennyiségek általában kvantáltak.

### 9.1 A kvantummechanika kialakulása

A Bohr- és a Bohr-Sommerfeld-elmélet a stacionárius pályákra ill. az azok közti átmenetekre kimondott posztulátumok alapján – a finomszerkezetet kivéve – sikeresen magyarázta a hidrogén- és hidrogénszerű atomok vonalas színeképét. Később felismerték, hogy az elektronnak van saját impulzusmomentuma, az elektronspin. Ennek alapján egy úgynevezett vektormodell segítségével értelmezték az atom-, röntgen- és molekulaszíneképeket. A Pauli elv kimondta, hogy két elektron nem lehet ugyanabban a kvantumállapotban. Mindezek együtt a periódusrendszer konzisztens magyarázatát adták.

Az akkoriban igen értékes eredmények mellett azonban kitűntek az elmélet hiányosságai is. A Bohr-modell már a két elektront tartalmazó héliumatom esetén sem adott kielégítő eredményt, segítségével nem magyarázhatók a színeképvonalak intenzitásában megfigyelhető különbségek, sem az emittált sugárzás polarizációs viszonyai. Az elmélet feltételezése szerint a hidrogén atommagot körülvevő elektronpályák egy síkban vannak, míg a kísérletek szerint az alapállapotú atom gömbszimmetrikus. A kvantumfeltételek tulajdonképpen mélyebb indoklás nélkül választanak ki a klasszikus mechanika szabályai szerint megengedett pályák közül néhányat.

A Bohr-Sommerfeld-modell hiányosságait kiküszöbölendő, a részecske-hullám kettőséget is figyelembe véve született meg *Werner Heisenberg (1901-1976)* és *Erwin Schrödinger (1887-1961)* munkássága során a *mátrix-* és a *hullámmechanika (1925)*. E két egymással egyenértékű elméletből született a *kvantummechanika*, mely a klasszikus mechanikához hasonlóan egy zárt, egységes, ellentmondásmentes elmélet, mely az atomi rendszerek leírását teszi lehetővé.

A kvantummechanika komoly matematikai apparátust igénylő tudományterület, a következőkben csak egyszerűbb példákon keresztül szemléltetjük az eredményeit.

## 9.2 A Schrödinger-egyenlet

Az eddigi atomfizikai ismereteinkből alapján is látható, hogy a klasszikus mechanika törvényei nem alkalmazhatók a mikrorészecskék tulajdonságainak, viselkedésének leírására. *Schrödinger* a *de Broglie* anyaghullámok alapján feltételezte, hogy a mikrorészecskék esetén a hozzájuk rendelhető hullámokat kell figyelembe venni. Egy hullám, mint hely- és időkoordinátáktól függő  $\Psi(x, y, z, t)$  mennyiség terjedését a

$$\Delta\Psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi \quad (9-1)$$

*hullámeqyenlet* írja le, ahol a  $\varphi$  skalárfüggvényre ható

$$\Delta\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = \text{div grad } \varphi \quad (9-2)$$

az ún. *Laplace-operátor* (derékszögű koordinátarendszerben)  $u$  pedig a hullám fázissebessége. Periodikus,  $\omega$  körfrekvenciájú hullámot feltételezve, a hullám általánosan a

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z, t) e^{-i\omega t} \quad (9-3)$$

alakban írható fel, amiből az ún. *amplitúdóegyenlet*

$$\Delta\psi + \frac{\omega^2}{u^2} \psi = 0 \quad (9-4)$$

vagy

$$\Delta\psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0. \quad (9-5)$$

Tekintsünk egy  $m_0$  tömegű,  $v$  sebességű elektront az atommag terében, amelynek potenciális energiája  $U(x, y, z)$  állandó, teljes energiája pedig (nemrelativisztikusan)

$$E = U + \frac{1}{2} m_0 v^2. \quad (9-6)$$

Ekkor a részecskéhez rendelhető hullámhossz (de Broglie)

$$\lambda = \frac{h}{mv_0} = \frac{h}{\sqrt{2m_0(E-U)}}. \quad (9-7)$$

Az előzőek alapján az *időfüggetlen* Schrödinger-egyenlet:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} (E - U) \psi = 0. \quad (9-8)$$

Ez a hullámmechanika alapegyenlete, amely ennél egzaktabb módon, több, akár egymással kölcsönható részecskére is levezethető.

A fenti típusú differenciálegyenletek megoldásai közül csak olyanok jöhetnek szóba, melyek kielégítenek bizonyos peremfeltételeket (pl. a klasszikus mechanikában tárgyalt rezgő membrán esetén a rögzített perem nyugalomban marad), elég sokszor differenciálhatók,

négyzetesen integrálhatók (ld. alább), stb. Ilyen megoldások csak a fenti egyenletben szereplő  $E$  bizonyos értékeire léteznek. A Schrödinger-egyenlet megoldásakor ezeknek az  $E$  értékek (*sajátértékek*), ill. a hozzájuk tartozó *sajátfüggvények* megtalálására törekszünk. A hullámmechanika szerint egy atomi rendszernek a stacionárius állapotokban lehetséges energiái a Schrödinger-egyenlet sajátértékei.

A  $\psi$  amplitúdófüggvény négyzete az, ami fizikai mennyiséget jelent, hasonlóan ahhoz az esethez, hogy a hullám amplitúdójának négyzete (intenzitás) az, ami fontos számunkra. Mivel általában  $\psi$  komplex mennyiség, négyzete alatt a

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi \quad (9-9)$$

mennyiséget értjük.

A Schrödinger-egyenlet, mint homogén differenciálegyenlet a megoldásaiban egy konstans szorzót tartalmaz, amelyet mindig úgy választunk meg, hogy  $|\psi|^2$  egész térre (vagy a határfeltételek által megszabott térfogatra) vett integrálja  $1$  legyen, ilyen esetben a hullámfüggvényt *normálnak* nevezzük:

$$\iiint_V |\psi|^2 dx dy dz = \iiint_V |\psi|^2 dV = 1 \quad (9-10)$$

A hullámfüggvény abszolútérték-négyzetének, pontosabban a

$$|\psi|^2 dV \quad (9-11)$$

mennyiségnek az a jelentése, hogy mekkora valószínűséggel tartózkodik a részecske egy  $P(x,y,z)$  koordinátával jellemzett  $P$  pont kis  $dV$  környezetében. Ennek az egész térre kiterjesztett integrálja valóban  $1$ , mert (jó esetben) a részecske valahol jelen van a térben. Ilyen értelemben  $|\psi|^2$  egy valószínűségi sűrűségfüggvény.

### 9.3 Egyszerű rendszerek Schrödinger-egyenlete

a) *Szabad részecske; erőmentes eset*

Tekintsünk egy  $U = 0$  állandó potenciális energiával rendelkező (erőmentes tér), egy dimenzióban mozgó  $m_0$  tömegű részecskét. Ekkor a részecskét leíró Schrödinger-egyenlet:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m_0}{h^2} E\psi = 0. \quad (9-12)$$

Ez, bevezetve a  $\hbar = h / 2\pi$  és az

$$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{m_0v}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \quad (9-13)$$

mennyiségeket a

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\psi = 0, \quad (9-14)$$

azaz

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0 \quad (9-15)$$



alakba írható. Ennek a jól ismert differenciálegyenletnek az általános megoldása:

$$\psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0E}\cdot x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0E}\cdot x}. \quad (9-16)$$

A reguláris megoldások létezésének feltétele, hogy  $E > 0$ , ilyenkor minden megoldás kétszeresen elfajult, azaz egy energiaértékhez két megoldás tartozik. Az  $\alpha$  paraméter és az impulzus kapcsolatát felhasználva ezt így is írhatjuk:

$$\psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}p\cdot x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}p\cdot x} \quad (9-17)$$

b) *Lineáris harmonikus oszcillátor*

A klasszikus lineáris harmonikus oszcillátor egy  $F_x = -D(x - x_0)$  erő hatására egy dimenzióban (itt az  $x$  tengely) mozgó tömegpont. A testre ható erő egyenesen arányos a tömegpont  $x_0$  egyensúlyi helyzetéből való kitérésével és azzal ellentétes irányú. A tömegpont ilyen erő hatására

$$\omega = \sqrt{\frac{D}{m}} \quad (9-18)$$

körfrekvenciájú harmonikus rezgést végez. A rendszer potenciális energiája

$$U = \frac{1}{2}Dx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2. \quad (9-19)$$

Ezzel a Schrödinger egyenlet:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi = 0, \quad (9-20)$$

alakot ölti, ahol  $E$  a teljes energia. Bevezetve az

$$\alpha = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}; \quad \beta = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (9-21)$$

változókat, a fenti differenciálegyenlet a következő alakra hozható:

$$\frac{d^2\psi}{d\alpha^2} + (\beta - \alpha^2)\psi = 0. \quad (9-22)$$

A megoldásokat keressük

$$\psi(\alpha) = e^{-\frac{\alpha^2}{2}}H(\alpha) \quad (9-23)$$

alakban. Ezt behelyettesítve a fenti differenciálegyenletbe, a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$\frac{d^2H(\alpha)}{d\alpha^2} - 2\alpha\frac{dH(\alpha)}{d\alpha} + (\beta - 1)H(\alpha) = 0. \quad (9-24)$$

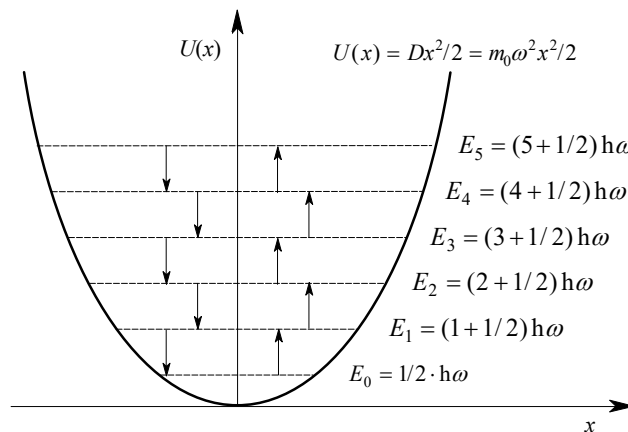
Mivel a részecske nem távolodhat végtelen távolságra az egyensúlyi helyzetétől,  $\psi(x)$  ill.  $\psi(\alpha)$  a végtelenben el kell tűnjön, amiből levezethető, hogy a  $H(\alpha)$  függvény polinom. A differenciálegyenlet megoldásai az *Hermite-polinomok*, melyek előállítására és további tulajdonságaikra a speciális függvényeket tartalmazó táblázatokból tájékozódhatunk. Az egyenlet megoldása létezésének feltétele, hogy

$$\beta = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (9-25)$$

amiből az oszcillátor energiája csak diszkrét értékeket vehet fel:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (9-26)$$

A 9.1 ábra az oszcillátor lehetséges energiaértékeit mutatja. Látható, hogy a szomszédos energianívók közti távolság mindig ugyanakkora:  $\Delta E = \hbar\omega$ , fordítottan arányos a részecske tömegének négyzetgyökével. A tömeg növekedésével a kvantált energiaszintek olyan sűrűn helyezkednek el, hogy a klasszikus értelemben minden rezgési energia megengedett.

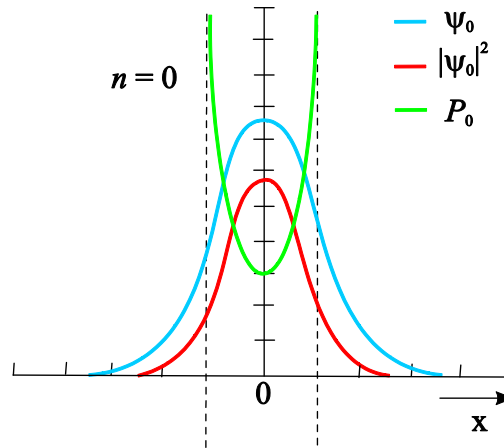


9.1 ábra A lineáris harmonikus oszcillátor kvantált energiaszintjei

Látható, hogy az oszcillátornak az  $n = 0$ -nak megfelelő állapotban is van zérustól különböző energiája, ez az ún. *zérusponti energia*. További vizsgálatok arra az eredményre jutottak, hogy az oszcillátor energiaszintjei közt csak két szomszédos nívó közti átmenet lehetséges (*kiválasztási szabály*):

$$\Delta n = \pm 1. \quad (9-27)$$

A 9.2 ábrán látható a harmonikus oszcillátor alapállapotához tartozó hullámfüggvény, annak négyzete, illetve zöld vonallal a klasszikus mechanika alapján számolt valószínűséget ábrázoltuk. Míg a kvantummechanika szerint az oszcillátor legvalószínűbb helyzete az alapállapotban zérus, a klasszikus mechanika szerint ez pont a fordulópontokban van, ahol a rezgés a leglassabb.

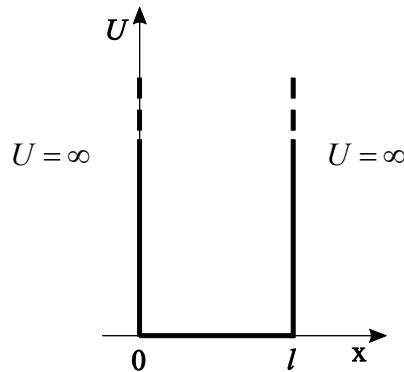


**9.2 ábra** A harmonikus oszcillátor hullámfüggvénye, a hullámfüggvény abszolútérték-négyzete és a klasszikus tartózkodási valószínűség alapállapotban

A korrespondencia-elv alapján minél magasabb gerjesztett állapotban van az oszcillátor, annál jobban hasonlít a klasszikus esetre a tartózkodási valószínűsége egy adott intervallumban.

c) *Részecske végtelen potenciálvölgyben*

Vizsgáljunk egy egydimenziós derékszögű potenciálban mozgó részecskét. Válasszuk a potenciál értékét a  $0 \leq x \leq l$  intervallumon zérusnak, egyébként legyen a potenciál végtelen (9.3 ábra).



**9.3 ábra** A végtelenül mély potenciálvölgy

Az  $x = 0$  és  $x = l$ -nél levő potenciálgátak a részecske számára áthatolhatatlanok, ezért a falon kívül a részecske megtalálási valószínűsége 0. A hullámfüggvény folytonosságából adódóan ezért  $\psi(0) = \psi(l) = 0$ . Ezek a megoldásokra kirótt peremfeltételek.

A  $0 \leq x \leq l$  tartományon a Schrödinger-egyenlet a következő alakot ölti:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0, \quad (9-28)$$

amely az

$$\omega^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (9-29)$$

bevezetésével a harmonikus rezgőmozgás differenciálegyenletét adja:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \omega^2\psi = 0. \quad (9-30)$$

Az általános megoldás:

$$\psi(x) = A \sin(\omega x + \alpha), \quad (9-31)$$

ahol (a peremfeltételek miatt)  $\alpha = 0$  és

$$\omega = \pm n \frac{\pi}{l}. \quad (9-32)$$

Ezzel a megfelelő energia-sajátértékek:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \cdot n^2; \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (9-33)$$

A szomszédos energianívók közti távolság megközelítőleg  $n$ -nel arányos, de a kvantáltság csak atomi méretekben szembeötlő, például egy makroszkopikus méretű tartályba zárt molekula esetén a szomszédos nívók közti távolság olyan kicsi, hogy az energiaspektrum folytonosnak tekinthető.

Az egyes energia-sajátértékekhez tartozó hullámfüggvényeket is könnyen meghatározhatjuk. A fentiek alapján az  $n$ -edik gerjesztett állapotban a hullámfüggvény:

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x. \quad (9-34)$$

A hullámfüggvény normálásánál felhasználjuk, hogy a részecske megtalálási valószínűsége a  $0 \leq x \leq l$  tartományon 1, azaz biztosan ott tartózkodik. Ekkor

$$\int_0^l \psi^* \psi dx = A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = 1, \quad (9-35)$$

amiből

$$A = \sqrt{\frac{2}{l}}, \quad (9-36)$$

azaz

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (9-37)$$

#### d) Az alagút-effektus

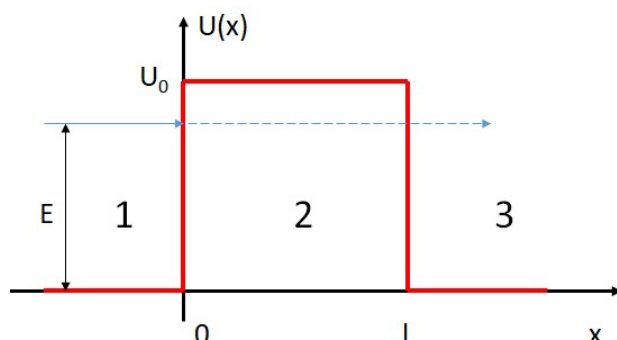
A klasszikus felfogás szerint, ha egy részecske a tér egy olyan tartományához érkezik, ahol a potenciál nagyobb, mint a részecske teljes energiája, akkor nem tud behatolni a tér azon tartományába és a potenciálfalról „visszaverődik”. A kvantummechanikai leírás szerint azonban ebben az esetben is van nullától különböző valószínűsége, hogy a részecske megtalálható a véges szélességű potenciálgát másik oldalán. A jelenség többek közt pl. elektronemisszióknál és a radioaktív bomlásnál is szerepet játszik.

A jelenség vizsgálatánál a 9.4 ábrán látható potenciált alkalmazzuk. Tekintsünk egy, a  $+x$  irányba haladó,  $E < U_0$  energiájú részecskét. Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet az 1-es és 3-as tartományon, ahol a potenciál zérus:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0, \quad (9-38)$$

a 2-es tartományon pedig

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0. \quad (9-39)$$



9.4 ábra A potenciálgát az alagút-effektus vizsgálatához

A differenciálegyenletek megoldását a szokásos

$$\psi = e^{\lambda x} \quad (9-40)$$

alakban keressük. Ezt visszahelyettesítve az 1-es és 3-as tartományra vonatkozó egyenletbe, a karakterisztikus egyenlet:

$$\lambda^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0, \quad (9-41)$$

tehát ezeken a tartományokon a megoldások:

$$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}, \quad (9-42)$$

$$\psi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x}, \quad (9-43)$$

ahol

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (9-44)$$

és  $A_1, B_1, A_3, B_3$  megfelelő konstansok.

A 2-es tartományon a karakterisztikus egyenlet megoldása

$$\lambda = \pm\beta, \quad (9-45)$$

ahol

$$\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}, \quad (9-46)$$

az általános megoldás pedig ezzel:

$$\psi_2 = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \quad (9-47)$$

ahol  $A_2$  és  $B_2$  szintén konstansok.

Mivel a 3-as tartományban csak a jobbra haladó hullám van jelen, ezért  $B_3 = 0$ . A többi együtthatót abból a feltételből határozhatjuk meg, hogy mind  $\psi$ , mind  $\psi$  deriváltja folytonos a tartományok határain.

A potenciálfal *transzmissziós együtthatóját* megkapjuk, ha a falon átment hullám amplitúdójának négyzetét elosztjuk a falra beérkező hullám amplitúdójának négyzetével:

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (9-48)$$

A hullámfüggvényekben szereplő konstansok meghatározása az egyenletrendszer megoldásával megkapható és végeredményként megkapjuk a transzmissziót:

$$T \approx e^{-2l\beta} = e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} l}. \quad (9-49)$$

Tehát a potenciálfalon való áthaladás valószínűsége függ – a potenciálfal nagysága mellett – a fal  $l$  szélességétől és a részecske energiájától is. Atom méretű potenciálfal esetén ez a transzmissziós együttható elektronra pár százalék, de pl. egy  $10 \text{ \AA}$  szélességű potenciálgát esetén már csak  $10^{-11}$  nagyságrendű.

#### 9.4 A hidrogénatom hullámmechanikai modellje

##### a) Részecske centrális erőterben

Centrális erőterben a részecske potenciális energiája csak a centrumtól való távolságtól függ, ezért célszerű a Schrödinger-egyenletet gömbi polárkoordinátákban felírni, ami az alábbi alakot ölti (a Laplace-operátor gömbkoordinátás alakját felhasználva):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar} (E - U(r)) \psi = 0. \quad (9-50)$$

A megoldáshoz a hullámfüggvényt szorzat alakban vesszük fel:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y(\vartheta, \varphi). \quad (9-51)$$

Megfelelő átalakítás után ez az egyenlet a következő alakra hozható:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) r^2 = -\frac{1}{Y} \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] \quad (9-52)$$

Az egyenlet bal oldala csak  $r$ -től, a jobb oldala pedig csak  $\vartheta$ -tól és  $\varphi$ -tól függ, ami csak úgy lehetséges a változók tetszőleges értékeire, hogy mindkét oldal egy állandóval egyenlő, jelöljük ezt  $\lambda$ -val. Ekkor két különálló egyenletet kapunk:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - U(r) - \frac{\lambda}{r^2} \right) \right] R = 0, \quad (9-53)$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0. \quad (9-54)$$

Az első egyenlet az ún. *radiális egyenlet*, egy adott probléma megoldásához szükségünk van a potenciálfüggvény ismeretére is. Mivel a második,  $Y(\vartheta, \varphi)$ -re vonatkozó egyenlet nem tartalmazza a potenciált, ezért megoldása bármilyen potenciálfüggvény esetén ugyanaz. Itt nem részletezett levezetések után azt kapjuk, hogy a szögfüggést leíró függvény

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = A_{lm} P_l(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (9-55)$$

alakú, ahol az  $m$ ,  $l$  egészekre és  $\lambda$ -ra fennállnak a következő megszorítások:

$$\begin{aligned} \lambda &= l(l+1) \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \\ |m| &\leq l \end{aligned} \quad (9-56)$$

A  $P_l$  függvények ( $m = 0$  esetén) a *Legendre-polinomok* vagy gömbfüggvények, melyekre

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad (9-57)$$

$m \neq 0$  esetén pedig az ún. *asszociált Legendre-polinomok*:

$$P_{lm}(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} P_l(x)}{dx^{|m|}}. \quad (9-58)$$

Az  $A_{lm}$  együtthatót pedig abból a feltételből határozhatjuk meg, hogy az  $Y(\vartheta, \varphi)$  függvények az egységgömb felületén egységre normáltak legyenek:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{lm}|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 1. \quad (9-59)$$

$\lambda$  (9-56)-beli kifejezésével a radiális egyenlet a következő alakba is írható:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) R = 0. \quad (9-60)$$

Megmutatható, hogy az  $Y(\vartheta, \varphi)$  függvények sajátfüggvényei a kvantummechanikai impulzusnyomaték-operátor négyzetének és az impulzusnyomaték egy tetszőleges tengelyre (általában a  $z$ -t választjuk) vett vetülete operátorának a következő sajátértékekkel:

$$\begin{aligned} N^2 &= l(l+1) \hbar^2 \\ N_z &= m \hbar \end{aligned}, \quad (9-61)$$

így az  $l$  kvantumszám az impulzusnyomaték abszolút értékét adja, ez azonos a Bohr-Sommerfeld elmélet mellékkvantumszámával.

b) *A hidrogénatom*

Vizsgáljunk most egy hidrogén atom (általánosabban egy hidrogénszerű ion)  $Ze$  töltésű, nyugalomban levő atommagjától  $r$  távolságra levő  $-e$  töltésű,  $m_0$  tömegű elektront. A jól ismert potenciális energiával (ld. elektromágnesség v. Bohr-modell) az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (9-62)$$

A radiális, ill. a szögfüggést meghatározó egyenletek ekkor:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R = 0, \quad (9-63)$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0. \quad (9-64)$$

A (9-64) egyenletnek csak akkor van megoldása, ha

$$\lambda = l(l+1); \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (9-65)$$

a gömbfüggvények pedig a következő alakba írhatók:

$$Y_{lm} = T(\vartheta) e^{im\varphi}, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l). \quad (9-66)$$

Egy  $l$  értékhez tehát összesen  $2l+1$  lineárisan független megoldás tartozik. A radiális egyenletet átírva

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right) \right] R = 0 \quad (9-67)$$

láthatjuk, hogy ez egy olyan egydimenziós mozgásnak felel meg, amelyre a potenciál:

$$U' = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}. \quad (9-68)$$

Ha  $r$  elegendően nagy, akkor  $U'$ -ben az első tag dominál, tehát  $U' < 0$  és  $r \rightarrow \infty$  esetén a potenciál nullához tart. Ekkor egy potenciálvölgy alakul ki, ahol a részecske oszcilláló mozgást végez. Ha  $E > 0$ , akkor a potenciál csak egy oldalról korlátozza a részecske mozgását, az energiaspektrum folytonos lesz.

Az  $E < 0$  tartományban csak a (radiális egyenletből levezethető) következő energiasajátértékek lehetségesek:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{Z^2}{(n_r + l + 1)^2}, \quad (9-69)$$



ahol  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  a radiális kvantumszám. Az  $n_r + l + 1 = n$  jelöléssel ezek az energiák megegyeznek a Bohr-elméletben kapott értékekkel:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}. \quad (9-70)$$

Az energia csak az  $n$  főkvantumszámtól függ. Adott  $n$  esetén  $l$  lehetséges értékei:  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ . Adott  $l$  esetén az  $m$  mágneses kvantumszám  $2l+1$  értéket vehet fel. Azonos  $n$  főkvantumszámhoz tartozó, különböző  $l$  és  $m$  értékekre az energia ugyanaz, az állapotok elfajultak. Tehát egy adott  $n$  értékhez

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (9-71)$$

lineárisan független sajátfüggvény tartozik, azaz minden  $n$  főkvantumszámú állapot  $n^2$ -szeresen elfajult.

### c) Átmenetek az energiaszintek közt

Az atomi energiaszintek közti átmenetek – ütközésmentes esetben – fényelnyelés hatására (abszorpció), vagy sugárzás kibocsátásával (emisszió) történnek. A kvantummechanika szerint egy átmenetkor az  $l$  kvantumszám csak 1-gyel változhat:

$$\Delta l = \pm 1. \quad (9-72)$$

Ez annak a következménye, hogy egy fotonnak saját spinje (impulzusnyomatéka) van, aminek körülbelüli értéke  $\hbar$ , és ezt abszorpció esetén átadja az atomnak, emisszió esetén pedig ennyivel csökken az atom impulzusnyomatéka.

A fenti kiválasztási szabály alapján a Lyman-sorozatot az  $np \rightarrow 1s$  ( $n=2, 3, \dots$ ) átmenetekkel állíthatjuk elő, a Balmer-sorozat megfelel a  $ns \rightarrow 2p$  ( $n=3, 4, \dots$ ) és az  $nd \rightarrow 2p$  ( $n=3, 4, \dots$ ) átmeneteket kísérő emisszióknak.

Fényelnyelés esetén az atom csak azokat a fotonokat absorbeálja, amelyek energiája megfelel két atomi energianívó különbségének, és az energiaszintek közti átmenetet a kiválasztási szabályok is megengedik. Megjegyezzük, hogy a kiválasztási szabályokkal ellenkező, ún. „tiltott” átmenetek igen kis valószínűséggel, de létrejöhetnek.

## 9.5 A Heisenberg-féle határozatlansági relációk, hullámcsoportok

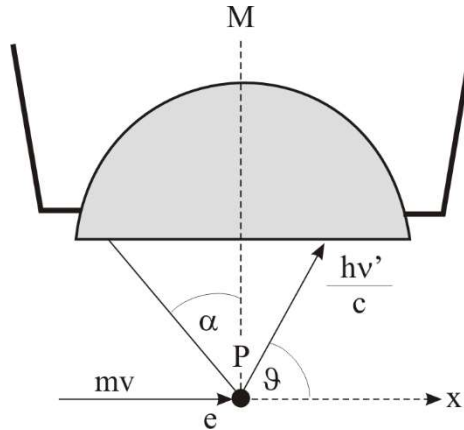
A *de Broglie* hullámok és a Schrödinger-féle hullámfüggvény valószínűségi jelentése és általában a kvantummechanika statisztikai jellege szorosan összefügg azzal a felismeréssel (Heisenberg, 127), hogy atomi rendszerek esetében bizonyos fizikai mennyiségeknek egyidejűleg tetszőleges pontossággal való meghatározása elvileg – azaz teljesen eltekintve a mérőeszközök tökéletlenségétől – nem lehetséges.

Ennek illusztrálására tekintsük konkrét példaként az alábbi, *Heisenberg*-féle „gondolatkísérletet”. Tegyük fel, hogy az  $x$  tengely mentén adott feszültséggel felgyorsított, tehát ismert  $p_x = mv_x$  impulzusú elektronokból álló nyaláb halad, amelynek egyik elektronja bizonyos időpillanatban a  $P$  pontban van (9.5 ábra). Annak érdekében, hogy az elektron helyét az  $M$  mikroszkóp segítségével meghatározhassuk az elektront az  $x$  irányú félnyalázból legalább

egy fotonnak el kell találnia, és az „ütközés” után M-be jutnia. A fényelhajlás miatt a mikroszkóp felbontási határa, vagyis a műszerrel még éppen különállónak felismerhető két pont távolsága

$$d \approx \frac{\lambda}{\sin \alpha}, \quad (9-73)$$

ahol  $\alpha$  az objektív fél nyílásszöge.



9.5 ábra Heisenberg-féle „gondolatkísérlet” illusztrálása

Esetünkben nyilván a  $d \equiv \Delta x$  távolság a helymeghatározás bizonytalansága:

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin \alpha}, \quad (9-74)$$

amely elvileg a  $\lambda$  csökkentésével – gondolatban akár „ $\gamma$ -sugár mikroszkópot” is alkalmazhatunk – tetszőlegesen kicsinnyé tehető. Ami az elektron  $p_x = mv_x$  impulzusát illeti, figyelembe kell vennünk, hogy  $p_x$  a fotonnal való „ütközés”, azaz a Compton-effektus folytán megváltozik. Az impulzusmeghatározás bizonytalansága:

$$\Delta p_x \approx \frac{h}{\lambda} \sin \alpha. \quad (9-75)$$

A (9-74)-ből és a (9-75)-ből következik az egyik Heisenberg-féle határozatlansági reláció:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h, \quad (9-76)$$

a helykoordináta  $\Delta x$  és az impulzuskomponens  $\Delta p_x$  határozatlanságának szorzata nagyságrendben a Planck-állandóval egyenlő. Ez azt jelenti, hogy minél pontosabban meghatározott a részecske  $x$  koordinátája (minél kisebb a  $\Delta x$ ), annál kevésbé meghatározott a részecske  $p_x$  impulzuskomponense (annál nagyobb a  $\Delta p_x$ ) és megfordítva.

A (9-76) összefüggés sok más gondolatkísérlettel és egzotabb módon is megalapozható, továbbá általánosítható minden „kanonikusan konjugált” változópárra. Így például egy stacionárius állapotú rendszer energiájának  $\Delta E$  határozatlansága és az állapotban való tartózkodás  $\Delta t$  időtartama közötti reláció:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h. \quad (9-77)$$

A határozatlansági relációknak makroszkópikus testek vagy makrorészecskék esetében gyakorlatilag nincs szerepük, mert ha pl. egy  $m = 1g$  tömegű test helyét aránylag igen pontosan  $\Delta x \approx 10^{-5} cm$  hibával ismerjük, akkor a sebesség a (9-76)-ból adódó  $\Delta v_x \approx 7 \cdot 10^{-23} cm/s$  határozatlansága sok nagyságrenddel kisebb az elérhető mérési pontosságnál. A mikrorészecskékre azonban a relációk erős korlátozást jelentenek: ha pl. a H-atomban az  $m \approx 10^{-27} g$  tömegű elektron helyét a viszonylag nem is nagy pontossággal, az atom átmérőjénél kb. 10-szer kisebb  $\Delta x \approx 10^{-9} \text{Å}$  hibával szeretnénk megállapítani, a sebesség határozatlansága a (9-76) szerint a megengedhetetlenül nagy  $\Delta v_x \approx 7 \cdot 10^9 cm/s$  érték lenne. Ebből a példából látható, hogy a (9-76) reláció alapján az atomban a Bohr-féle elektronpályák fogalma értelmet veszti.

### 9.6 Ellenőrző kérdések

- Mik a Schrödinger egyenlethez vezető megfontolások alapvetései?
- Mik a Schrödinger egyenlet sajátértékei?  
MI a sajátfüggvény és a fizikai jelentése?
- Jellemezze a Schrödinger egyenlet megoldását
  - a) erőmentes térben lévő részecskére,
  - b) kvadratikus potenciáltérben lévő részecskére,
  - c) derékszögű, végtelen potenciáltérben lévő részecskére,
  - d) ponttöltés elektrosztatikus térben lévő részecskére.
- Írja le az alagúteffektus lényegét!

### 9.7 Feladatok

- Számítsa ki az alsó két energianívó közti energia-különbséget dobozba zárt részecskére, ha
 
$$m_1 = 1 \text{ kg}, l_1 = 10 \text{ cm}$$

$$m_2 = m_{\text{elektron}}, l_2 = 10 \text{ cm}$$

$$m_3 = m_{\text{elektron}}, l_3 = 0,1 \text{ m}$$
- Számítsa ki egy  $m$  tömegű  $E$  energiájú részecske áthaladásának valószínűségét egy  $U_0$  magasságú és  $l$  szélességű potenciál falon az alábbi esetekre:
 
$$m_1 = 0,1 \text{ kg}, E_1 = 1 \text{ J}, U_{01} = 2 \text{ J}, l_1 = 10 \text{ cm}$$

$$m_2 = m_{\text{elektron}}, E_2 = 4 \text{ eV}, U_{02} = 50 \text{ eV}, l_2 = 1 \text{ mm}$$

$$m_3 = m_{\text{elektron}}, E_3 = 4 \text{ eV}, U_{03} = 5 \text{ eV}, l_3 = 0,1 \text{ mm}$$

## 10. Atomi színeképek és értelmezésük

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri az alkáli fémek termrendszerének, illetve spektrumának jellegzeteségeit,
- ismeri az elektron spinjének tulajdonságait,
- képes értelmezni az alkáli atomok spektrumának a hidrogén spektrumához való hasonlóságát, az eltérések, illetve a dublett szerkezet okát,
- elfogadja és vizsgálataiban során szem előtt tartja a mikrorendszerekre jellemző vektormennyiségek nagyság- és iránykvantálását.

Jelen fejezetben ismertetjük az alkáli fémek spektrumának jellegzetességeit. A hidrogén spektrumával történő összehasonlítás alapján az elektronburok felépítésére következtethetünk. A dublett szerkezetre való hivatkozással bevezetjük az elektron spin, illetve az iránykvantálást, melyek kísérleti bizonyítékait is tárgyaljuk.

### 10.1 Az alkáli fémek spektruma

A periódusos rendszer I.a oszlopának elemei – a hidrogént (H) kivéve – alkotják az alkáli fémek halmazát, úgymint lítium (Li), nátrium (Na), kálium (K), rubídium (Rb), cézium (C), francium (Fr).

Legfontosabb közös tulajdonságuk, hogy a külső elektronhéjon egy elektron tartózkodik. Ezt az elektront az alkáli fémek könnyedén leadják, azaz a zárt elektronhéjjal rendelkező ion aránylag kis energia-befektetéssel jön létre. Könnyen oldódnak higanyban amalgámokat képezve. Ismert nem fémes oldószerük az ammónia. Viasz-szerű lágy anyagok. Fajsúlyuk kicsi, olvadás- és forráspontjuk alacsony.

#### a) Kísérleti eredmények

Az alkáli fémek spektruma – egyértelműen – a hidrogén-atom spektrumára hasonlít, annak sorozatait követi. Hasonlóan a hidrogénhez az ionizációs határ felé közeledve a spektrumvonalak is egyre közelebb kerülnek egymáshoz, amihez folytonos határkontinuum csatlakozik. A spektrumvonalak intenzitása is a hidrogénéhez hasonlóan csökken.

Rydberg kísérletei alapján egyértelműen megállapítható, hogy az alkáli fémek atomtermjei az

$$\frac{R}{(n'+a)^2} \quad (10-1)$$

általános alakot követik, ahol  $R$  a Rydberg állandó,  $n'$  pozitív egész szám, az  $a$  pedig – egy-egy termsorozaton belül állandó – korrekciós tag. ( $R = R_H$ )

$$R_H = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{4\pi h^3 c} = 109737,318 \pm 0,012 \text{ cm}^{-1}. \quad (10-2)$$

Az emissziós spektrumokban négy vonalsorozat figyelhető meg:

- *fő* sorozat,
- *II. melléksorozat*,
- *I. melléksorozat*,
- *Bergman sorozat*.

Ezeket a sorozatokat angol neveik után rendre *p* (*principal*), *s* (*sharp*), *d* (*diffuse*), *f* (*fundamental*) sorozatoknak nevezzük.

A fenti négy sorozat vonalainak  $\bar{\nu}$  hullámszámait – ahogy azt Kayser, Runge, Rydberg és Ritz megállapították – a következő termkülönbségekkel állíthatók elő:

- *fő* sorozat (vagy *p*-sorozat)

$$\bar{\nu} = \frac{R}{(1+s)^2} - \frac{R}{(m+p)^2}, \quad m = 2, 3, \dots, \quad \text{röviden: } 1S - mP; \quad (10-3)$$

- *II. melléksorozat* (vagy *s* sorozat)

$$\bar{\nu} = \frac{R}{(2+p)^2} - \frac{R}{(m+s)^2}, \quad m = 2, 3, \dots, \quad \text{röviden: } 2P - mS; \quad (10-4)$$

- *I. melléksorozat* (vagy *d* sorozat)

$$\bar{\nu} = \frac{R}{(2+p)^2} - \frac{R}{(m+d)^2}, \quad m = 3, 4, \dots, \quad \text{röviden: } 2P - mD; \quad (10-5)$$

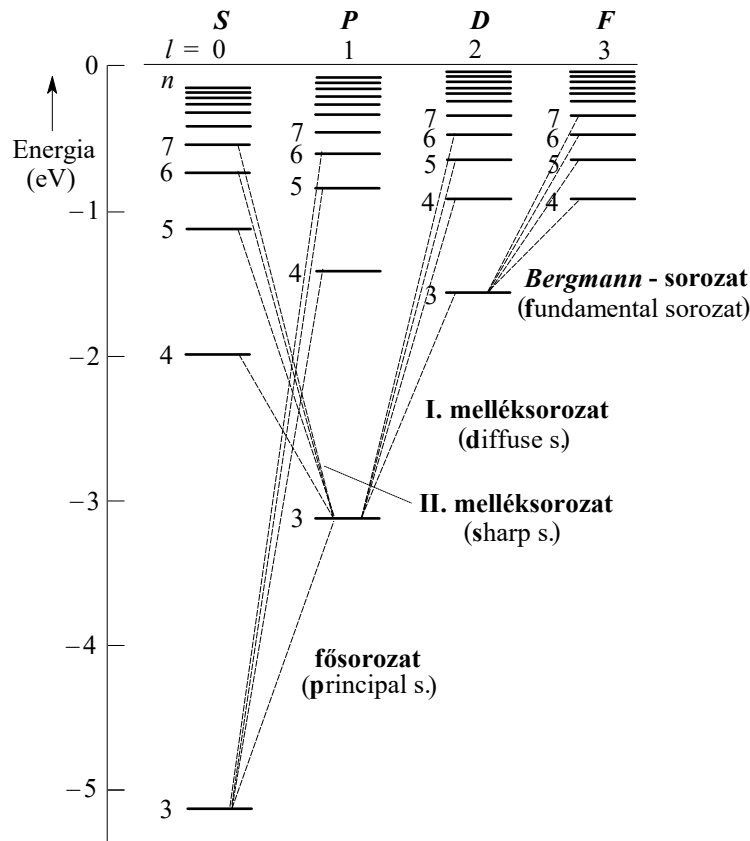
- *Bergmann-sorozat* (vagy *f* sorozat)

$$\bar{\nu} = \frac{R}{(3+d)^2} - \frac{R}{(m+f)^2}, \quad m = 4, 5, \dots, \quad \text{röviden: } 3D - mF; \quad (10-6)$$

Itt *R* a *Rydberg-állandó*, az 1-nél kisebb *s*, *p*, *d*, *f* számok pedig a különböző alkáli atomokra jellemző *Rydberg-korrektciók*; legnagyobb az *s*, legkisebb az *f* (például a Na-atomra  $s \approx 0,65$ ;  $p \approx 0,14$ ;  $d \approx -0,01$ ;  $f \approx 0$ ). Az *s*, *p*, *d*, *f* korrekciókat tartalmazó termeket rendre *S*, *P*, *D*, *F* termeknek nevezzük.

A 10-1. ábrán látható Na-atom termsémájából kitűnik, hogy átmenetek csak az egymással szomszédos – az *S*, *P*, *D*, *F* termeket reprezentáló – oszlopokban álló termek között lehetségesek. Ennek alapján a következő átmenetek nincsenek:

$$m'S - mS, \quad m'S - mD, \quad m'S - mF, \quad m'P - mP, \quad m'P - mF. \quad (10-7)$$

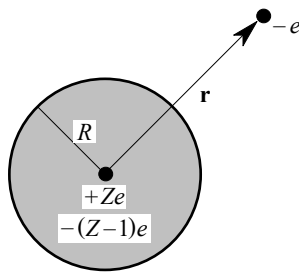


10.1. ábra A nátrium atom term diagramja

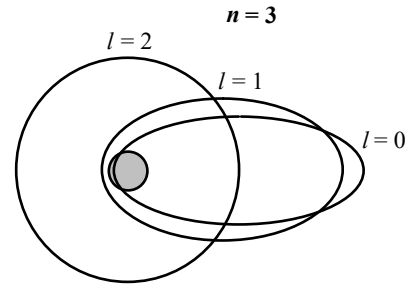
b) A spektrum modellszerű értelmezése

A (10-1) alkálitermek és az  $R/n^2$  hidrogéntermek hasonlatosságából arra következtethetünk, hogy az alkálistérpektrumok keletkezésében az atom  $Z$  számú elektronja (a Li 3, a Na 11, a K 19, ... elektronja) közül csak egynek van lényeges szerepe. Úgy képzelhetjük, hogy az elektronok egyike, a leglazábban kötött elektron a magtól átlagban nagyobb távolságban van a többinél, tehát ez a *legkülső* elektron (más néven *vegyérték- vagy valenciaelektron*) a magból és a többi  $(Z-1)$  elektronból álló „atommörzs” erőterében mozog. Az atommörzstől távolabb ez az erőter megközelítőleg *Coulomb*-szerű: csaknem olyan, mint egy pontszerű  $e$  töltésé, vagyis mint a hidrogénmagé, mert a  $Ze$  magtöltés hatását az atommörzs  $Z-1$  elektronja a megfelelő mértékben „leárnýékolja” (10-2. ábra). Ezért kiindulhatunk a H-atomra vonatkozó *Bohr-Sommerfeld*-féle elmélet ama eredményéből, hogy az  $n$  főkvantumszámhoz az  $l$  mellékkvantumszám  $0, 1, 2, \dots, n-1$  értékei szerint  $n$  számú ellipszispálya tartozik (a körpályát is beleértve). Pl.  $n=3$ -hoz a 10-3. ábrán vázolt három, azonos energiának megfelelő pálya tartozna, ha a sávozással jelzett atommörzset ponttöltéssel helyettesítenénk. Valójában azonban az atommörzs ezeket a pályákat és az energiát is módosítja, annál jobban, minél közelebb jut a vegyértékelektron az atommörzshöz, mert hiszen a törzs erőtere annál kevésbé *Coulomb*-szerű (részben azért is, mert az atommörzs a vegyértékelektron megosztó hatására polarizálódik, dipólussá válik); különösen nagy a befolyás az ábrán az  $l=0$ -ás „bemerülő pálya” esetében. Így szemléletesen érthetővé válik, hogy az energia az  $l$  mellékkvantumszámtól is erősen függ az  $n$  főkvantumszámon kívül. Az  $R/n^2$  alakú hidrogéntermektől való eltérések, vagyis a (10-1)-ben alkalmazandó  $a$ -korrekciók annál nagyobbak, minél közelebb jut a vegyértékelektron az atommörzshöz, azaz

minél kisebb az  $l$ . Mivel pedig az említett tapasztalatok szerint a korrekciók az  $s, p, d, f$  sorrendben csökkennek, az  $s, p, d, f$  korrekciókhoz rendre az  $l = 0, 1, 2, 3$  értékek rendelhetők.



10.2. ábra



10.3. ábra

Végeredményben a fenti korrekciókról elnevezett

$$\begin{aligned} & S, P, D, F, G, H \dots \text{termekhez rendre az} \\ & l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots \end{aligned} \quad (10-8)$$

mellékkvantumszám tartozik, a megfelelő elektron neve pedig  $s, p, d, f, g, h, \dots$  elektron.

A (10-8) hozzárendelés figyelembevételével a (10-7) alatti átmenetek hiánya egyszerűen úgy foglалható össze, hogy csak azok az optikai átmenetek megengedettek, amelyek során az  $l$  mellékkvantumszám  $\pm 1$ -gyel változik, más szóval az  $l$ -re fennáll a

$$\Delta l = \pm 1 \quad (10-9)$$

*kiválasztási szabály*. Eszerint pl. az  $S-S, S-D, S-F$  átmenetek azért „tiltottak”, mert  $|\Delta l|$  rendre 0, 2, 3 lenne.

Az eddig alkalmazott – (10-3)-(10-6) és a 10.1 ábra – alkalmazott  $1S, 2P, \dots, mF$  termjelölésekben az empirikusan megállapított egész számok mindegyik alkáliatomra (Li, Na, ...) egyaránt vonatkoznak, de gyakran nem egyeznek meg a megfelelő termhez tartozó  $n$  valódi főkvantumszámmal. Az alábbiakban az e) pontban leírtak alapján pl. az eddig  $1S$ -sel jelölt alaptermhez a Li, Na, K, ... esetében rendre az  $n = 2, 3, 4, \dots$  valódi főkvantumszám rendelendő és az ennek megfelelő jelöléssel a Li, Na, K, ... alaptermje rendre  $2S, 3S, 4S \dots$  term.

A (10-1)-ben szereplő  $n'$  empirikus egész számok helyett az  $n$  valódi főkvantumszámot alkalmazva az alkáli termek alakja

$$\frac{R}{(n + \delta_l)^2}, \quad (10-10)$$

ahol  $\delta_l$  az  $l$  mellékkvantumszámtól függő „kvantumhiány” (pl. a Na-ra  $\delta_0 \approx 1,35; \delta_1 \approx 0,86; \delta_2 \approx 0,01$ ).

## 10.2 Spektrumok multiplicitása és az elektronspin

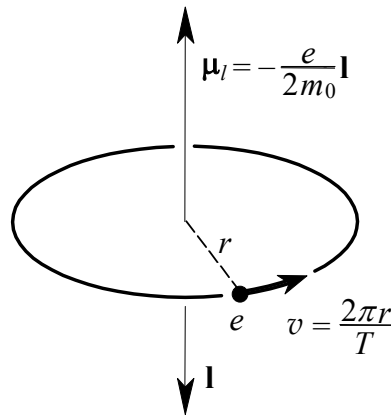
### a) Az alkálistektrumok dublett szerkezete

Az alkáliatomok spektrumvonalai többszörös vonalaknak mutatkoznak, *finomszerkezetük* van. Nevezetesen a fő- és a II. melléksorozat vonalai kettős vagy *dublett vonalak* (például a nátrium D vonala dublett,  $\lambda_{D_1} = 589,6$  nm és  $\lambda_{D_2} = 589$  nm, a két vonal spektrális távolsága

0,6 nm), az I. melléksorozat és a Bergmann-sorozat vonalai pedig ún. *összetett dublettek*. Ez utóbbiak három komponensből állnak, de a harmadik komponens az egyikhez igen közel esik, és a másik két vonalnál sokkal gyengébb. Mivel bármely spektrumvonal hullámszáma két term különbsége, a vonalak felhasadása nyilvánvalóan a termék felhasadására vezethető vissza. Azt találták, hogy a termék közül az *S termék egyszerűek*, a *P, D, F, ... termék pedig dublett termék*. A term-felhasadás magyarázata az elektron spinben rejlik.

b) *A pályamozgás impulzus- és mágneses momentuma*

Az  $r$ -sugarú körpályán  $v$  sebességgel, illetve  $\omega$  körfrekvenciával keringő,  $m_0$  tömegű és  $-e$  töltésű elektron pályaimpulzus-momentumának ( $\mathbf{l}$ ) nagysága (10.4. ábra):



10.4 ábra

$$|\mathbf{l}| = m_0 v r = m_0 \omega r^2. \quad (10-10)$$

Mivel a keringő elektron

$$\mathbf{I} = -\frac{e}{T} = -\frac{e\omega}{2\pi} \quad (10-11)$$

köráramnak (vagy ellipszis mentén folyó áramnak) felel meg (ld. elektromosságban), ezért mágneses momentummal ( $\boldsymbol{\mu}_l$ ) is rendelkezik, amelynek nagysága:

$$|\boldsymbol{\mu}_l| = I f = -\frac{e\omega}{2\pi} r^2 \pi = -\frac{1}{2} e \omega r^2. \quad (10-12)$$

A fentiek alapján a  $\boldsymbol{\mu}_l$  mágneses momentum és az  $\mathbf{l}$  impulzusmomentum között a következő összefüggés van:

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{e}{2m_0} \mathbf{l}. \quad (10-13)$$

A  $\boldsymbol{\mu}_l$  és  $\mathbf{l}$  vektorok egymással ellentétes irányúak (10.4. ábra).

A kvantummechanika szerint az  $\mathbf{l}$  nagysága az alábbi diszkrét értékeket veheti fel:

$$|\mathbf{l}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (10-14)$$



ahol az  $l = 0, 1, 2, \dots$  az ún. *pálya-impulzusmomentum kvantumszámát* jelenti. Ennek alapján a  $\mu_l$  mágneses momentum [ld. (11-12)] nagysága a következőképpen írható:

$$|\mu_l| = \frac{e\hbar}{2m_0} \sqrt{l(l+1)} = m_B \sqrt{l(l+1)} \quad , \quad (10-15)$$

ahol  $l = 0, 1, 2, \dots$ , és

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_0} \quad (10-16)$$

az ún. *Bohr-féle magneton* vagy *elemi mágneses momentum*.

c) *Az elektron spinje és mágneses momentuma*

Az elektron spinjének (s) – saját impulzusmomentumának – létezésére vonatkozó feltételezést a kísérleti tények nagy száma megerősíti. A spin az elektronnak ugyanolyan jellemző tulajdonsága, mint a töltése és a tömege. Az elektron spinje és a spin valamennyi tulajdonsága automatikusan következik a relativitás elmélet követelményeit kielégítő kvantummechanikai alapegyenletből, amelyet *Paul Dirac* állított fel. Bebizonyosodott, hogy az elektron spinje egyszerre kvantum- és relativisztikus tulajdonság. Megemlítendő, hogy az elektronon kívül más részecskék – pl. protonok, neutronok – is rendelkeznek spinnel.

*Az elektronspin nagysága:*

$$|s| = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \left( = s \frac{h}{2\pi}, \text{ ahol } s = \frac{1}{2} \right), \quad (10-17)$$

azaz  $|s|$  fele akkora, mint az elektron keringéséből származó pálya-impulzusmomentum legkisebb értéke, 1.

*Az elektron saját mágneses momentumának nagysága 1 Bohr-féle magneton:*

$$|\mu_s| = \mu_B = \frac{e\hbar}{4\pi mc} \quad , \quad (10-18)$$

tehát a  $|\mu_s|/|s| = e/mc$  viszony kétszerese az elektron keringéséből adódó mágneses és impulzusmomentum hányadosának, a  $|\mu_l|/|l| = e/2mc$  „giromágneses hányadosnak”.

A kvantummechanika *Dirac-egyenlete* szerint egy elektron *saját impulzusmomentumának (spinjének)* nagyságát a következő formula írja le:

$$|s| = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{3} \quad , \quad (10-19)$$

ahol az

$$s = \frac{1}{2} \quad (10-20)$$

az ún. *spinkvantumszámot* jelenti. Az  $s$ -hez kapcsolódó  $\mu_s$  *saját mágneses momentumra* az kapható, hogy

$$\mu_s = -g_s \frac{e}{2m_0} s \quad (10-21)$$

A (10-21) és a (10-13) összefüggések hasonlósága szembeötlő. A különbség csak a (10-21)-ben bevezetett  $g_s$  faktorban van, amelyet az elektron ún. *g-faktorának* nevezünk. Amíg a klasszikus elképzelés szerint a saját-mágneses momentum és a saját-impulzusmomentum közötti arányossági tényezőre itt 1-et kellene kapnunk, ezzel szemben a kísérletek alapján azt találták, hogy

$$g_s = 2,0023. \quad (10-22)$$

A Dirac-féle relativisztikus kvantumelméletben a  $g$ -faktorra  $g_s = 2$  érték adódott. A  $g_s$  faktornak a 2 értéktől való csekély eltérése a kvantumelektrodinamikában úgy magyarázható, ha az elektronnak a saját sugárzási terével való kölcsönhatását is figyelembe vesszük.

A (10-31) alapján a saját mágneses momentum nagyságára -  $g_s = 2$  értéket véve - a következő eredményt kapjuk:

$$|\boldsymbol{\mu}_s| = -\frac{e}{m_0} |\mathbf{s}| = -\frac{e\hbar}{m_0} \sqrt{s(s+1)} = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = -\mu_B \sqrt{3}. \quad (10-23)$$

A spin mágneses térben csak kétféleképpen, a térrel paralel vagy antiparalel irányba állhat be, vagy a síp komponense a tér irányában

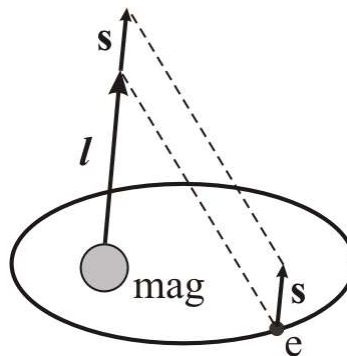
$$m_s \frac{h}{2\pi}, \quad \text{ahol } m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (10-24)$$

a *szinkvantszám*.

d) A termék dublett szerkezetének értelmezése

A termék bevezetésével a vegyértékelektron teljes impulzusmomentuma ( $\mathbf{j}$ ) az  $\mathbf{l}$  pályaimpulzusmomentum és az  $\mathbf{s}$  spin vektori összege (10.5 ábra):

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}. \quad (10-25)$$



10.5 ábra

A  $\mathbf{j}$ -ről a többi impulzusmomentumhoz ( $\mathbf{l}$  és  $\mathbf{s}$ ) hasonlóan feltesszük, hogy „kvantálva van”, vagyis nagyságra nézve csak diszkrét értékeket vehet fel, a  $h/2\pi$  elemi momentum valamilyen  $j$  számú többszöröseit:

$$|\mathbf{j}| = \sqrt{j(j+1)} \frac{h}{2\pi}, \quad (10-26)$$

ahol  $j$  az ún. *belső kvantszám*.

Mivel az  $s$  spin az  $l$ -l antiparallel  $B$  mágneses térben csak kétféleképpen, a  $B$ -vel, illetve az  $l$ -l párhuzamosan vagy ellentétesen állhat be, megadott  $l$ -nél a  $j$ -nek csak két értéke lehetséges:

$$j = l + \frac{1}{2} \tag{10-27}$$

és

$$j = l - \frac{1}{2}, \tag{10-28}$$

illetve az  $l = 0$  esetben  $j$ -nek csak egy értéke lehetséges, mivel  $j$  nem lehet negatív:

$$j = s. \tag{10-29}$$

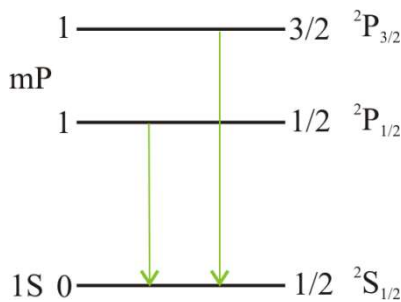
E szerint:

$$j = \left| l + \frac{1}{2} \right|. \tag{10-30}$$

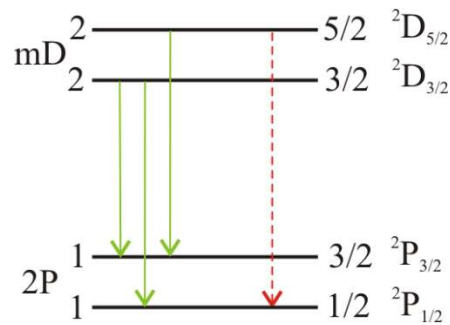
A spin kétféle beállításához, azaz  $j$  két értékéhez két különböző energia tartozik. Következésképpen bármely term, ha  $l \neq 0$ , két komponensre bomlik, vagyis az  $l = 1, 2, 3, \dots$ -nak megfelelő  $P, D, F, \dots$  termek *dublettek*, az  $l = 0$ -nak megfelelő  $S$ -termek *egyszerűek*. Megjegyezzük, hogy az egyöntetűség kedvéért ez utóbbiakat is dublett  $S$ -termeknek hívják.

A termek jelölésénél a 2-es multiplicitást az  $S, P, \dots$  betűkhöz bal felső, a  $j$  értéket jobb alsó indexként írják. Így egy  $n$  főkvantumszámhoz a következő termek, illetve termkomponensek tartoznak:

$$n^2S_{1/2}; \quad n^2P_{3/2}; \quad n^2P_{1/2}; \quad n^2D_{5/2}; \quad n^2D_{3/2}; \quad n^2F_{7/2}; \quad n^2F_{5/2}; \dots \tag{10-31}$$



10.6 ábra Dublett szerkezet



10.7 ábra Összetett dublett szerkezet

A vonalak felhasadását illetően a 10.6 ábráról közvetlenül látható, hogy a fősorozat (1S-mP) és ugyanúgy a II. melléksorozat (2P-mS) bármely vonalának – az S term egyszerű és a P term kettős volta miatt – dublettnek kell lennie. Az I. melléksorozat (2P-mD) és hasonlóan a Bergmann-sorozat (3D-mF) vonalai azonban a 10.7 ábra alapján várt négy komponens helyett csak hároomból állnak. Ezt a  $j$ -re előírt

$$\Delta j = 0 \text{ vagy } \pm 1 \tag{10-32}$$

kiválasztási szabállyal magyarázhatjuk: az ábrán piros szaggatott vonallal jelölt,  $|\Delta j| = 2$ -nek megfelelő átmenet nem jön létre.

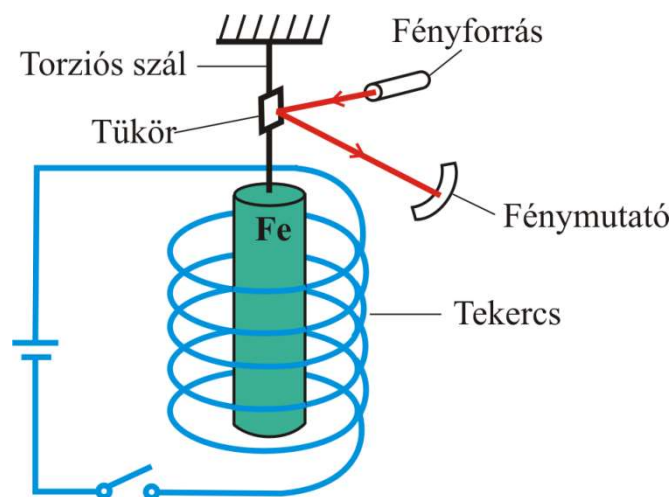
A relativisztikus kvantummechanika *Dirac*-egyenlete az elektron spinjének és saját mágneses momentumának a létezéséről minden külön feltevés nélkül számot ad (ld. kvantummechanika). Ennek az egyenletnek a segítségével értelmezhető a H-atom és a  $Ze$  magtöltésű hidrogénszerű ionok kísérletileg észlelhető finomszerkezete és az alkálifém-atomok spektrumának dublett-szerkezete. A *Dirac*-egyenlet – amellyel itt nem foglalkozunk – a lehetséges (energia-, illetve) termértékekre a következő kifejezést szolgáltatja:

$$T = \frac{RZ^2}{n^2} + \frac{\alpha^2 RZ^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) = T_0 + \Delta T, \quad (10-33)$$

ahol  $Z$  a magtöltésszám,  $n$  a fő-,  $j$  a belső kvantumszám,  $R$  a *Rydberg*-állandó, az  $\alpha$  pedig egy dimenzió nélküli állandó, az ún. *Sommerfeld-féle finomszerkezeti állandó*.

### 10.3 Atomok mágneses és elektromos térben

a) *A giromágneses hányados mérése; az Einstein-de Haas-féle kísérlet*



**10.8 ábra** az *Einstein-de Haas-féle kísérleti elrendezés sematikus rajza*

A *10.8 ábrán* látható kísérleti elrendezés segítségével *Einstein* és *de Haas* 1915-ben mérni tudták makroszkopikus minták giromágneses hányadosát. A kísérletekben vékony (0,03 cm átmérőjű és 10 cm hosszúságú) vasrúd függött kvarc torziós szálon egy tekercs belsejében. Amikor a rudat a tekercsbe bocsátott árammal bemágnesezték, illetve az áram kommutálásával átmágnesezték, a rúd – tükörleolvasással kimutatható mértékben – elfordult (*mágnesezéssel való forgatás*). A pontosabb méréseknél rezonancia módszert alkalmaztak: a rudat periodikusan átmágnesezték olyan váltakozó árammal, amelynek frekvenciája megegyezett a felfüggesztett rúd forgási rezgéseinek frekvenciájával.

A fenti jelenség az impulzusnyomaték tételének alkalmazásával megmagyarázható. Ha a vasrúd mágnesezettségét megváltoztatjuk, vagyis ha megváltoztatjuk a mintában az atomi (elemi) mágneses momentumok irányát, akkor meg kell hogy változzék a velük kapcsolt atomi

impulzusnyomatékok iránya is. Mivel – az impulzusnyomaték megmaradásának tétele szerint – a rendszer teljes impulzusnyomatékának állandónak kell maradnia, az atomi impulzusnyomatékok megváltozását a rúd ellenkező irányú elfordulásának kell kompenzálnia.

A rúd mágnesezettségének irányát  $180^\circ$ -kal megváltoztatva, megváltozik a rúd impulzusnyomaték-vektorának iránya is,  $180^\circ$ -kal. Kísérletileg mind a rúd mágneses momentumának  $\Delta\mu_{\text{rúd}}$  megváltozása, mind pedig a rúd impulzusnyomatékának  $\Delta N_{\text{rúd}}$  megváltozása mérhető. A  $\Delta\mu/\Delta N$  hányados megegyezik a  $\mu_z$  atomi mágneses momentumnak és az  $l_z$  atomi impulzusmomentumnak az arányával. Az *Einstein - de Haas*-féle kísérletből erre az arányra azt kapták, hogy

$$\frac{\Delta\mu}{\Delta N} = \frac{\mu_z}{l_z} = \gamma = g \frac{e}{2m_0}, \quad (10-34)$$

ahol

$$\gamma = \frac{e}{m_0}, \quad (10-35)$$

vagy

$$g = 2. \quad (10-36)$$

Ha tehát  $\mu_z$ , illetve  $l_z$  az elektronok keringéséből származó mágneses- illetve impulzusnyomaték lenne, akkor  $\gamma = e/2m_0$  vagy  $g = 1$  értékeket kellett volna kapniuk. A mérési eredmények alapján megállapítható, hogy az elektronoknak – keringésüktől függetlenül – saját-mágneses momentumuk és saját-impulzusmomentumuk (spinjük) van, amelyek hányadosa kétszerese a pálya-mágneses momentum és a pálya-impulzusmomentum hányadosának. A kísérletekben szereplő ferromágneses anyagok mágnesezése pedig nem az elektronok keringéséből származó „pályanyomatékok” beállítására, hanem az elektronspinek beállítására vezethető vissza.

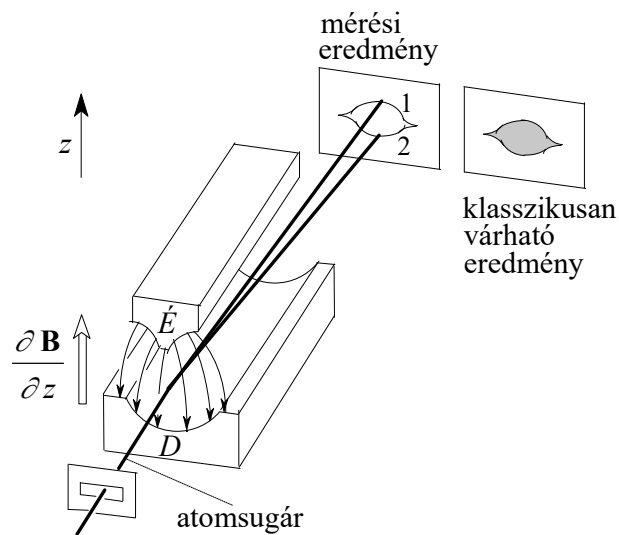
Megjegyezzük, hogy a mágneses momentum és az impulzusmomentum együttes jelenlétét tanúsító „giromágneses hatások” közül az időrendben először kimutatott hatás a *Barnett-effektus* (1914), amely az *Einstein–deHaas*-effektus megfordítottja (*forgatással való mágnesezés*). Ha a kezdetben nem mágneses vasrudat hossz tengelye körül gyors forgásba hozunk, akkor a vas mágneses lesz. Ellenkező irányú forgatásnál a vasrúd átmágneseződik. Merve a rúd forgási szögsebességét és mágnesezettségét, a mágneses momentum és az impulzusmomentum hányadosára a (10-35)-cel, illetve a (10-36)-tal megegyező eredményt kaptak.

b) *Az iránykvantálás kísérleti igazolása; a Stern - Gerlach-féle kísérlet*

Az atomnyaláboknak (atomsugaraknak) mágneses térben való eltérése révén sikerült az iránykvantálás kísérleti bizonyítása, az atomok mágneses momentumának közvetlen mérése. Az idevonatkozó első kísérleteket *Stern* és *Gerlach* végezték (1921) ezüst atomsugárral, majd később kisülési csőben előállított hidrogén atomokkal is. A kísérleti elrendezést a 10.9 ábra mutatja. Az ezüstsugarak az evakuált csőben elektromos árammal izzított platinadrót beüzemelt felületéről indulnak ki, amelyből diafragmákkal kiválasztott keskeny nyaláb az inhomogén mágneses teret előállító elektromágnes É és D pólusa között áthaladva a hűtött üveglemezre jut. Az atomsugár merőleges az egymással megegyező  $z$  irányú mágneses térre és a tér gradiensére. Tér nélkül az atomok mágneses- és impulzusmomentum vektorai a térben

tetszőlegesen orientáltak. Inhomogén mágneses térben azonban ezek a vektorok a  $z$  irányú tér körül precesszálnak.

Az inhomogén mágneses tér a mágneses momentumra olyan erőt gyakorol, amelynek iránya és nagysága a mágneses tér és a mágneses dipólus egymás közötti relatív helyzetétől függ. A mágneses térrel paralel orientációjú mágneses dipólus pl. a térerősség növekedésének irányába mozog, a mágneses térrel antiparalel orientációjú mágneses dipólus pedig a térerősség csökkenésének irányába mozdul el; merőleges orientáció esetén a dipólus nem térül el.



10.9 ábra A Stern - Gerlach-féle kísérleti elrendezés

A  $z$ -irányú eltérítő erőt a mágneses tér

$$U = -\mu B \quad (10-37)$$

potenciális energiájából kapjuk:

$$F_z = \mu_z \frac{dB}{dz} = \mu \frac{dB}{dz} \cos \alpha, \quad (10-38)$$

ahol  $\alpha$  a mágneses momentum és a tér gradiensének iránya közötti szöget jelenti.

Ha az atomok mágneses momentumai bármilyen irányt felvehetnének ( $\alpha$  minden értéke előfordulna) - ahogyan az a klasszikus felfogásból következne -, akkor az  $F_z$  is minden értéket felvehetne a  $-\mu dB/dz$  (amikor is  $\cos \alpha = -1$ ) és  $+\mu dB/dz$  (amikor is  $\cos \alpha = +1$ ) között. Ezzel szemben a kísérlet azt mutatja, hogy az  $L$  üveglemezre becsapódó H és Ag atomok az atomnyalábot határoló résnek nem egy szétfolyó, hanem két (1 és 2) éles képét hozzák létre (10.9. ábra).

A fenti és más atomokkal végzett hasonló típusú kísérletek az alábbi következtetésekre vezettek.

- Létezik *iránykvantálás*. Az atomok mágneses momentumai a  $\mathbf{B}$  térhez viszonyítva csak diszkrét beállási lehetőséggel rendelkeznek. A H és az Ag atomok esetében csak kétféle beállási lehetőség van: a mágneses momentum a  $\mathbf{B}$ -vel párhuzamosan vagy ellentétesen állhat be.

- A H és Ag atomsugarak megfigyelt eltéréseinek kiértékeléséből  $\mu_z$ -re a következő értéket kapták:

$$\mu_z = \pm \mu_B. \quad (10-39)$$

Általában a fent ismertetett módszerrel meghatározhatjuk az atomi mágneses-momentum értékét, ha ismerjük a mágneses tér gradiensének nagyságát.

- Minden olyan atom esetében, amelynek legkülső elektronja egy  $s$ -elektron, az eltérítő erőre ugyanaz az érték adódik. Ebből következik, hogy mindegyik belső elektronnak mind mechanikai mind a mágneses momentumai semlegesítik egymást; mérni csak a legkülső  $s$ -elektron hatását tudjuk.
- Az  $s$ -elektron pálya-impulzusmomentuma:  $l = 0$ , és így a pálya-mágneses momentuma is nulla; mérni ekkor csak a spinmágnesességet lehet.
- Egy pörgettyűhöz teljesen hasonlóan az atomok az impulzusnyomatékuk nagyságát és irányát a térbeli mozgásuk során megtartják.

A fenti kísérleti eredmények képezik az alapját a (b) és (c) pontokban az atomok impulzus- és mágneses momentumáról összefoglalt ismereteknek.

#### 10.4 Ellenőrző kérdések

- Jellemezze az alkáli fémek spektrumát különös tekintettel a hidrogén spektrumával való összehasonlításra!
- Magyarázza meg az alkáli fémek termjeinek  $l$ -től való erős függését! Mi a kvantumhiány?
- Adjon magyarázatot az alkáli fémek spektrumának dublett szerkezetére!
- Jellemezze az elektron pálya, illetve saját pálya (és mágneses) momentumát, ezek lehetséges kapcsolódását!
- Írja le az Einstein-de Haas és a Barnett effektusokat!
- Milyen kísérlettel lehet bizonyítani az iránykvantálást?

## 11. Többelektronos atomok

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a többelektronos atomi rendszerek spektrumának főbb jellegzetességét,
- a vektori összeadás szabályainak, illetve a vektormodell ismeretében képes értelmezni a spektrumok tulajdonságait,
- ismeri a termék részletesebb jelölését; az adott elektron konfigurációt jellemző kvantumszámokhoz való kapcsolatát,
- elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja mikrorendszereket jellemző vektormennyiségek összeadására vonatkozó szabályokat, a termeket képes rendszerezni a vektormodell alapján.

Jelen fejezetben ismertetjük a többelektronos atomi rendszerek spektrumának jellegzetességeit, amelyet értelmezünk a vektormodell segítségével. A mikrorendszereket jellemző vektormennyiségek összeadására vonatkozó szabályok ismeretében megismerjük az LS- illetve a jj-csatolás jellegzetességeit, a spektrumokra vonatkozó következményeit.

A fejezetben helyet kap a Zeeman-effektus ismertetése is.

Az előző fejezetben az egy elektronnal rendelkező hidrogén atommal és hidrogénszerű ionokkal ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ , ...), a periódusos rendszer I. oszlopában található alkálifémek (Li, Na, ...) atomjaival, és a hozzájuk hasonló ionokkal ( $\text{Mg}^+$ ,  $\text{Al}^{2+}$ , ...) foglalkoztunk. Az utóbbiaknál a spektrum keletkezésénél egyetlen elektron, az ún. vegyérték elektron játszott az alapvető szerepet. A továbbiakban a két-, majd a kettőnél több elektronos atomok spektrumait fogjuk vizsgálni, amelyek az elektronburok felépítéséről adnak információt számunkra.

### 11.1 Kísérleti eredmények

A hélium atom alapállapotában az első pályán ( $n=1$ ) lévő két  $s$  elektronja teljesen betölti az ehhez a főkvantumszámhoz tartozó lehetséges állapotokat. Gerjesztett állapotban egy elektron marad az  $n=1$  pályán. A másik elektronnak magasabb energiájú másik pályára kell lépnie.

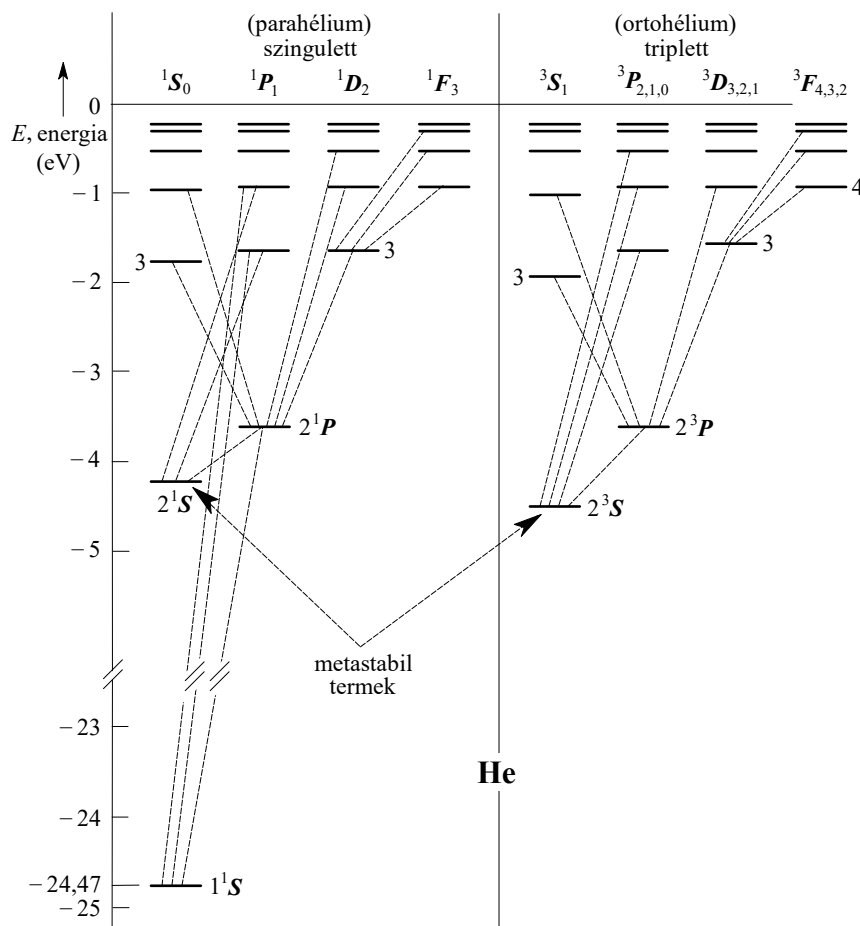
A hélium atom spektruma két fősorozatból, két I. és II. melléksorozatból és két Bergmann-sorozatból áll. Ezek a sorozatok két termrendszerből állnak: Egyszerű vagy szingulett termekből, valamint hármass vagy tripllett termekből (11.1. ábra). A két termrendszer közötti átmenetnek megfelelő színeképvonalat nem észleltek, ezért sokáig úgy gondolták, hogy a héliumnak két módosulata van,

- a szingulett termrendszer a *parahélium*hoz,
- a tripllett termrendszer pedig az *ortohélium*hoz tartozik.

A periódusos rendszer II. oszlopában álló berillium (Be), magnézium (Mg), ...alkáli földfémek spektrumvonalainak legnagyobb része szintén két termrendszerre, egy szingulett és egy tripllett termrendszerre vezethető vissza. Ebből és a kémiai tulajdonságokból arra következtethetünk, hogy az említett atomok két külső vagy vegyértékelektront tartalmaznak. A színeképvonalak kisebb részének keletkezésében szerepe van a fenti két termrendszerbe nem beilleszthető, ún. eltolt vagy anomális termeknek is.



A periódusos rendszer további oszlopaiban lévő elemeinek spektrumaiban a vonalak száma és elrendeződésük bonyolultsága mindinkább növekszik. Különösen sok vonalból áll pl. a vas színképe, amelyet ezért gyakran alkalmaznak összehasonlítási spektrumként a hullámhosszméréseknél. Továbbá nagyon bonyolult szerkezetű a nemesgázok (Ne, Ar, ...) spektruma.



11.1 ábra A hélium atom term sémája

A III. oszloptól kezdve a termék között az eddig említett dublett és triplett terméknel *nagyobb multiplicitású termék* is előfordulnak. Az I. oszlopban a termék ismeretesen *dublettek*, a II. oszlopban *szingulettek vagy triplettek*, viszont a III. oszlopban a termék *dublettek és kvartettek*, a IV-dikben pedig *szingulett, triplett és kvintett* termék stb (11.1 táblázat). Az az egyszerű törvényszerűség a *multiplicitás változásának törvénye*.

Rendszám, elem jele	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn
Term	2	1, 3	2, 4	1, 3, 5	2, 4, 6	3, 5, 7	4, 6, 8	3, 5, 7	2, 4, 6	1, 3, 5	2, 4	1, 3

11.1 táblázat

Egy további törvényszerűség az atomok és a pozitív ionok spektrumainak kapcsolatára vonatkozik. Korábban már láttuk, hogy a H-atom színeképehez teljesen hasonló szerkezetűek – csak mindinkább az ultraibolya felé tolódnak el – a  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ ,  $\text{Be}^{+++}$ , ... ionok spektrumai. A tapasztalat szerint ugyanilyen hasonlóság mutatkozik a He-atom spektruma és a szintén kételektronos  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Be}^{++}$ ,  $\text{B}^{+++}$ , ... ionok színeképei, továbbá pl. a 10 Na-atom és az ugyancsak 10 elektront tartalmazó  $\text{Mg}^+$ ,  $\text{Al}^{++}$ ,  $\text{Si}^{+++}$ , ... ionok spektruma között. Az ilyen tapasztalatokat foglalja össze a Sommerfeld-Kossel-féle *spektroszkópiai eltolódási törvény*: *a Z rendszámú elem spektrumához általában teljesen hasonló szerkezetűek a Z+1 rendszámú elem egyszeres és a Z+2, Z+3, ... rendszámú elem kétszeres, háromszoros, ... pozitív ionjának spektrumai*. E törvény értelmében az atomok és ionok színeképeinek szerkezetére az elektronok száma a mérvadó, és az előbbi multipllicitási tétel úgy általánosítható, hogy *páros (páratlan) számú elektront tartalmazó atomok vagy ionok termjei páratlan (páros) multipllicitásúak*.

## 11.2 A termék rendszerezése a vektormodell alapján

Több elektront tartalmazó atomok és ionok spektrumainak, illetve termjeinek elméleti úton való kvantitatív meghatározása szerfelett bonyolult és szigorúan meg nem oldható feladat lenne, egy közelítő jellegű rendszerezés és tájékozódás azonban aránylag könnyen lehetséges az ún. *vektormodell* segítségével.

Egyelektron rendszernél már megismertük, hogy az egyes  $l$  és  $s$  impulzusmomentumok egy eredő  $j$  impulzusmomentummá adódnak össze. Egy ilyen csatolás létezik az egyazon atomban lévő különböző elektronok impulzusmomentumai között is. Az empirikus spektrumanalízis legfontosabb eredményéül már korábban azt kapták, hogy: *zárt héjak eredő impulzusmomentuma 0-val egyenlő*. A megfigyelésekből közvetlenül adódott az is, hogy *minden nemesgázatom alapállapota:  $1S_0$* .

Egy atom eredő impulzusmomentumának a kiszámításához elegendő csak a vegyérték-elektronoknak, illetve a nem zárt héjak elektronjainak az impulzusmomentumait figyelembe venni. Ezek az impulzusmomentumok az atomban lévő elektronok mágneses és elektromos kölcsönhatásuk révén kapcsolódnak egymáshoz, és meghatározott kvantumelőírások szerint adódnak össze az atom teljes  $J$  impulzusmomentumává. Ezek a kvantumelőírások megfelelnek a korábban mondottaknak. *A vektormodell az impulzusmomentum szemléltetéséhez jól használható*. Az impulzusmomentumok kapcsolódásának két nevezetes határesetét különböztetjük meg: *az LS- vagy Russel-Saunders-csatolást és a jj-csatolást*.

### a) Az LS-csatolás (Russel-Saunders-féle vagy normális csatolás)

Ha egy atomban több elektron van, akkor a termék elméleti meghatározásánál nem járhatunk el a hidrogén esetéhez hasonló módon; nem vizsgálhatjuk az egyes elektronok mozgását csupán a mag terében, hanem figyelembe kell vennünk az elektronok egymásra való hatását is. Az elektronok egymásra való hatását *csatolásnak* nevezzük. A többelektronos atomban az  $l_1, l_2, \dots$  és  $s_1, s_2, \dots$  között sokféle összekapcsolódás lehetséges, mert e vektorok a hozzájuk tartozó mágneses momentumok révén kölcsönhatásban vannak egymással. E kölcsönhatások rendre: az  $(l_i, l_k)$  *pálya-pálya*, az  $(s_i, s_k)$  *spin-spin*, valamint az  $(l_i, s_k)$  *pálya-spin kölcsönhatás*.

• *Az LS-csatolás fontos határesetében – amikor az elektronok térbeli helyzetéből adódó kölcsönhatási energiája dominál – az elektronok  $l_i$  vektorainak egymás közti, valamint  $s_i$*

spinjeinek egymás közti kölcsönhatása olyan erős, hogy először az  $l_i$ -k csak egymással kapcsolódnak össze az

$$\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i \quad (11-1)$$

eredő pályamomentummá, az  $s_i$ -k pedig az

$$\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i \quad (11-2)$$

eredő spinmomentummá. Az  $\mathbf{L}$  és  $\mathbf{S}$  nagyságára nézve, azt írhatjuk, hogy

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar, \quad (11-3)$$

$$|\mathbf{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar. \quad (11-4)$$

Az  $L$  és  $S$  az atom pályá-, illetve spinkvantumszámát jelenti. Az  $\mathbf{L}$  és  $\mathbf{S}$  vektorok az atom teljes  $\mathbf{J}$  impulzusmomentumává tevődnek össze:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (11-5)$$

A  $\mathbf{J}$  nagysága:

$$|\mathbf{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar, \quad (11-6)$$

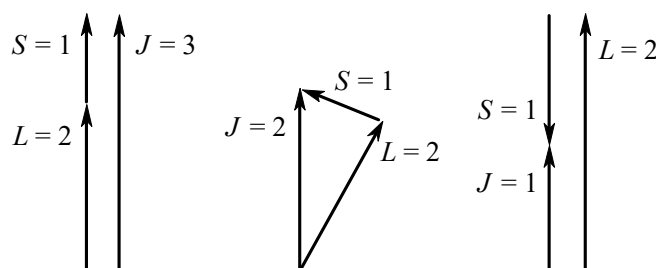
ahol  $J$  az atom belső kvantumszáma.

Ami a momentumok vektori összetevését illeti, a kvantumelméletben tetszőleges impulzusmomentumok (pl. az  $\mathbf{L}$  és  $\mathbf{S}$ ) összeadásából általában több eredő származik (mivel az  $\mathbf{L}$  vektorhoz tartozó mágneses térben az  $\mathbf{S}$  többféleképpen állhat be; ld. iránykvantálás). Nevezetesen, az  $\mathbf{L}$  és  $\mathbf{S}$  momentumok vektori összege olyan  $\mathbf{J}$  momentum, amelynek nagyságával értelmezett [ld. (11-6)]  $J$  kvantumszám a

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad (11-7)$$

értékeket veheti fel, azaz összesen  $2S + 1$ , vagy  $2L + 1$  értékeket, aszerint, amint  $L \geq S$ , vagy  $L \leq S$ .

A 11.2 ábra példaként mutatja a lehetséges csatolásokat  $S = 1$  és  $L = 2$  esetben.



11.2. ábra Lehetséges csatolások az  $S = 1$  és  $L = 2$  esetben

Tegyük fel, hogy az elektronok pályá-, illetve spinmomentumainak vektori összeadásával megállapítottuk az  $\mathbf{L}$  és  $\mathbf{S}$  eredőkre jellemző  $L$  és  $S$  kvantumszámok lehetséges értékeit. Egy meghatározott  $L$ ,  $S$  értékpárnak megfelelő energiaállapot vagy term általában többszörös vagy

*multipliett* term, mert az adott  $L$ ,  $S$ -hez az előzőek értelmében a  $J$  belső kvantumszámnak a (11-7) értékei tartoznak. Az ezekkel az értékekkel jellemzett állapotok az  $L$  és  $S$  vektorok különböző relatív helyzete miatt különböző energiájúak, és így a term az  $L \geq S$  esetben  $2S+1$ , az  $L < S$  esetben  $2L+1$  komponensre hasad fel.

Megállapodás szerint a term multiplicitásának mindig a  $2S+1$  számot nevezzük (akkor is, ha a komponensek száma ennél kisebb). A *termek jelölése* az  $L$  kvantumszám értékének megfelelően:

$$J = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

$$S, P, D, F, G, H, \dots$$

A term multiplicitását a nagy betű bal felső, a  $J$  kvantumszám értékét jobb alsó indexeként írjuk. Példaként szolgál az alábbi kis táblázat.

$S \backslash L$	0	1	2
0	$^1S_0$	$^1P_1$	$^1D_2$
$\frac{1}{2}$	$^2S_{1/2}$	$^2P_{3/2}, ^2P_{1/2}$	$^2D_{5/2}, ^2D_{3/2}$
1	$^3S_1$	$^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$	$^3D_3, ^3D_2, ^3D_1$
$\frac{3}{2}$	$^4S_{3/2}$	$^4P_{5/2}, ^4P_{3/2}, ^4P_{1/2}$	$^4D_{7/2}, ^4D_{5/2}, ^4D_{3/2}, ^4D_{1/2}$

**11.2 táblázat**

Látható, hogy az  $S$  termek mindig egyszerű termek.

- *A termék részletesebb jelölése; elektronkonfiguráció.*

Gyakran kívánatos a termék részletesebb jelölése, amelyben feltüntetik az atom elektronjainak, illetve csak a külső elektronoknak  $n_i$  fő- és  $l_i$  mellékkvantumszámait is, így jellemezve az elektronok „elrendeződését” vagy elektronkonfigurációt.

Példaként említjük a *héliumatomot*, amelynek a 11.1 ábrán szereplő valamennyi termjében vagy állapotában az egyik elektron a lehető legkisebb energiájú,  $1s$  típusú elektron ( $n_1 = 1, l_1 = 0$ ). A He *alapállapotában* a másik elektron is ilyen, az elektronkonfiguráció tehát  $1s1s$  vagy  $(1s)^2$ , a gerjesztett állapotokban  $2s, 3s, \dots, 2p, 3p, \dots$  típusú. Így a 11.1 ábrán csak röviden jelzett termek közül pl. az öt legmélyebbnek a részletes jelölése a következő:

$$\begin{aligned}
 (1s1s) ^1S_0 & \text{ (rövid jelölése: } 1^1S), \\
 (1s2s) ^1S_0 & \text{ (rövid jelölése: } 2^1S), \\
 (1s2p) ^1P_1 & \text{ (rövid jelölése: } 2^1P), \\
 (1s2s) ^3S_1 & \text{ (rövid jelölése: } 2^3S), \\
 (1s2p) ^3P_{2,1,0} & \text{ (rövid jelölése: } 2^3P).
 \end{aligned}
 \tag{11-8}$$

Ezek szerint a He-atomban csak egy elektron „gerjesztődik”, és pl. a  $2^1P \rightarrow 1^1S$  átmenetkor kibocsátott vonal szemléletesen úgy jön létre, hogy a *gerjesztett* vagy „világító” elektron a 2-es fő- és 1-es mellékkvantumszámú pályáról az 1-es fő- és 0 mellékkvantumszámú pályára ugrik. A két külső elektront tartalmazó Be-atom esetében viszont a spektrumból arra kellett következtetni, hogy a Be-atomnak vannak a He-termekhez teljesen hasonló típusú „normális termeken” kívül olyan termjei vagy állapotai is, amelyekben két elektron gerjesztett elektron (kétszeres, illetve *többszörös a gerjesztés* a nagyobb rendszámú elemeknél).

b) *A jj-csatolás*

Hogy a spektrumok az atomok vagy ionok elektronszámának növekedésével mindinkább bonyolultabbakká válnak - akár a periódusos rendszer valamely sorában balról jobbra, akár egy oszlopban felülről lefelé haladunk - annak egyik fő oka éppen a többszörös gerjesztésekkel létrejövő termék számának növekedése. A másik fő oka a növekvő multiplicitás, illetve az, hogy a multipllett felhasadás nagysága erősen nő a rendszámmal, és így a multipllett vonalak egymáshoz tartozása mind nehezebben ismerhető fel. Ezenkívül a rendszám növekedésével egyre gyakrabban lépnek fel a kiválasztási szabályokat megsértő, főként különböző multiplicitású termék közötti átmenetek, jeléül annak, hogy az előzőekben alapul vett *LS*-csatolás már nem jelent eléggé jó közelítést.

Gyakran – főleg a nagy rendszámú atomok gerjesztett állapotaiban – az *LS*-csatolásnál jobban tükrözi a valóságot a másik határeset: az ún. *jj-csatolás*, amikor az egyes elektronok spin-pálya kölcsönhatása dominál. Ennél egy-egy elektron  $l_i$  pálya- és  $s_i$  spinmomentuma között olyan erős kölcsönhatás áll fenn, hogy először az  $l_i$  és  $s_i$  kapcsolódnak össze az  $i$ -edik elektron  $j_i$  teljes impulzusmomentumává:

$$l_i + s_i = j_i, \quad (11-9)$$

majd az összes elektron  $j_i$  vektorai az atom

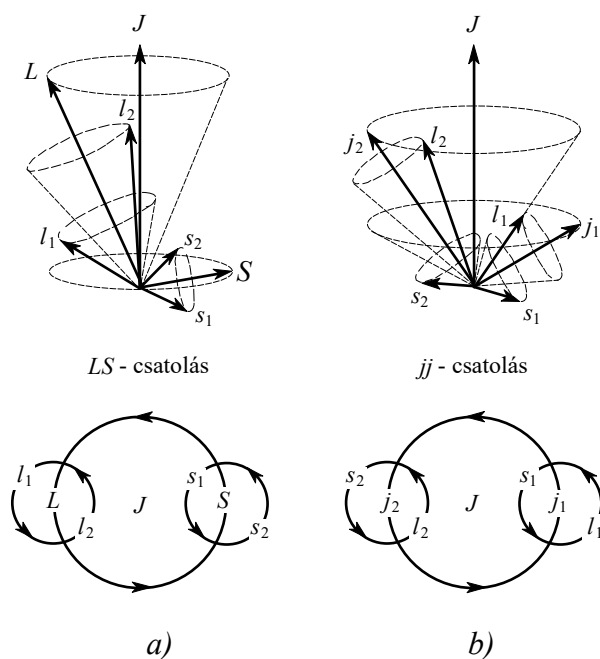
$$J = \sum j_i \quad (11-10)$$

impulzusmomentumává. Itt a

$$\sqrt{J(J+1)}\hbar, \quad (11-11)$$

ahol a  $J$  kvantumszám a kvantummechanikai vektormodellből adódik.

A 11.3a ábrán az *LS*-csatolást, a 11.3b ábrán a *jj*-csatolást mutatjuk be szematikusan.



11.3 ábra Az LS-csatolás (a) és a jj-csatolás (b) sematikus bemutatása

### 11.3 Az atom mágneses momentuma

#### a) A Landé-féle $g$ -faktor

Az előzőekben már többször említettük, hogy egy atom  $\mu$  mágneses momentuma kapcsolatban van az atom  $L$  mechanikai impulzusnyomatékával. A  $\mu/L$  hányadost *giromágneses hányadosnak* nevezzük.

Bár a pálya fogalma - mint általában a mikrorészecskék trajektoriának a fogalma - nem helyes, mégis egy atomban az elektronok mozgásának tulajdonítható impulzusmomentumot *pályaimpulzusnak* nevezzük. A  $\mu_L$  pálya-mágneses momentumnak és az  $L$  pálya-impulzusmomentumnak az arányát a következő kifejezés határozza meg:

$$|\mu_L| = -\frac{e}{2m_0} |L| = -\frac{e\hbar}{2m_0} \sqrt{L(L+1)} = -\mu_B \sqrt{L(L+1)}. \quad (11-12)$$

A

$$\mu_B = -\frac{e\hbar}{2m_0} \quad (11-13)$$

mennyiséget *Bohr-magnetonnak* nevezzük, amely a mágneses momentum természetes egysége. A (11-13)-ban a mínusz előjel azt jelenti, hogy a mágneses momentum és a mechanikai momentum irányai ellentétesek. A mínusz előjel lehetővé teszi számunkra, hogy a  $\mu_L$ -nek a  $z$ -irányú vetületét ( $\mu_{L,z}$ ) egyszerűen megkaphassuk, ha (11-12)-ben a  $\sqrt{L(L+1)}$  helyére az  $m_L$  kvantumszámot behelyettesítjük:

$$\mu_{L,z} = -\mu_B m_L. \quad (11-14)$$

Ha  $m_L > 0$ ,  $L$  vetülete pozitív, míg a  $\mu_L$  vetülete negatív; amikor pedig  $m_L < 0$ , az  $L$  vetülete negatív, és  $\mu_L$ -nek a vetülete pozitív.

Számos kísérleti tény azt mutatja, hogy a saját (spin) mágneses momentumnak és impulzusmomentumnak a hányadosa kétszerese a pálya-mágneses momentum és az impulzusmomentum giromágneses hányadosának. Ily módon:

$$|\boldsymbol{\mu}_S| = -\frac{e}{m_0} |\mathbf{S}| = -2\mu_B \sqrt{S(S+1)}. \quad (11-15)$$

Ebben az összefüggésben a spint mágneses hatás szempontjából „kétszeresnek” mondjuk.

A spin kétszeres mágneses hatására az *Einstein-de Haas*-, valamint a *Barnett*-féle kísérletekből következtethetünk. Ezenkívül, a spin kétszeres mágneses hatásának a fogalma lehetővé teszi, hogy a komplikált *Zeeman*-effektus kielégítő magyarázatát megadjuk.

A spin kétszeres mágneses hatása miatt a  $\boldsymbol{\mu}_J$  teljes mágneses momentum és az  $L_J$  teljes impulzusmomentum giromágneses hányadosa az  $L$ ,  $S$  és  $J$  kvantumszámok függvénye. Megjegyezzük, hogy az  $L$  és  $S$  számok az  $L_L$  és  $S_S$  értékek arányát jellemzik, míg a  $J$  szám a pálya és a spin impulzusmomentum kölcsönös orientációját határozza meg.

A megfelelő kvantummechanikai számítások egy atom mágneses momentumára a következő formulát adják:

$$\mu_J = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}, \quad (11-16)$$

ahol

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (11-17)$$

A (11-17) kifejezést *Landé-féle g-faktornak* nevezzük.

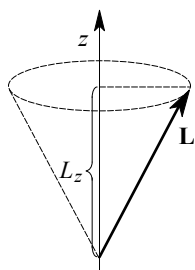
Ha egy atom teljes spin impulzusmomentuma nulla ( $S=0$ ), akkor a teljes impulzusmomentum megegyezik a pályaimpulzusmomentummal ( $J=L$ ). Beírva (11-17)-be  $S=0$  és  $J=L$  értékeket, a  $g$ -re 1-et kapunk ( $g=1$ ), és így a (12-1) által meghatározott mágneses momentumot kapjuk.

Ha egy atom teljes pályaimpulzusmomentuma nulla ( $L=0$ ), akkor a teljes impulzusmomentum megegyezik a teljes spin impulzusmomentummal ( $J=S$ ). A kvantumszámoknak ezeket az értékeit bevezetve (11-17)-be, azt kapjuk, hogy  $g=2$ , és a (11-15) által meghatározott mágneses momentum értékét nyerjük. Megjegyezzük, hogy a *Landé*-féle  $g$ -faktor kisebb is lehet mint egy, sőt nulla is lehet (ezt nyerjük például, ha  $L=3$ ,  $S=2$  és  $J=1$ ). Az utóbbi esetben az atom mágneses momentuma nulla, bár a mechanikai impulzusmomentum különbözik nullától.

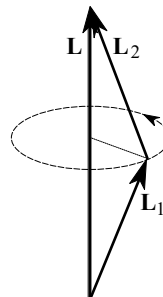
#### b) Az atom vektormodellje

Az atom számos fizikai problémája tárgyalható az atom ún. *vektormodelljével*. Egy ilyen modellnek a felépítésében, a mechanikai impulzusmomentumokat és a mágneses momentumokat irányított egyenes vonalak alakjában ábrázoljuk. Szigorúan véve, az  $\mathbf{L}$  vektorok térbeli irányának bizonytalansága miatt, egy ilyen eljárás nem egészen megalapozott. Ezért, ha egy ilyen vektormodellel dolgozunk, figyelembe kell vennünk az alkalmazott konstrukció alkalmazhatóságának természetét. Egy vektormodellt úgy kell tekinteni, mint szabályok gyűjteményét, amelyet alkalmazva olyan helyes eredményeket kapunk, amelyeket a szigorú kvantummechanikai számítások is megerősítenek.

Egy vektormodell a következő szabályok szerint épül fel. Legyen  $L$  és  $L_z$  meghatározott érték, az  $L_x$  és  $L_y$  pedig határozatlan. Következésképpen, az  $L$  vektor a 11.4 ábrán látható kúp egyik alkotójának irányába mutathat. Úgy képzelhetjük el, mintha az  $L$  vektor egyenletes forgást végezne (precesszálna) a kúp tengelyével megegyező  $z$  irány körül.



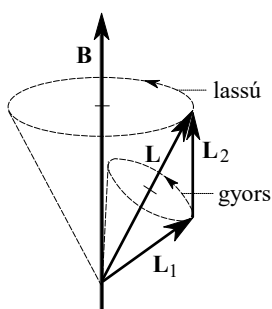
11.4 ábra



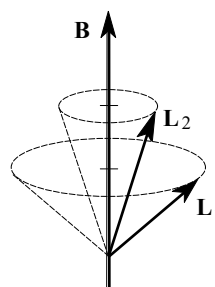
11.5 ábra

Tegyük fel, hogy egy  $B$  mágneses tér a  $z$ -irányba mutat. A  $\mu$  mágneses momentum arányos az  $L$  mechanikai impulzusmomentummal. Ezért a tér hatást gyakorol a ( $\mu$ -n keresztül) az  $L$ -re. Tegyük fel továbbá, hogy az  $L$  momentum precessziós sebessége a  $B$  körül nagy, az impulzusmomentumra ható tér erős, azaz a  $B$  értéke jelentős.

A vektormodell felépítésére vonatkozó szabályok szerint az  $L_1$  és  $L_2$  impulzusmomentumok összeadódva precesszálnak az  $L$  eredő impulzusmomentum iránya körül (11.5 ábra). Az impulzusmomentumok kölcsönhatnak egymással (a  $\mu_1$  és  $\mu_2$  mágneses momentumokon keresztül). Feltételezzük, hogy a precesszió sebessége arányos a kölcsönhatás erősségével. Abban az állapotban, amelyben  $L$  és  $L_z$  meghatározott, az  $L$  vektor fordított irányban precesszál a  $z$  irány körül. Ha a  $B$  mágneses tér a  $z$ -tengely mentén épül fel, akkor az impulzusmomentumoknak egymással és a mágneses térrel való kölcsönhatási viszonyától függően különböző jelenségeket fogunk megfigyelni.



11.6 ábra



11.7 ábra

Vizsgáljunk most két esetet: ( $\alpha$ ) a gyenge külső mágneses tér esetét, amikor az impulzusmomentumok egymással való kölcsönhatása nagyobb, mint a mágneses tér hatása rájuk; ( $\beta$ ) az erős mágneses tér esetét, amikor a tér hatása az impulzusmomentumok mindegyikére meghaladja az impulzusmomentumok egymás közötti kölcsönhatását.

Az első [( $\alpha$ )] esetben (11.6 ábra) az impulzusmomentumok egy  $L$  eredő impulzusmomentummá adódnak össze, ami a tér irányára van kivetítve. Ily módon kétféle precesszió



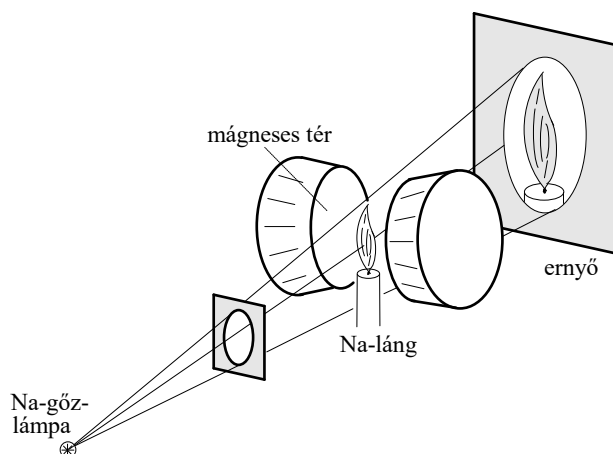
fordul elő: az  $L_1$  és  $L_2$  impulzusmomentum precessziója az  $L$  iránya körül, és az eredő  $L$  vektor precessziója a  $B$  iránya körül. Az első precesszió szögsebessége sokkal nagyobb, mivel az impulzusmomentumok egymással való kölcsönhatása meghaladja a mágneses térnek a rájuk gyakorolt hatását.

A második [( $\beta$ )] esetben (11.7 ábra) a tér megszakítja az  $L_1$  és  $L_2$  impulzusmomentumok közötti kapcsolódást, és az  $L_1$  is és az  $L_2$  is egymástól függetlenül precesszál a tér iránya körül. Az  $L_1$  és  $L_2$  vektorok mindegye külön-külön vetítődik a tér irányára.

#### 11.4 A Zeeman-effektus

##### a) Kísérleti eredmények

Mágneses térben az atomok energiatermjeinek a felhasadása az optikai spektrumtartománybeli átmenetek következtében frekvenciaváltozásként, illetve felhasadásként is megfigyelhető. A spektrumvonalak ilyen felhasadását mágneses térben először Zeeman észlelte, 1896-ban. Mivel az effektus kicsiny, vizsgálata csak nagy feloldóképességű spektrálműszerekkel lehetséges. Ezek vagy nagy gyújtótávolságú és karcolatszámú rácsspektrográfok, illetve Fabry-Perot-interferométerek.



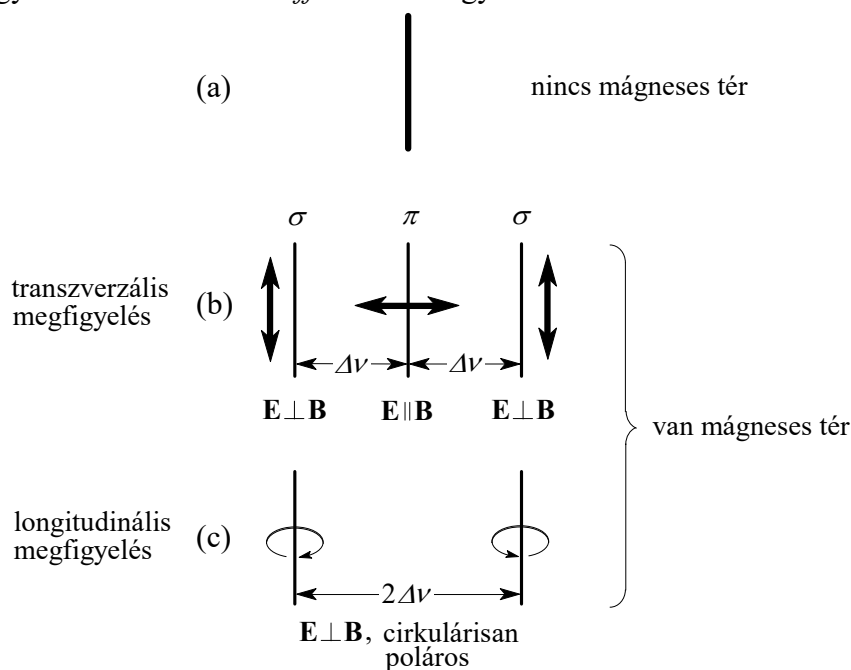
11.8 ábra A spektrumvonalak mágneses térben történő eltolódását demonstráló kísérlet

Van egy igen egyszerű kísérlet (11.8 ábra), amely látványosan demonstrálja a spektrumvonalak eltolódását mágneses térben. Nátriummal sárgára festett láng egy nátriumgőzlámpa sárga fényére átlátszatlan, mivel rezonanciafényről van szó, azaz olyan fényről, amelynél a hullámhossz az abszorpciónál és az emissziónál megegyezik. Vigyük azonban a lángot egy mágneses térbe, akkor a fényforrás (Na-lámpa) és az abszorbens (Na-láng) közötti rezonancia megszűnik. A megfigyelő ernyőn a korábban „sötét láng” megvilágosodik, mivel most a gőzlámpa fényére a láng átlátszó.

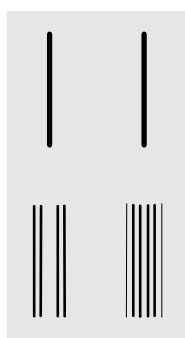
Fabry-Perot-interferométerrel vagy egy megfelelő feloldóképességű rácsspektrográffal kvantitatíve is mérhető a spektrumvonalak felhasadása mágneses térben. Nem túlságosan erős  $B$  tér esetén a felhasadásnak a 11.9 és 11.10 rajzon ábrázolt képe látható. A 11.9 ábrán a Cd vonalának ( $\lambda = 643,8$  nm) felhasadását „normális” Zeeman-effektusnak hívjuk. A legegyszerűbb esetben, a szingulett vonalakon észlelhető normális Zeeman-effektusnál a mágneses tér hiányában az egyszerű vonal (11.9a ábra) aszerint, amint a fényforrás és a spektroszkóp rése által meghatározott megfigyelési irány merőleges a  $B$  mágneses térerősségre, vagy párhuzamos

azzal (*transzverzális*, illetve *longitudinális effektus*), a 11.9b, illetve a 11.9c ábrán látható módon hasad fel. Az előbbi esetben (*normális Lorentz-féle triplétt*) a komponenseknek megfelelő fény lineárisan poláros – az ún.  $\pi$ , illetve  $\sigma$  komponensben a rezgésirány a  $\mathbf{B}$ -vel párhuzamos, illetve arra merőleges – az utóbbi esetben pedig a fény cirkulárisan poláros.

A kísérletek szerint a multiplétt vonalak – pl. a nátrium atomok  $D_1$  és  $D_2$  vonala – mágneses térben bonyolultabb felhasadást mutatnak; a komponensek száma általában sokkal nagyobb, páros számú. Így pl. a nátrium  $D_1$  vonala 4, a  $D_2$  vonala 6 komponensre bomlik (11.10 ábra). Ez az ún. *anomális Zeeman-effektus* elegendően nagy külső  $\mathbf{B}$  tereknél, a normális Zeeman-effektussal együtt a *Paschen-Back-effektusba* megy át.



11.9 ábra A spektrumvonalak felhasadása mágneses térben



11.10 ábra A nátrium  $D$  vonalának felhasadása

### 11.5 Ellenőrző kérdések

- Milyen elemek elektronrendszerét nevezzük több elektronosnak?
- Mi jellemzi a hélium spektrumát?
- Mondja ki a multiplicitás váltakozásának törvényét!

- Mondja ki a Sommerfeld-Kossel-féle spektroszkópiai eltolódási törvényt!
- Mi a vektormodell? Jellemezze az LS- illetve a jj-csatolást!
- Mondja ki a vektori összeadás szabályait!
- Jellemezze a  ${}^3S_{1/2}$   ${}^4D_{7/2}$  és a  ${}^4D_{3/2}$  termeket!
- Mi a Lande-féle g-faktor?
- Mi a Zeeman-effektus?

### 11.6 Feladatok

- Hányféleképpen kapcsolódhat az  $S = 1\frac{1}{2}$  és az  $L = 4$  vektor?

## 12. A röntgenspektrumok

A fejezet elsajátítás után az olvasó

- ismeri az emisszióban megfigyelhető karakterisztikus röntgensugárzás, illetve az abszorpciós röntgenspektrumok szerkezetét,
- képes értelmezni a fenti spektrumok keletkezését,
- elfogadja és vizsgálatai alapján szem előtt tartja a röntgen spektrumok főbb tulajdonságait, valamint keletkezésüknek az elemek elektronburkának héjszerkezetén alapuló magyarázatát.

Jelen fejezetben ismertetjük az emisszióban megfigyelhető karakterisztikus röntgensugárzás, illetve az abszorpciós röntgenspektrumok tulajdonságait, keletkezésüknek – a fotonelméleten és az elemek elektronburkának héjszerkezetén alapuló – magyarázatát.

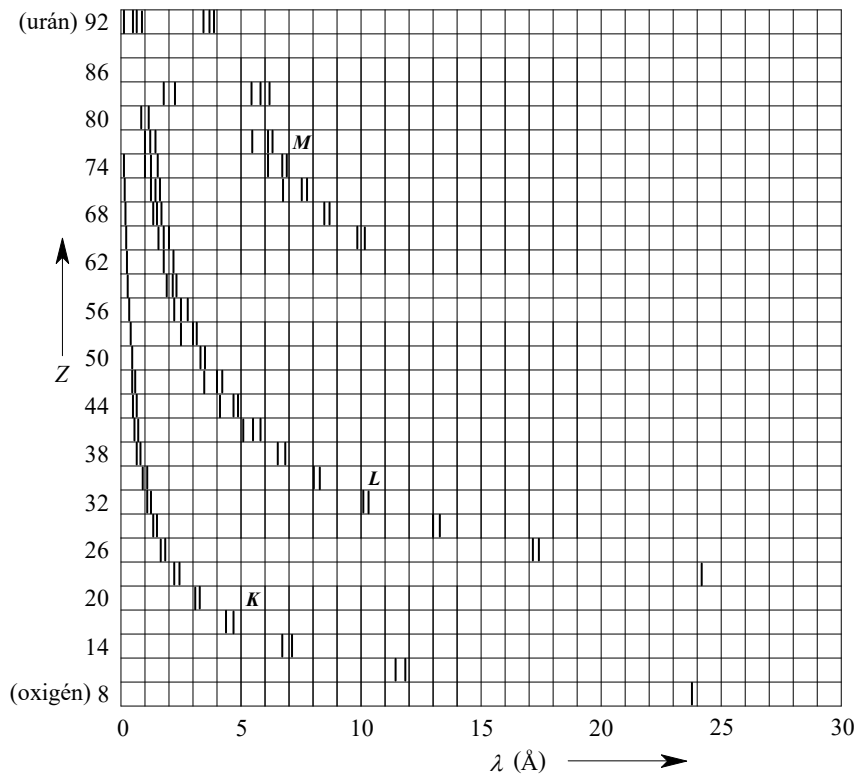
### 12.1 A karakterisztikus sugárzás

Az alábbiakban az atomokra jellemző *karakterisztikus sugárzás* spektrumával, illetve - az abszorpciót is hozzávéve - az *elemek emissziós és abszorpciós röntgenspektrumaival* foglalkozunk, amelyek az optikai színek mellett igen fontos felvilágosítást nyújtanak az atomok szerkezetéről.

#### a) Kísérleti eredmények, Moseley-törvénye

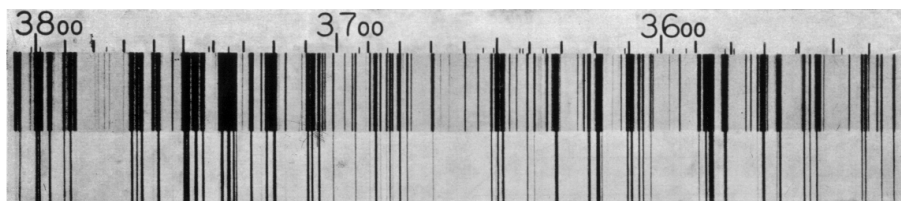
Az 1.5 pontban bemutatott röntgensőben – ha a gerjesztő elektronok energiája egy, az anód anyagától függő kritikus érték alatt marad – a keltett röntgensugárzás spektrumában csak a fékezési sugárzás folytonos spektrumát észleljük. Ha azonban az elektronok energiája egyenlő vagy nagyobb ennél a kritikus értéknél, akkor ún. *karakterisztikus röntgensugárzás* is keletkezik. Ezt a sugárzást azért nevezzük karakterisztikus sugárzásnak, mert ugyanúgy jellemző az antikatód anyagára, mint ahogyan a gázok és gőzök optikai színe jellemző a színek kibocsátó anyagra. A röntgenspektrográfia megalapozása után kimutatták, hogy a karakterisztikus sugárzás spektrumvonalai a röntgenspektrum különböző részeibe eső szabályos vonalakat - ún. szériákat - alkotnak, amelyeket történeti okokból *K*, *L*, *M*, illetve *N* betűkkel jelölnek. Megjegyezzük, hogy az utóbbiakat csak nehéz elemeknél lehet észlelni.

*Moseley* 1913-ban mintegy 40, antikatódként alkalmazott elem röntgenspektrumának rendszeres vizsgálatával megállapította, hogy a sugárzást kibocsátó elem *Z* rendszámának növelésével a sorozatok vonalai szabályosan eltolódnak a kisebb hullámhosszak, illetve nagyobb hullámszámok ( $\bar{\nu} = 1/\lambda$ ) irányába. A *12.1 ábrán* az elemek röntgenspektrumának vázlatos rajza látható, az oxigéntől az uránig.



**12.1 ábra** Az elemek röntgenspektrumának vázlatos rajza

A 12.1 ábrából kitűnik, hogy a röntgenspektrumok lényegesen különböznek az optikai színeképektől; az előbbieket általában egyszerűbbek, kevesebb vonalból állnak. Az optikai spektrumok gyakran nagyon bonyolultak, és néha több száz, sőt több ezer vonalat tartalmaznak (ld. pl. a vas színeképét; 12.2 ábra). A röntgenspektrumok a  $Z$  rendszám növekedésével monoton módon a rövidebb hullámok felé tolnak el, tehát nincs meg az optikai színeképre jellemző (pl. a Li, Na, K, ... színeképeinek hasonlóságában megnyilvánuló) periodicitás. A röntgenspektrumok egyszerűsége, és az a tény, hogy az atom rendszámával monoton változnak (vagyis hiányzik a periodicitás), azt mutatja, hogy nem az atom külső, hanem a belső része játszik lényeges szerepet.

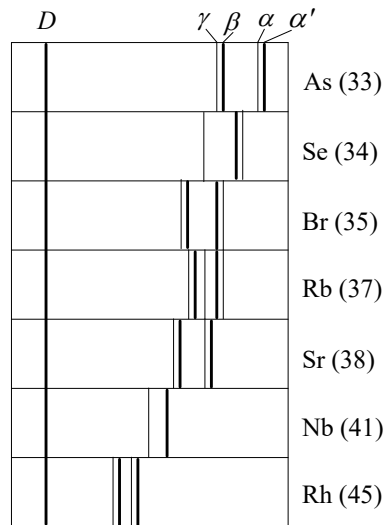


**12.2 ábra** A vas színeképe

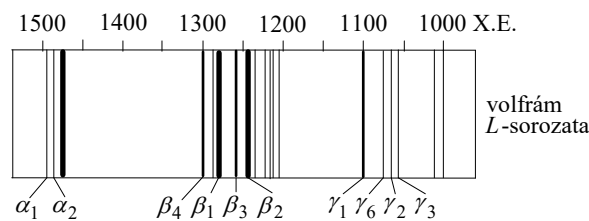
Továbbá lényeges különbség az is, hogy vonalas spektrumok csak emisszióban figyelhetők meg, abszorpcióban nem.

Az összes röntgenspektrum-sorozat közül a legegyszerűbb a  $K$  sorozat felépítése. A  $K$ -sorozat 3 vonalból áll, amelyeket  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$  és  $K_\gamma$  vonalaknak neveznek. A három vonal közül a  $K_\alpha$ -nak van a legnagyobb hullámhossza, és egyúttal ez a legintenzívebb is. A  $K_\alpha$ -vonal tulajdonképpen jól szétválasztható dublett, amely  $\alpha_1$  és  $\alpha_2$  összetevőkből áll. A  $K_\beta$  vonal is dublett, ennél

azonban a két összetevő olyan közel van egymáshoz, hogy nem mindig lehet szétválasztani őket. A 12.3 ábra több elem  $K$ -sorozatának, a 12.4 ábra pedig a volfrám  $L$ -sorozatának rajzát mutatja. Látható, hogy az  $L$ -sorozat bonyolultabb, mint a  $K$ -sorozat.



12.3 ábra Elemek  $K$  sorozatának rajza



12.4 ábra A volfrám  $L$ -sorozatának rajza

Az elemek röntgenspektrumait vizsgálva, *Moseley* a  $K$ -sorozat legnagyobb hullámhosszú és legerősebb vonalának, a  $K\alpha$ -vonálnak a  $\bar{\nu}_{K\alpha}$  hullámszáma és a  $Z$  rendszám között az alábbi összefüggést (*Moseley-törvényt*) állapította meg:

$$\bar{\nu}_{K\alpha} = R(Z-1)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right), \quad (12-18)$$

ahol  $R$  a *Rydberg*-állandó ( $R = 1,097 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ). A (12-18) érvényességét szokás azzal illusztrálni, hogy a mérésekből kapott  $\sqrt{\bar{\nu}_{K\alpha}}$  értékeket a  $Z$  rendszám függvényeként feltüntető pontok egy egyenesen, a „*Moseley-egyenesen*” vannak. Hasonló összefüggések írhatók fel a többi vonalra ( $K\beta$ ,  $L\alpha$ ,  $L\beta$ , ...) is. Az  $L$ -sorozatra (pl. a  $\bar{\nu}_{L\alpha}$  vonalakra) vonatkozólag a *Moseley-féle* összefüggés a következőképpen fogalmazható meg:

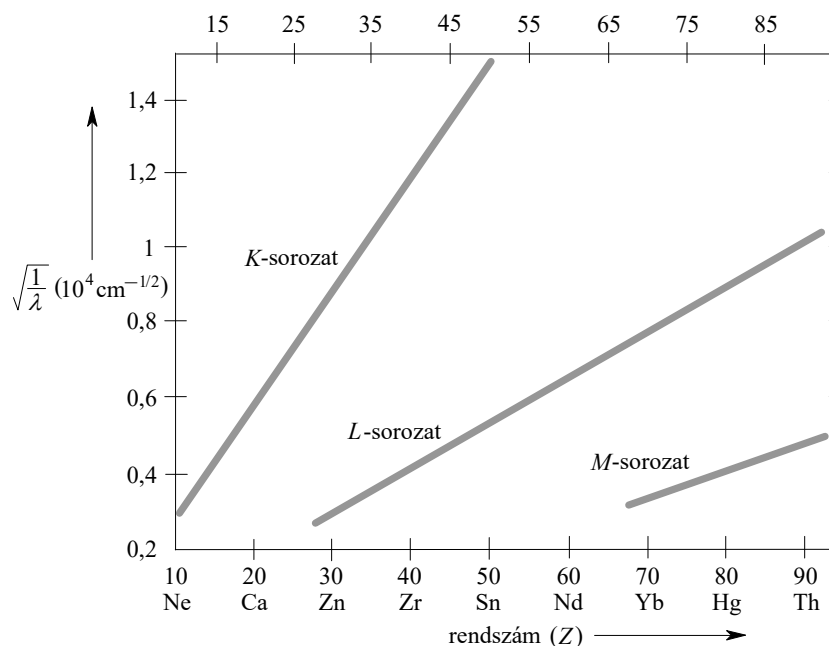
$$\bar{\nu}_{L\alpha} = R(Z-\sigma)^2 \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right), \quad (12-19)$$

ahol  $\sigma$  az ún. *leárnyékolási szám*. A *Moseley-törvényt* rendszerint a következő alakban adjuk meg:

$$\sqrt{\nu} = C(Z - \sigma) , \quad (12-20)$$

ahol  $C$  állandót jelent, a  $Z^* = Z - \sigma$  pedig az ún. *effektív magtöltésszám*.

A 12.5 ábrán a mérésekből kapott  $\sqrt{\nu} \equiv \sqrt{1/\lambda}$  értékekre illesztett *Moseley egyeneseket* ábrázoltuk a *K-, L- és M-sorozatokra* vonatkozóan, a  $Z$  rendszám függvényében.



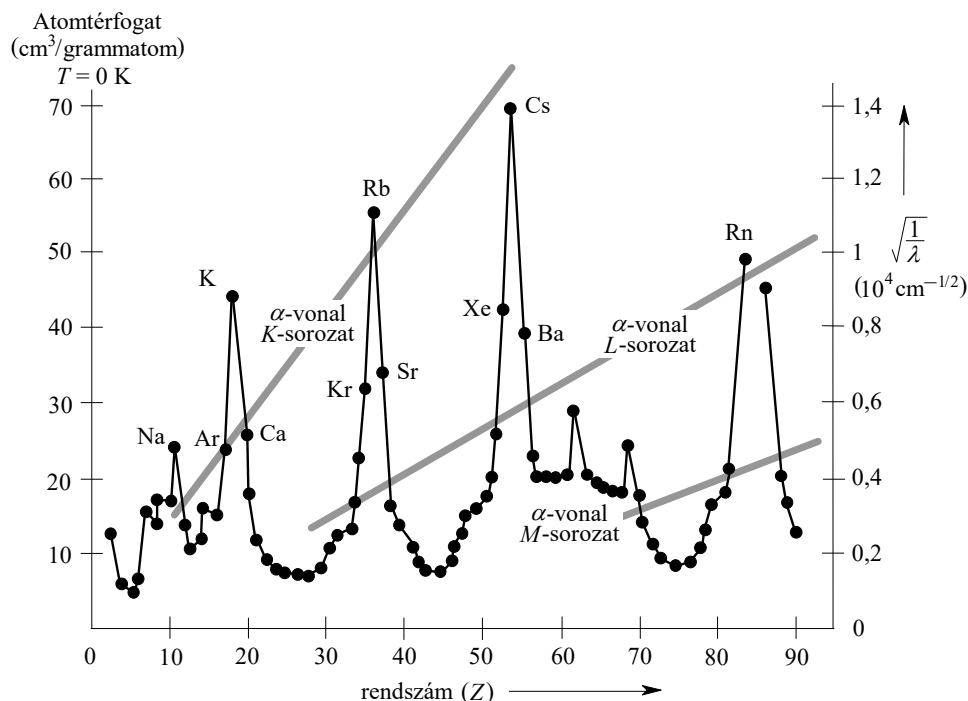
**12.5 ábra** A mérésekből kapott  $\sqrt{\nu} \equiv \sqrt{1/\lambda}$  értékekre illesztett *Moseley egyenesek* a *K-, L- és M-sorozatokra* vonatkozóan, a  $Z$  rendszám függvényében

A *Moseley-törvény* több szempontból igen jelentős:

- A *Moseley-törvény* lehetővé teszi ugyanis a rendszám meghatározását. A (12-20) alapján pontosan meg lehet állapítani bármely elem rendszámát, tehát magtöltését is.
- A *Moseley-törvény* eloszlatta a kétséget mindazoknak az elemeknek a besorolását illetően, amelyeket *Mengyelejev* nem az atomsúlyuknak megfelelő sorrendben sorolt be a rendszerbe (*Moseley* idejében az atomsúlyok és kémiai sajátságok alapján nem minden elemet tudtak egyértelműen besorolni a periódusos rendszerbe); bizonyította, hogy az atomsúly szerinti sorrendet az Ar-K, Co-Ni, Te-J elempárok esetében fel kell cserélni.
- A *Moseley-törvény* útmutatást nyújtott addig még ismeretlen elemek, pl. a 72 Hf és a 75 Re felfedezésére.
- A *Moseley-törvény* elsőnek mutatott rá, hogy az atom kémiai sajátságait nem az atomsúly, hanem a magtöltéssel számértékben egyenlő rendszám határozza meg.
- A *Moseley-törvény* alapja a röntgensugarakkal végezhető kémiai analízisnek, és elősegítette a röntgenspektrumok keletkezésének tisztázását is.

A 12.6 ábra igen világosan szemlélteti a röntgenspektrumok és egyes atomi sajátságok eltérő menetét. A *Moseley-törvény* szerint a röntgenspektrumok monoton változnak a  $Z$  rendszámmal,

míg az atomok tulajdonságai – pl. a kémiai vegyérték, a fajlagos térfogat, és több más tulajdonság – a  $Z$  növekedésével periodikusan változnak. Az ábrán a *Moseley*-törvényt kifejező egyenesek, másrészt az atomtérfogatnak a rendszámától való függését ábrázoló görbe látható, amelynek több maximuma és minimuma van. A következőkben látni fogjuk, hogy az észlelt különbségeknek az a magyarázata, hogy a röntgenspektrumok az elektronburok belső részében keletkeznek. Ebből viszont az következik, hogy az elektronburoknak a maghoz legközelebb eső része a különböző atomoknál azonos felépítésű, míg az atom külső – perifériális – részében a szerkezet periodikusan ismétlődik.



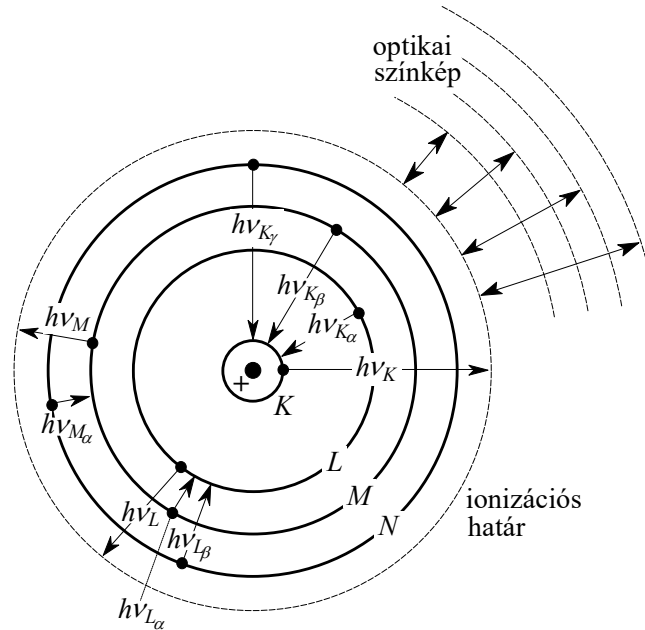
**12.6 ábra** Röntgenspektrumok és egyes atomi sajátságok szemléltetése; a vonalak szemléltetik a *Moseley* törvényt (jobb oldali skála), míg a pontok az atomi térfogatokat (bal oldali skála).

#### b) A röntgenspektrumok keletkezése

A röntgenspektrumok keletkezése, illetve a karakterisztikus röntgenspektrum fotonjainak kibocsátásához vezető folyamatok *Kossel* (1914) nyomán a következőképpen értelmezhetők. Az atom elektronjai – amelyek között megkülönböztethetünk külső és belső (a maggal együtt az „atomtörzset” képező) elektronokat – a magtól való átlagos távolságuk szerint különböző csoportokba, ún. *elektronhéjakba* sorolhatók úgy, hogy az „ugyanazon héjon lévő” elektronok a magtól átlagban közelítőleg egyenlő távolságra vannak. A legbelső héjat *K-héjnak*, a továbbiakat rendre *L*-, *M*-, *N*-, ... *héjnak* nevezzük. Egy-egy héjon csak meghatározott számú elektron lehet, és a nehezebb atomokban a *belső héjak* elektronokkal teljesen betöltött *zárt héjak*. Ha a röntgensőben egy elegendően nagy energiájú katódsugár-elektron az antikatód egyik atomjának valamely belső héjáról „kilök” egy elektront (az atomon kívülre, vagy egy külső, nem zárt héjra), akkor az így felszabadult *üres helyre* („lyukra”) átmegy egy elektron valamelyik távolabbi héjról (vagy esetleg kívülről), és ennek az „átugró” elektronnak kezdeti és végállapota közti energiakülönbséget az atom kisugározza  $h\nu$  energiájú „röntgenfoton” alakjában. A *K*-sorozat vonalait azok az atomok bocsátják ki, amelyekben a gerjesztéskor a *K*-



héjon keletkezett „lyukba” ugrik át egy elektron az  $L$ -,  $M$ -,  $N$ -, ... *héjról* (a sok atom közül egyesekben az  $L$ -, másokban az  $M$ -héjról stb.), illetve „a lyuk ugrik át” a  $K$ -ról az  $L$ -,  $M$ -,  $N$ -, ... héjra; a megfelelő vonalak az ún.  $K_\alpha$ -,  $K_\beta$ -,  $K_\gamma$ -, ... vonalak. Hasonlóan keletkeznek az  $L$ -,  $M$ -, ... sorozatok vonalai is (12.7 ábra).



12. 7 ábra

A (12-18) és a (12-19) összefüggésből látható, hogy az elektronátmenet mindkét esetben lényegileg hidrogénszerű termek, azaz

$$T_n = -R \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} \quad (12-21)$$

alakú termek ( $n$  a főkvantumszám) között jön létre. Mivel pedig a fentiek szerint a  $K_\alpha$ -vonal az  $L$ -héjról a  $K$ -ra, az  $L_\alpha$ -vonal pedig az  $M$ -héjról az  $L$ -re való elektronátmenetnek felel meg, arra a következtetésre juthatunk, hogy a  $K$ -,  $L$ -,  $M$ - ... *héj elektronjaihoz rendre az  $n = 1, 2, 3, \dots$  főkvantumszámok tartoznak*. Az a körülmény továbbá, hogy a  $K$ -héjon lévő elektron termértéke ( $\text{cm}^{-1}$ -ben kifejezett energiája) jó megközelítésben  $[-R(Z-1)^2/1^2]$  érték a  $[-RZ^2/1^2]$  érték helyett, arra utal, hogy a  $K$ -héjon még egy elektron van, amely a  $Ze$  magtöltést az előbbi elektronra vonatkozóan közelítőleg  $(Z-1)e$ -re „árnyékolja le”; általánosan, ezért hívjuk a  $Z^* = Z - \sigma$  mennyiséget *effektív magtöltésszámmak*, a  $\sigma$ -t pedig a *leárnyékolási számmak*. A (12-18)-ban (a  $K_\alpha$ -ra), illetve a (12-19)-ben (az  $L_\alpha$ -ra)  $\sigma = 1$ , illetve  $\sigma = 7,4$  érték alapján arra gondolhatunk, hogy a  $K$ -héjon *legfeljebb két elektron lehet*, az  $L$ -héjon és a további héjakon viszont már lényegesen több.

A fentiek alapján *az optikai és a röntgenspektrumok különbözőségének oka* röviden a következő. Az optikai színek vonalai általában az atom legkülső elektronjainak különböző energiájú „kvantumpályák” közti átmeneteitől származnak, a röntgenspektrumok emissziós vonalai viszont a belső, zárt héjak egyik elektronjának alkalmas gerjesztéssel való eltávolítása után a belső héjak közötti elektronátmenetek révén keletkeznek. Itt a  $Ze$  magtöltés hatása sokkal

jobban érvényesül, ezért az energiakülönbségek s a vonalak frekvenciái sokkal nagyobbak, és növekvő  $Z$  rendszámmal periodicitás nélkül eltolódnak a rövidebb hullámok felé.

c) *Az abszorpciós röntgenspektrum*

A röntgensugárzás az anyagokon való áthaladásnál – ahogyan minden elektromágneses sugárzás – abszorbeálódik és szóródik. Az anyagra jutó  $I_0$  erősségű röntgensugárzás erőssége az átsugárzott réteg  $x$  vastagságával exponenciálisan csökken:

$$I = I_0 e^{-\mu x}, \quad (12-22)$$

ahol  $I_0$  az anyagra jutó,  $I$  pedig a rétegből kilépő sugárzás intenzitása,  $\mu$  az anyag „gyengítési együtthatója”, amely egy *abszorpciós együttható* és egy *szórási együttható* összegére bontható fel. A  $\mu$  mértékéül gyakran a  $d = \mu^{-1} \cdot \ln 2$  félértékvastagságot alkalmazzuk, amely általában az átsugárzott anyagtól és a röntgenfotonok energiájától függ.

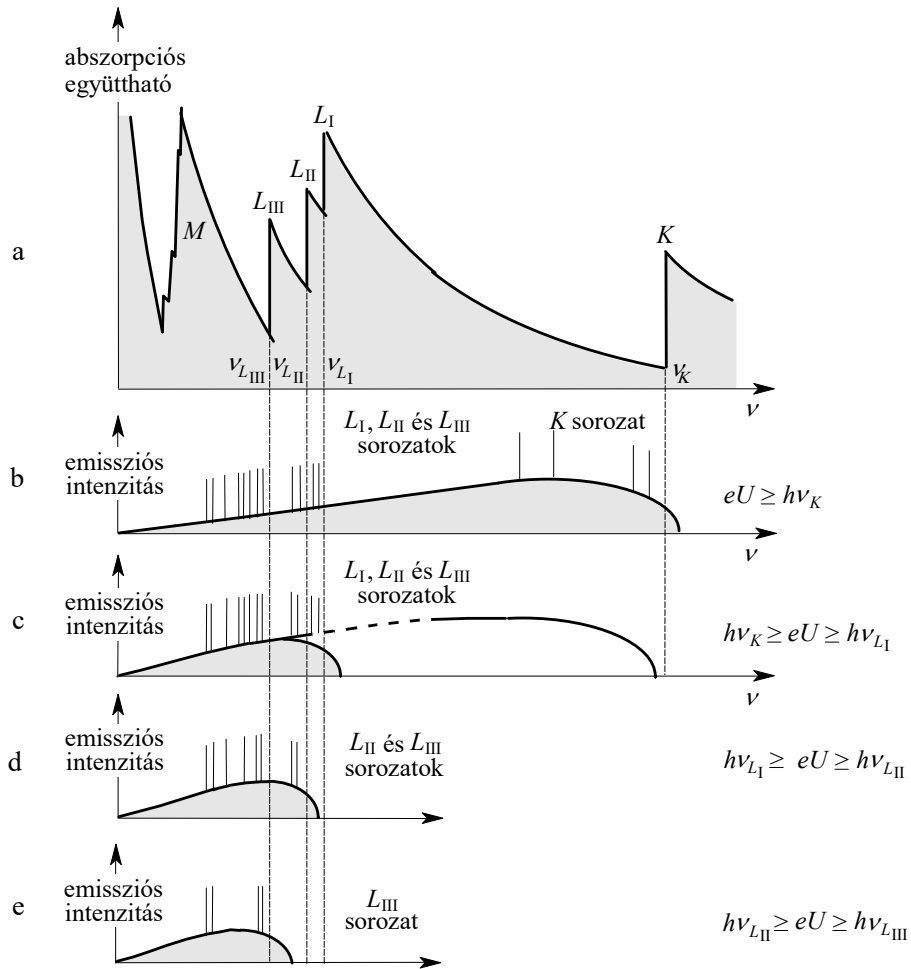
A 12.8 ábrán az abszorpciós együttható kvantumenergiától való függésének, azaz az abszorpciós spektrum spektrális eloszlásának sematikus rajza látható. Berajzoltuk az emissziós spektrumot is, különböző gerjesztési energiáknál.

Tipikus röntgenspektrum esetén az abszorpciós együttható növekvő kvantumenergiánál erősen csökken, és ún. *abszorpciós élek* lépnek fel. Az abszorpciós élek, amelyek bizonyos kvantumenergiáknál (hullámhosszaknál) észlelhetők, az abszorpciós együtthatók meredek növekedését jelentik. Ezek az abszorpciós élek a  $K$ ,  $L$ ,  $M$  stb. sorozatok sorozathatárainak felelnek meg, és amelyeket  $K$ ,  $L$ ,  $M$ , ... éleknek nevezünk.

Az alhéjak is élként – pl.  $L_I$ ,  $L_{II}$ ,  $L_{III}$  – jelennek meg a 12.8 ábrán.

A  $K$ -él hullámszáma ( $\bar{\nu}_{K-\text{él}}$ ) megegyezik az emissziós  $K$ -sorozat rövidhullámú határának, a sorozathoz csatlakozó folytonos színekép végének a hullámszámával. Hasonló vonatkozik a következő élre, az  $L$ -élre és a további élekre is, bár ezek már bonyolultabb szerkezetű „többszörös élek”. A  $K$ -él kivételével az *abszorpciós élek és az emissziós röntgenvonalak is multipliett szerkezetet mutatnak*.

Az abszorpciós röntgenspektrum (nem gerjesztett anyagra vonatkozóan) nem vonalas spektrum, mert pl.  $\bar{\nu}_{K_\alpha}$  és  $\bar{\nu}_{K_\beta}$  hullámszámú diszkrét vonalak csak akkor keletkezhetnek, ha az anyagra eső  $\bar{\nu}_{K_\alpha}$  vagy  $\bar{\nu}_{K_\beta}$  hullámszámú fotonok elnyelése árán egy elektron a  $K$ -héjról az  $L$ - vagy  $M$ -héjra juthatna, de ez a héjak betöltöttsége miatt lehetetlen. A  $\bar{\nu} > \bar{\nu}_{K-\text{határ}}$  hullámszámú fotonokat viszont, mivel ezek a  $K$ -,  $L$ -, ... héjakról a folytonos tartományba emelhetnek elektronokat, az anyag már elnyelheti, és pedig az elnyelés valószínűsége a  $\bar{\nu}$  csökkentésével – az energiakülönbség fogyása miatt – folytonosan nő. Amikor azonban  $\bar{\nu}$  csökkenésekor átlépjük a  $\bar{\nu}_{K-\text{határ}}$ -t, az abszorpciós koefficiensnek hirtelen esnie kell, mert  $\bar{\nu} < \bar{\nu}_{K-\text{határ}}$ -nál a  $K$ -héj elektronjai már nem járulnak hozzá az abszorpcióhoz. Így érthetővé válik az abszorpciós élek keletkezése, valamint az élek és a megfelelő emissziós sorozathatárok hullámszámainak egyenlősége ( $\bar{\nu}_{\text{él}} = \bar{\nu}_{K-\text{határ}}$  stb.) is.



12.8 ábra

### 12.2 Ellenőrző kérdések

- Jellemezze a karakterisztikus röntgensugárzás tulajdonságait! Írja fel Moseley törvényét!
- Hasonlítsa össze az elemek emissziós és abszorpciós röntgen spektrumának jellemzőit!
- Mit jelöl a  $K_{\beta}$  vonal?
- Fejtse ki a Moseley törvény jelentőségét!
- Hasonlítsa össze az optikai és röntgen spektrumokat! Jelölje meg a különbözőségük okát!
- Hol keletkeznek az abszorpciós élek?

## 13. A Pauli-elv és a periódusos rendszer

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a Pauli elvet, illetve a Pauli-elv felállításához vezető kísérleti tapasztalatokat,
- a Pauli-elv alapján képes értelmezni az elektronburok szerkezetét a héjakon, az alhéjakon elhelyezkedő elektronok maximális számát,
- képes értelmezni a periódusos rendszer felépítését, az elemek kémiai, fizikai tulajdonságának periodikus változását,
- elfogadja és vizsgálatai alapján szem előtt tartja a Pauli-elv szerepét az elektronburok felépítését illetően.

Jelen fejezetben ismertetjük a Pauli-elv felállításához vezető kísérleti tapasztalatokat. A Pauli-elv kimondása után elemezzük a Pauli-féle kizárási elv következményeit az elektronburok felépítésére vonatkozóan; bevezetjük a héj, illetve az alhéj fogalmát. Ezek ismeretében értelmezzük a periódusos rendszer szerkezetét, illetve az elemek tulajdonságainak periodikus változását.

### 13.1 A Pauli-elv

Az atomok vektormodellje szerint az atomok bármelyik elektronjának az állapota négy független kvantumszámmal jellemezhető. Ez a négy kvantumszám:

- $n$  főkvantumszám,
- $l$  mellékvantumszám,
- $m_l$  mágneses-kvantumszám, amely  $l$  pályaimpulzusmomentumnak egy külső mágneses vagy elektromos tér irányára irányára való vetületét szabja meg,
- $m_s$  spin-kvantumszám, amely az  $s$  spinnek egy külső mágneses vagy elektromos tér irányára való vetületét bhatározza meg.

Megjegyezzük, hogy a négy kvantumszámot a következőképpen is választhatjuk:  $n, l, j, m_j$  (ahol  $j$  a belső kvantumszám,  $m_j$  a  $j$  vektor vetületére vonatkozó mágneses kvantumszám).

A kvantumszámokkal összefüggő spektroszkópiai tapasztalatok alapján állította fel Pauli – mint azt már korábban említettük – a következő, egyebek közt az atomszerkezet és a periódusos rendszer értelmezésénél rendkívül jelentősnek bizonyult elvet: *az atomnak a természetben csak olyan állapotai jöhetnek szóba, amelyeknél az atom két tetszésszerű elektronjának kvantumszámait legalább egy kvantumszámban különböztetik meg.* Ez a feltétel korlátozásokat jelent az atomi állapot kvantumszámainak lehetséges kombinációira.

Tapasztalati tény, hogy a héliumatomnak csak egyetlen (szingulett)  $1^1S$  alapállapota van, a tripllett  $1^3S$  alapállapota azonban hiányzik. Nagyobb energiájú állapotokban mind a tripllett, mind a szingulett termék léteznek.

A He legkisebb energiájú vagy alapállapotában mindkét elektron főkvantumszáma  $1$ :  $n_1 = n_2 = 1$ . Ekkor, mivel  $l$  legfeljebb  $n - 1$  lehet,  $l_1 = l_2 = 0$ , és így  $m_{l_1} = m_{l_2} = 0$ . Ezért  $m_{s_1} = +1/2$  esetén  $m_{s_2} = -1/2$  (illetve  $m_{s_1} = -1/2$  esetén  $m_{s_2} = +1/2$ ), mert ha  $m_{s_1} = m_{s_2} = +1/2$  vagy  $-1/2$  lenne, mind a négy kvantumszám megegyeznék. A két elektron spinje tehát

antiparalel, és így a vektormodell szerint az eredő  $\mathbf{S}$  spin kvantumszáma zérus:  $S=0$ . Hasonlóan az eredő  $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$  pályamomentum és a teljes  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  impulzusmomentum kvantumszáma is:  $L=0$ ,  $J=0$ . Következésképpen – az ismert jelölésekkel – a He alaptermje  $^1S_0$  term, pontosabban  $(1s)^2\ ^1S_0$  term, ahol az  $(1s^2)$  vagy  $(1s1s)$  szimbólum az elektronkonfigurációt, vagyis a jelen esetben azt jelzi, hogy mindkét elektron  $n$ -je 1 és  $l$ -je 0. Ha a He-atom két elektronjának spinje párhuzamos lenne ( $m_{s_1} = m_{s_2} = +1/2$  vagy  $-1/2$ ,  $S=1$ ), vagyis ha mind a négy kvantumszám megegyezne, akkor létrejönne a megfelelő  $(1s^2)$   $^3S$  tripllett term. A héliumspektrum tanúsága szerint azonban ilyen term – a He-atom alapállapotában – a valóságban nem létezik. Ennek a termnek a hiánya volt a fő indítéka a Pauli-elv kimondására. A Pauli-elv a lehetséges termek számát korlátozza, ezért „kizárási” elv.

A példából az is látható, hogy az  $n = 1$  főkvantumszámmal legfeljebb 2 elektron rendelkezhet: ha egy harmadik elektron  $n$ -je is 1 lenne, ebből  $(n_3, l_3, m_{l3}, m_{s3}) = (1, 0, 0, \pm 1/2)$  következne, és ez a kvantumszám-négyes az előző két elektron egyikével azonos lenne. Emlékeztetve arra, hogy az  $n = 1, 2, 3, \dots$  főkvantumszámoknak rendre a  $K-, L-, M-, \dots$  héjak, az  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  mellékkvantumszámoknak pedig rendre az  $s-, p-, d-, f-, \dots$  elektronok felelnek meg. Más szavakkal ez azt jelenti, hogy a  $K$ -héjon legfeljebb két elektron, nevezetesen két  $s$ -elektron lehet. Az  $L$ -héj a 13.1 táblázatból láthatóan legfeljebb 8 elektront tartalmazhat:  $2s$ - és  $6p$ -elektront. Általánosan, adott  $(n, l)$  esetén  $2l+1$  különböző  $m_l$ -érték lehetséges ( $m_l = l, l-1, \dots, -l$ ), és mivel ezek mindegyike  $m_s = \pm 1/2$ -del párosulhat, ezért az ugyanazon  $(n, l)$ -ű vagy „ekvivalens elektronok” maximális száma  $2(2l+1)$ . Az adott  $n$  főkvantumszámú elektronok maximális száma  $2n^2$ , mert  $l = 0, 1, \dots, n-1$  lehet, és így a kérdéses szám:

$$N_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2[1+3+\dots+(2n-1)] = 2n^2 \quad (13-1)$$

összefüggés alapján kapható.

Innen  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ -re kapjuk, hogy a  $K-, L-, M-, N-, \dots$  héjon rendre legfeljebb 2, 8, 18, 32, ... elektron foglalhat helyet.

$n$	$l$	$m_l$	$m_s$	Elektronok száma	Elektronok típusa
2	0	0	$\pm 1/2$	2	$s$
	1	+1 0 -1	$\pm 1/2$	6	$p$

13.1 táblázat

Az ugyanazon  $n$ -ű és  $l$ -ű, azaz ekvivalens elektronok ún. alhéjat (alcsoportot) képeznek, pl. a 13.1 táblázat szerint az  $L$ -héj az  $(n, l) = (2, 0)$  és  $(2, 1)$ , illetve más jelöléssel a  $2s$  és  $2p$  alhéjakból áll. Mivel az előzőek alapján az  $(n, l)$  ekvivalens elektronok maximális száma  $2(2l+1)$ ,  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ -ra adódik az: az  $s-, p-, d-, f-, \dots$  alhéjak rendre legfeljebb 2, 6, 10, 14, ... elektront tartalmazhatnak.

A He példájában láttuk, hogy a  $K$ -héjat – és egyúttal az  $s$ -alhéjat – betöltő két elektron  $l_i$  és  $s_i$  vektorainak összetevéséből  $L = 0, S = 0, J = 0$  származik. Általánosan fennáll a következő tétel:

Egy teljesen betöltött (lezárt) alhéj vagy héj elektronjainak eredő pályá- és spin-momentuma zérus ( $L = 0$ ,  $S = 0$ , és így  $J = 0$ ; a term  $^1S_0$  term), más szóval a lezárt alhéj vagy héj az atom „vektorszerkezetéhez” semmivel sem járul hozzá. Eszerint az atomtermeknek a vektormodell segítségével való megállapításánál csak a zárt (al)héjakon kívüli elektronokat kell figyelembe venni, pl. 56 elektron helyett csak kettőt, ha tudjuk, hogy a többi elektron zárt al(héjakat) képez.

### 13.2 A periódusos rendszer értelmezése

Az elemek optikai és röntgenspektrumainak és egyéb tulajdonságainak figyelembe vételével a Bohr-elmélet megalapozta, majd a Pauli-elv kimondása után lehetővé tette a periódusos rendszer értelmezését, azaz annak magyarázatát, hogy az elemek legtöbb kémiai és számos fizikai sajátága a rendszám növekedésével periodikusan ismétlődik.

A feladat lényegileg annak megállapítása, hogy a  $Z$  rendszámú atomban, illetve elsősorban az atom alapállapotában – normális körülmények közt az atom ebben a legkisebb energiájú állapotban van – milyen az elektronburok szerkezete, konkrétan az elektronkonfiguráció.

Megvizsgáljuk, hogyan csoportosíthatók az elektronok az  $n$  fő- és az  $l$  mellékvantumszám értékei szerint, vagy szemléletesebben, hogyan oszlanak el az  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$  értékekhez tartozó K-, L-, M-, ... héjakon és az  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  értékének megfelelő  $s, p, d, f, \dots$  alhéjakon (alcsoportokban).

A probléma megoldása a Bohr-féle „felépítési elv” alapján lehetséges: kiindulva a hidrogén atomból ( ${}_1\text{H}$ ) – amelynek az elektronja alapállapotban az  $n_l = 1_0$  pályán van – gondolatban a magtöltést 1-gyel növeljük, az elektronhoz hozzáveszünk egy másik elektront, és megvizsgáljuk, milyen pályán kell ennek lennie, hogy a hélium atomnak ( ${}_2\text{He}$ ) a spektrumból ismert alapállapot jöjjön létre. Az eljárás lépésenkénti folytatása ( ${}_3\text{Li}, {}_4\text{Be}, \dots$ ) során figyelembe vesszük a Pauli-elvet, és alkalmazzuk azt a kevés kivétellel helyesnek bizonyult feltevést, hogy a további elektron hozzávétele az előzők elrendeződését nem változtatja meg. A módszert alább vázoljuk, utalva a periódusos rendszerre vonatkozó 13.2 táblázatra.

Az 1. *periodus* a hidrogén atom ( ${}_1\text{H}$ ) alapállapotában az elektron kvantumszámjai:  $n = 1, l = 0$  (és  $j = \frac{1}{2}$ ), más szóval az elektron  $1s$  elektron, és az alapterm  $^2S_{1/2}$  term.

A hélium atom ( ${}_2\text{He}$ ) alapállapotában a két elektron egyike feltétlenül  $1s$  elektron, mert a  $\text{He}^+$  spektrum teljesen hasonló a H-éhoz. Ha most a felépítési elv értelmében  $\text{He}^+$ -hoz egy elektront hozzáveszünk, ennek az alapállapotában szintén  $1s$ , de az előzővel ellentétes spinű elektronnak kell lennie, mert csak így kapjuk meg a spektrumban megfigyelt és a Pauli-elvnek is megfelelő  $^1S_0$  alaptermet. A héliummal – egy nemesgázzal – lezárul az 1. *periodus*, a két  $1s$  elektronnal betöltődik a K-héj.

PERIÓDUS CSOPORT	s-elemek		AZ ELEMEK PERIÓDUSOS RENDSZERE																p-elemek																	
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	VIII	VIII	I	II	III	IV	V	VI	VII	0																		
K	1 <b>H</b> 1 Hidrogén		relatív atomtömeg ——— 26,98 vegyjel ——— <b>Al</b> rendszám ——— 13 ——— az elektronok eloszlása az energiaszinteken Alumínium																					4,00 <b>He</b> 2 Hélium												
L	2 <b>Li</b> 3 Lítium	<b>Be</b> 4 Berillium																	10,81 <b>B</b> 5 Bór	12,01 <b>C</b> 6 Szén	14,01 <b>N</b> 7 Nitrogén	16,00 <b>O</b> 8 Oxigén	19,00 <b>F</b> 9 Fluor	20,18 <b>Ne</b> 10 Neon												
M	3 <b>Na</b> 11 Nátrium	<b>Mg</b> 12 Magnézium																							26,98 <b>Al</b> 13 Alumínium	28,09 <b>Si</b> 14 Szilícium	30,97 <b>P</b> 15 Foszfor	32,07 <b>S</b> 16 Kén	35,45 <b>Cl</b> 17 Klór	39,95 <b>Ar</b> 18 Argon						
N	4 <b>K</b> 19 Kálium	<b>Ca</b> 20 Kalcium	<b>Sc</b> 21 Szakandium	<b>Ti</b> 22 Titán	<b>V</b> 23 Vanádium	<b>Cr</b> 24 Króm	<b>Mn</b> 25 Mangán	<b>Fe</b> 26 Vas	<b>Co</b> 27 Kobalt	<b>Ni</b> 28 Nikkel	<b>Cu</b> 29 Réz	<b>Zn</b> 30 Cink	<b>Ga</b> 31 Gallium	<b>Ge</b> 32 Germanium	<b>As</b> 33 Arzén	<b>Se</b> 34 Szelén	<b>Br</b> 35 Brom	<b>Kr</b> 36 Kripton	39,10 <b>K</b>	40,08 <b>Ca</b>	44,96 <b>Sc</b>	47,90 <b>Ti</b>	50,94 <b>V</b>	52,00 <b>Cr</b>	54,94 <b>Mn</b>	55,85 <b>Fe</b>	58,93 <b>Co</b>	58,71 <b>Ni</b>	63,55 <b>Cu</b>	65,39 <b>Zn</b>	69,72 <b>Ga</b>	72,59 <b>Ge</b>	74,92 <b>As</b>	78,96 <b>Se</b>	79,90 <b>Br</b>	83,80 <b>Kr</b>
O	5 <b>Rb</b> 37 Rubidium	<b>Sr</b> 38 Stroncium	<b>Y</b> 39 Ittrium	<b>Zr</b> 40 Cirkónium	<b>Nb</b> 41 Niobium	<b>Mo</b> 42 Molibdén	<b>Tc</b> 43 Technécium	<b>Ru</b> 44 Ruténium	<b>Rh</b> 45 Ródium	<b>Pd</b> 46 Palládium	<b>Ag</b> 47 Ezüst	<b>Cd</b> 48 Kadmium	<b>In</b> 49 Indium	<b>Sn</b> 50 Ón	<b>Sb</b> 51 Antimon	<b>Te</b> 52 Tellúr	<b>I</b> 53 Jód	<b>Xe</b> 54 Xenon	85,47 <b>Rb</b>	87,62 <b>Sr</b>	88,91 <b>Y</b>	91,22 <b>Zr</b>	92,91 <b>Nb</b>	95,94 <b>Mo</b>	98,91 <b>Tc</b>	101,07 <b>Ru</b>	102,91 <b>Rh</b>	106,4 <b>Pd</b>	107,87 <b>Ag</b>	112,41 <b>Cd</b>	114,82 <b>In</b>	118,71 <b>Sn</b>	121,75 <b>Sb</b>	127,60 <b>Te</b>	126,90 <b>I</b>	131,30 <b>Xe</b>
P	6 <b>Cs</b> 55 Cézium	<b>Ba</b> 56 Bárium	<b>57-71</b>	<b>Hf</b> 72 Háfnium	<b>Ta</b> 73 Tantál	<b>W</b> 74 Volfrám	<b>Re</b> 75 Rénium	<b>Os</b> 76 Ozmium	<b>Ir</b> 77 Iridium	<b>Pt</b> 78 Platina	<b>Au</b> 79 Arany	<b>Hg</b> 80 Higany	<b>Tl</b> 81 Tallium	<b>Pb</b> 82 Ólom	<b>Bi</b> 83 Bizmut	<b>Po</b> 84 Polónium	<b>At</b> 85 Asztácium	<b>Rn</b> 86 Radon	132,91 <b>Cs</b>	137,33 <b>Ba</b>	<b>57-71</b>	178,49 <b>Hf</b>	180,95 <b>Ta</b>	183,85 <b>W</b>	186,21 <b>Re</b>	190,2 <b>Os</b>	192,22 <b>Ir</b>	195,09 <b>Pt</b>	196,97 <b>Au</b>	200,59 <b>Hg</b>	204,37 <b>Tl</b>	207,2 <b>Pb</b>	208,98 <b>Bi</b>	209 <b>Po</b>	210 <b>At</b>	222 <b>Rn</b>
Q	7 <b>Fr</b> 87 Francium	<b>Ra</b> 88 Rádium	<b>89-103</b>	<b>Rf</b> 104 Raterfordium	<b>Ha</b> 105 Hanium	<b>Unh</b> 106 Unnihexium	<b>Uns</b> 107 Unnilseptium	<b>Uno</b> 108 Unniloctium	<b>Une</b> 109 Unnilennium	*Az elemek ideiglenes elnevezése -104 Rf-Ratherfordium - 104 Ku-Kurtschatovium -105 Ha-Hanium - 105 Ns-Nielsbohrium									223 <b>Fr</b>	226,03 <b>Ra</b>	<b>89-103</b>	261 <b>Rf</b>	262 <b>Ha</b>	263 <b>Unh</b>	262 <b>Uns</b>	265 <b>Uno</b>	266 <b>Une</b>									
			f-elemek																																	
LANTANOIDÁK			138,91 57 Lantán	140,12 58 Cérium	140,91 59 Prazeodimium	144,24 60 Neodimium	145 61 Promethium	150,4 62 Szamádium	151,96 63 Europium	157,25 64 Gadolinium	158,93 65 Terbium	162,50 66 Diszprórium	164,93 67 Holmium	167,26 68 Erbium	168,93 69 Tulium	173,04 70 Itterbium	174,97 71 Lutécium																			
AKTINOIDÁK			227,03 89 Aktínium	232,04 90 Tórium	231,04 91 Protaktínium	238,03 92 Urán	237,05 93 Neptúnium	244 94 Plutónium	243 95 Americium	247 96 Kúrium	247 97 Berkélium	251 98 Kalifornium	254 99 Einsteinium	257 100 Fermium	258 101 Mendelévium	259 102 Nobélium	260 103 Laurencium																			

13.2 táblázat Az elemek periódusos rendszere

<https://sites.google.com/site/kemiaperiodusosrendszer/a-periodusos-rendszer-felepítése>

A 2. *periodust* kezdő litium atom ( ${}_{3}\text{Li}$ ) harmadik elektronja a Pauli-elv szerint már nem lehet a K-héjon, hanem a következő legkisebb energiájú  $n = 2$  pályán van, vagyis az L-héjon mint  $2s$  elektron; ezt bizonyítja a Li spektrumnak a He-hez való hasonlósága is. Így a teljes elektronkonfiguráció  $(1s)^22s$  az alapterm pedig  ${}^2\text{S}_{1/2}$ .

A berillium atom ( ${}_{4}\text{Be}$ ) negyedik elektronja szintén  $2s$ , de a harmadikéval ellentétes spinű elektron, amellyel lezárul az L-héj  $2s$  alhéja és így az alapterm  ${}^1\text{S}_0$ .

A bróm atom ( ${}_{5}\text{B}$ ) ötödik elektronja a  $2p$  alhéjra kerül, amely tudvalevően hat elektront tartalmazhat, úgyhogy a neon atom ( ${}_{10}\text{Ne}$ ) tizedik elektronjával a  $2p$  alhéj és egyúttal az L-héj is telítődik.

A 3. *periodusban* a  ${}_{11}\text{Na}$ -nál megkezdődik az M-héj felépítése, és teljesen hasonlóan folytatódik, mint az L-héjé a 2. periodusban: a  ${}_{12}\text{Mg}$ -ban lezárul a két elektrontól álló  $3s$  alhéj, a  ${}_{18}\text{Ar}$ -ban pedig a hat elektront tartalmazó  $3p$  alhéj.

A 4. *periódusban* feltűnő – de spektroszkópiái és más tapasztalatok bizonyítják –, hogy előbb az N-héj  $4s$  alcsoportja épül fel a  ${}_{19}\text{K}$ -ban és a  ${}_{20}\text{Ca}$ -ban, és csak ezután a  ${}_{21}\text{Sc}$ -ban kezdődik meg az M-héj  $3d$  alhéjának a betöltése. Ennek az a magyarázata, hogy egy  $4s$  elektron energiája kisebb, mint egy  $3d$  elektroné (ld. a 13.1. ábra első oszlopát). A  $3d$  alhéj – a  ${}_{24}\text{Cr}$ -nál és a  ${}_{29}\text{Cu}$ -nál mutatkozó „szabálytalanság” után – a  ${}_{30}\text{Zn}$ -nél telítődik; a  ${}_{31}\text{Ga}$ -tól a  ${}_{36}\text{Kr}$  nemesgázig bezárólag az N-héj  $4p$  alcsoportja alakul ki.

Az ún. átmeneti elemek a  ${}_{21}\text{Sc}$ -tól a  ${}_{28}\text{Ni}$ -ig a nem betöltött belső héjuknak köszönhetik különleges tulajdonságaikat, pl. a színüket és paramágnesességüket. A kémiai vegyértéket a külső vegyértékelektronok határozzák meg. Mivel energetikailag a belső  $3d$  elektronok nagyon közeli szomszédok, az átmeneti elemek  $3d$ -elektronjai a héjak között cserélődnek, ily módon különféle vegyértékűek lesznek.

Az 5. *periódus* hasonló a 4-hez; a  ${}_{37}\text{Rb}$ -ben és a  ${}_{38}\text{Sr}$ -ban az O-héj  $5s$  alhéja, majd a  ${}_{39}\text{Y}$ -tól a  ${}_{49}\text{Pd}$ -ig (a 13.3. táblázatból látható „szabálytalanságok” beiktatásával) az N-héj  $4d$  alhéja épül fel, ezután újból az  $5s$  és végül az  $5p$  alhéj, amely az  ${}_{54}\text{Xe}$  nemesgázzal lezárul.

A 6. *periódus* első két elemében ( ${}_{55}\text{Cs}$  és  ${}_{56}\text{Ba}$ ) a  $p$ -héj  $6s$  alcsoportja alakul ki, az  ${}_{57}\text{La}$ -ban pedig a további elektron az  $5d$  alhéjra kerül. Ez az alhéj azonban egyelőre nem töltődik tovább, hanem a következő 14 elemben, az egymáshoz nagyon hasonló viselkedésű *ritkaföldfémekben* vagy *lantanoidákban* ( ${}_{58}\text{Ce}$  -  ${}_{71}\text{Lu}$ ) a még belsőbb N-héj  $4f$  alcsoportja épül fel, amely a Pauli-elv szerint éppen 14 elektronnal telítődik. A  ${}_{72}\text{Hf}$ -nál folytatódik az  $5d$  alhéjnak, a  ${}_{81}\text{Tl}$ -nál pedig elkezdődik a  $6p$  alhéjnak a betöltődése, amely a periódust záró  ${}_{86}\text{Rn}$  nemesgáznál fejeződik be.

A 7. *periódusban* az első három elem ( ${}_{87}\text{Fr}$ ,  ${}_{88}\text{Ra}$ ,  ${}_{89}\text{Ac}$ ) egy-egy további elektronja rendre a  $7s$ ,  $7s$ ,  $6d$  alhéjon van, majd a következő 14 elemben, az *aktinidákban* ( ${}_{90}\text{Th}$  -  ${}_{103}\text{Lw}$ , köztük a  ${}_{92}\text{U}$  után következő, mesterségesen előállított *transzurán elemekben*) fokozatosan az  $5f$  alhéj épül fel.

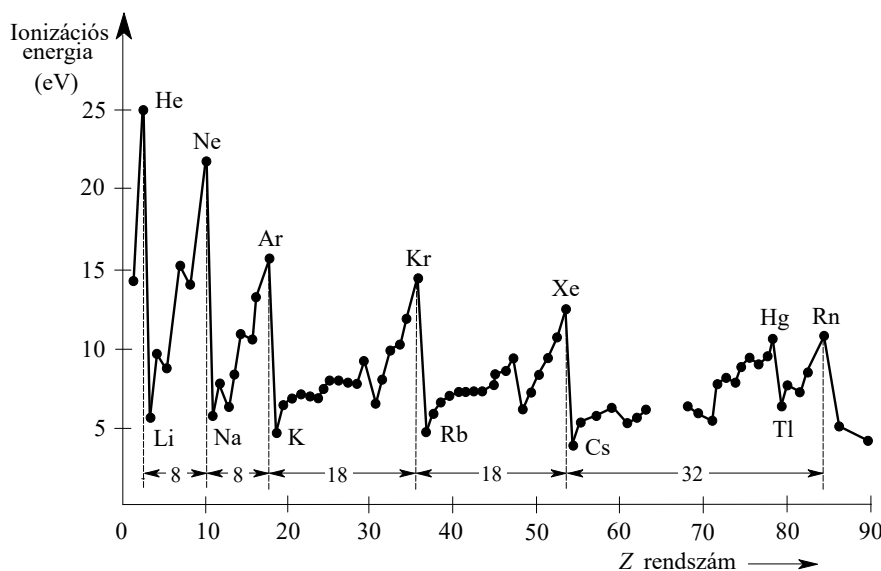


Periódus	Héj	K	L	M	N	O	P	Q	Alapállapot	Ionizációs energia (eV)
	Alcsoport Elem	n=1 s	n=2 s p	n=3 s p d	n=4 s p d f	n=5 s p d f	n=6 s p d	n=7 s		
1.	1H	1							$^2S_{1/2}$	13,60
	2He	2							$^1S_0$	24,58
2.	3Li	2	1						$^2S_{1/2}$	5,39
	4Be	2	2						$^1S_0$	9,32
	5B	2	2	1					$^2P_{1/2}$	8,30
	6C	2	2	2					$^3P_0$	11,26
	7N	2	2	3					$^4S_{3/2}$	14,54
	8O	2	2	4					$^3P_2$	13,61
	9F	2	2	5					$^2P_{3/2}$	17,42
	10Ne	2	2	6					$^1S_0$	21,56
3.	11Na	2	2	6	1				$^2S_{1/2}$	5,14
	12Mg	2	2	6	2				$^1S_0$	7,64
	13Al	2	2	6	2	1			$^2P_{1/2}$	5,98
	14Si	2	2	6	2	2			$^3P_0$	8,15
	15P	2	2	6	2	3			$^4S_{3/2}$	10,55
	16S	2	2	6	2	4			$^3P_2$	10,36
	17Cl	2	2	6	2	5			$^2P_{3/2}$	13,01
	18Ar	2	2	6	2	6			$^1S_0$	15,76
4.	19K	2	2	6	2	6	1		$^2S_{1/2}$	4,34
	20Ca	2	2	6	2	6	2		$^1S_0$	6,11
5.	21Sc	2	2	6	2	6	1	2	$^2D_{3/2}$	6,56
	22Ti	2	2	6	2	6	2	2	$^3F_2$	6,83
	23V	2	2	6	2	6	3	2	$^4F_{3/2}$	6,74
	24Cr	2	2	6	2	6	5	1	$^7S_3$	6,76
	25Mn	2	2	6	2	6	5	2	$^6S_{5/2}$	7,43
	26Fe	2	2	6	2	6	6	2	$^5D_4$	7,90
	27Co	2	2	6	2	6	7	2	$^4F_{9/2}$	7,86
	28Ni	2	2	6	2	6	8	2	$^3F_4$	7,63
	29Cu	2	2	6	2	6	10	1	$^2S_{1/2}$	7,72
	30Zn	2	2	6	2	6	10	2	$^1S_0$	9,39
6.	31Ga	2	2	6	2	6	10	2	$^2P_{1/2}$	6,00
	32Ge	2	2	6	2	6	10	2	$^3P_0$	7,88
	33As	2	2	6	2	6	10	2	$^4S_{3/2}$	9,81
	34Se	2	2	6	2	6	10	2	$^3P_2$	9,75
	35Br	2	2	6	2	6	10	2	$^2P_{3/2}$	11,84
	36Kr	2	2	6	2	6	10	2	$^1S_0$	14,00
7.	37Rb	2	2	6	2	6	10	2	$^2S_{1/2}$	4,18
	38Sr	2	2	6	2	6	10	2	$^1S_0$	5,69
8.	39Y	2	2	6	2	6	10	2	$^2D_{3/2}$	6,38
	40Zr	2	2	6	2	6	10	2	$^3F_2$	6,84
	41Nb	2	2	6	2	6	10	2	$^6D_{1/2}$	6,88
	42Mo	2	2	6	2	6	10	2	$^7S_3$	7,13
	43Tc	2	2	6	2	6	10	2	$^6D_{9/2}$	7,23
	44Ru	2	2	6	2	6	10	2	$^5F_5$	7,37
	45Rh	2	2	6	2	6	10	2	$^4F_{9/2}$	7,46
	46Pd	2	2	6	2	6	10	2	$^1S_0$	8,33
	47Ag	2	2	6	2	6	10	2	$^2S_{1/2}$	7,57
	48Cd	2	2	6	2	6	10	2	$^1S_0$	8,99
9.	49In	2	2	6	2	6	10	2	$^2P_{1/2}$	5,79

	50Sn	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 2			$^3P_0$	7,33
	51Sb	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 3			$^4S_{3/2}$	8,64
	52Te	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 4			$^3P_2$	9,01
	53I	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 5			$^2P_{3/2}$	10,44
↓	54Xe	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 6			$^1S_0$	12,13
↑	55Cs	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 6	1		$^2S_{1/2}$	3,89
	56Ba	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 6	2		$^1S_0$	5,21
	57La	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 6 1	2		$^2D_{3/2}$	5,61
	58Ce	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 2 6	2		$^3H_4$	5,6
	59Pr	2	2 6	2 6 10	2 6 10	3 2 6	2		$^4I_{9/2}$	5,46
	60Nd	2	2 6	2 6 10	2 6 10	4 2 6	2		$^5I_4$	5,51
	61Pm	2	2 6	2 6 10	2 6 10	5 2 6	2		$^6H_{5/2}$	
	62Sm	2	2 6	2 6 10	2 6 10	6 2 6	2		$^7F_0$	5,6
	63Eu	2	2 6	2 6 10	2 6 10	7 2 6	2		$^8S_{7/2}$	5,67
	64Gd	2	2 6	2 6 10	2 6 10	7 2 6 1	2		$^9D_2$	6,16
	65Tb	2	2 6	2 6 10	2 6 10	9 2 6	2		-----	5,98
	66Dy	2	2 6	2 6 10	2 6 10	10 2 6	2		$^5I_8$	6,8
	67Ho	2	2 6	2 6 10	2 6 10	11 2 6	2		$^4I_{15/2}$	
	68Er	2	2 6	2 6 10	2 6 10	12 2 6	2		$^3H_6$	6,08
	69Tm	2	2 6	2 6 10	2 6 10	13 2 6	2		$^2F_{7/2}$	5,81
	70Yb	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6	2		$^1S_0$	6,22
6.	71Lu	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 1	2		$^2D_{3/2}$	6,15
	72Hf	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 2	2		$^3F_2$	5,5
	73Ta	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 3	2		$^4F_{3/2}$	7,7
	74W	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 4	2		$^5D_0$	7,98
	75Re	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 5	2		$^6S_{5/2}$	7,87
	76Os	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 6	2		$^5D_4$	8,7
	77Ir	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 9			$^2D_{5/2}$	9,2
	78Pt	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 9	1		$^3D_3$	9,0
	79Au	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	1		$^2S_{1/2}$	9,22
	80Hg	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2		$^1S_0$	10,43
	81Tl	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 1		$^2P_{1/2}$	6,11
	82Pb	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 2		$^3P_0$	7,42
	83Bi	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 3		$^4S_{3/2}$	7,29
	84Po	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 4		$^3P_2$	8,43
	85At	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 5			9,5
↓	86Rn	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 6		$^1S_0$	10,75
↑	87Fr	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 6	1		4
	88Ra	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 6	2		5,28
	89Ac	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 6 1	2		
	90Th	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 6 2	2		
	91Pa	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	2 2 6 1	2		
	92U	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	3 2 6 1	2		
	93Np	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	4 2 6 1	2		
	94Pu	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	6 2 6	2		
	95Am	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	7 2 6	2		
7.	96Cm	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	7 2 6 1	2		
	97Bk	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	8 2 6 1	2		
	98Cf	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	10 2 6	2		
	99Es	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	11 2 6	2		
	100Fm	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	12 2 6	2		
	101Mv	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	13 2 6	2		
	102No	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	14 2 6	2		
	103Lw	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	14 2 6 1	2		
	104	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	14 2 6 2	2		
↓	105	2	2 6	2 6 10	2 6 10	14 2 6 10	14 2 6 3	2		

13.3 táblázat

Az elektronburok héjszerkezetének egyik legmeggyőzőbb bizonyítéka a 13.3 táblázat utolsó oszlopában feltüntetett *ionizációs energiának* – az atom legkönnyebben leválasztható elektronjának eltávolításához szükséges energiának – a rendszámmal való periodikus változása (13.1 ábra). Így pl. a  ${}^2\text{He}$ -ről a  ${}^3\text{Li}$ -ra, a  ${}_{10}\text{Ne}$ -ről a  ${}_{11}\text{Na}$ -ra, az  ${}_{18}\text{Ar}$ -ról a  ${}_{19}\text{K}$ -ra való áttéréskor jelentkező erős csökkenés arra mutat, hogy a Li 3-ik, a Na 11-ik, a K 19-ik elektronjának a többinél sokkal lazábban kötött, a magtól távolabb lévő elektronnak kell lennie. Hasonló következtetésre jutunk a röntgenspektrumokból meghatározható  $\sigma$  leárnyékolási számnak a rendszámmal való változásából is.



13.1. ábra Az ionizációs energiának a  $Z$  rendszámtól való függése

Az elektroneloszlásra vonatkozó 13.3. táblázatból kitűnik, hogy az elemek periodikus tulajdonságai lényegében a legkülső elektronhéj szakaszos ismétlődésére vezethetők vissza; más szavakkal, az egymáshoz hasonló viselkedésű elemek atomjaiban a külső elektronok száma és elrendeződése (típusa) megegyezik. Így pl. az alkálifémeket ( ${}^3\text{Li}$ ,  ${}_{11}\text{Na}$ ,  ${}_{19}\text{K}$ , ...) egy  $s$  típusú külső elektron jellemzi, az alkáliföldfémeket ( ${}^4\text{Be}$ ,  ${}_{12}\text{Mg}$ ,  ${}_{20}\text{Ca}$ , ...) két  $s$ , a halogéneket ( ${}^9\text{F}$ ,  ${}_{17}\text{Cl}$ ,  ${}_{35}\text{Br}$ , ...) két  $s$  és öt  $p$ , a nemesgázokat pedig (a héliumtól eltekintve,  ${}_{10}\text{Ne}$ ,  ${}_{18}\text{Ar}$ ,  ${}_{36}\text{Kr}$ , ...) két  $s$  és hat  $p$  típusú külső elektron. Az utóbbi, röviden  $s^2p^6$ -tal jelölt nemesgáz-konfiguráció igen stabilis, a nagy ionizációs energiának megfelelően.

### 13.3 Ellenőrző kérdések

- Hány független kvantumszámmal jellemezhető egy atomi környezetben lévő elektron?
- Mondja ki a Pauli-elvet!
- Milyen kísérleti megfigyelések vezettek a Pauli-elv felállításához?
- Miért tekinthető a Pauli-elv kizárási elvnek?
- Hány elektron lehet a  $K$ ,  $L$ ,  $M$ ,  $N$  héjakon?
- Mi az alhéj definíciója?
- Mi az elektronok maximális száma az  $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$  alhéjakon?

- Értelmezze vázlatosan a periódusos rendszer szerkezetét a Pauli-elv segítségével!

## 14. A molekulaszpektrumok

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a molekulák forgásából, illetve rezgéséből eredő diszkrét energianívók tulajdonságait, az átmenetek számát korlátozó kiválasztási szabályokat,
- ismeri az elektron-, a rezgési és a forgási energiák „kapcsolódására”, illetve az ilyen kombinált átmenetekre vonatkozó szabályokat,
- képes értelmezni a spektrális mérésekből származtatható – a molekulák felépítésére, mozgására vonatkozó – következtetéseket,
- elfogadja és vizsgálatait alapján szem előtt tartja az atomi és molekula spektrumok közötti különbségeket, illetve ezek eredetét.

Jelen fejezetben ismertetjük a molekulák spektrumának – az atomi spektrumoktól eltérő – jellegzetességeit. Megismerjük a molekulák forgásából, illetve rezgéséből eredő diszkrét energianívók tulajdonságait, a „tiszta”, illetve a „kombinált” átmenetekre vonatkozó szabályokat. A fejezetben helyet kapnak a spektrális mérésekből – a molekulák felépítésére, mozgására vonatkozó – következtetések.

A molekulák szerkezetére vonatkozó ismereteink jelentős részét molekuláris gázok emissziós és abszorpciós színepei szolgáltatják. A következőkben csak a kétatomos molekulák színepeinek osztályozását és legfőbb vonásait tekintjük át modellszerű elképzelés alapján.

### 14.1 A molekula energia nívói

A molekulában az elektronok mozgásán kívül az atommagok rezgéseket végeznek a magokat összekötő molekulatengely mentén, bizonyos egyensúlyi  $r$  magtávolság környezetében, továbbá az egész molekula forog  $S$  súlypontján átmenő, a molekulatengelyre merőleges tengely körül. (A molekula translációs mozgásától eltekintünk, mert ez csak a színeképvonalak szélességét befolyásolja a Doppler-effektus miatt.) Ezért közelítőleg – a háromfajta mozgás közti kölcsönhatás elhanyagolásával – a molekula teljes energiája az elektron-, a rezgési és a forgási energia összege, vagyis:

$$T = T_{el} + T_{oszc} + T_{rot}. \quad (14-1)$$

Az itt nem részletezendő kvantumelméleti számítások szerint mind a három energia általában csak diszkrét, „kvantált” értéket vehet fel. Nevezetesen (mint azt a 14.1 ábrán vázolt forgó „súlyzó” vagy rotátor kvantumelmélete kimutatja), a *forgási* vagy *rotációs energia*:

$$T_{rot} = BJ(J+1), \quad (14-2)$$

ahol  $J = 0, 1, 2, \dots$  a rotációs kvantumszám,

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c \mu r^2} \quad (14-3)$$

a rotációs állandó;

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (14-4)$$

az atommagok  $m_1, m_2$  tömegével meghatározott „redukált tömeg”,  $r$  a magtávolság.

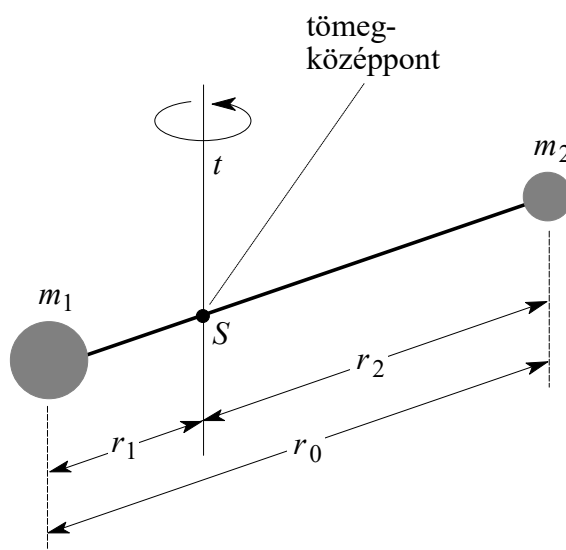
A magok rezgésének megfelelő modell a (harmonikus) oszcillátor kvantumelmélete szerint a rezgési vagy oszcillációs energia:

$$T_{oszc} = \omega \left( v + \frac{1}{2} \right), \quad (14-5)$$

ahol  $v = 1, 2, 3, \dots$  a rezgési (vibrációs) kvantumszám,

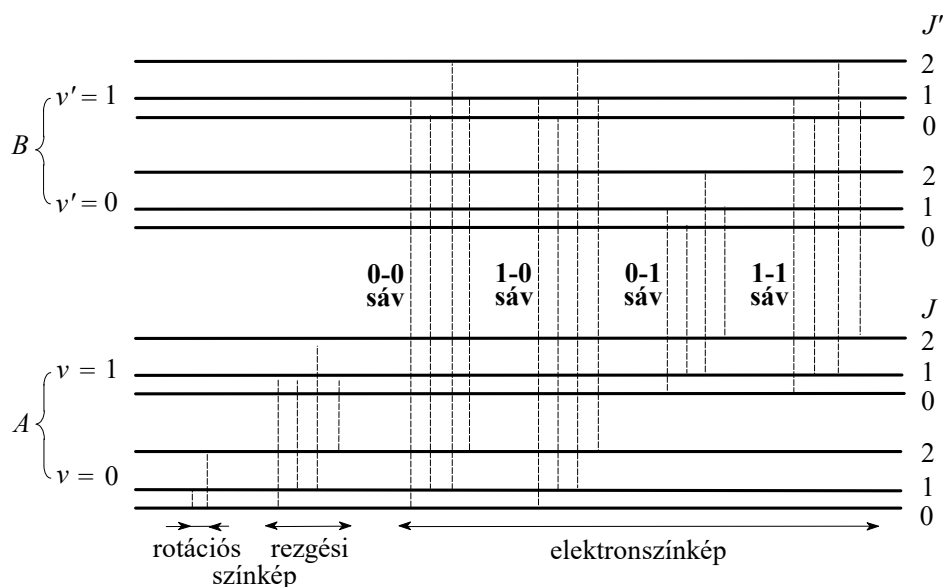
$$\omega = \frac{1}{c} \nu_{oszc} = \frac{2\pi}{c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (14-6)$$

$a$  rezgési állandó; itt  $\nu_{oszc}$  a rezgési frekvencia,  $k$  pedig a klasszikus elképzelés szerinti „erőkonstans” (az a visszahajtó erő, amely akkor hatna a magokra, ha azokat az egyensúlyi helyzetből 1 cm-rel szét húznánk). Az elektronenergiára általában nem adható meg explicit kifejezés.



**14.1 ábra** Forgó súlyzó vagy rotátor kvantumelméletét szemléltető elrendezés

A fentiek alapján a molekula energianívóiból vagy a molekula termsémájából egy részletet a 14.2 ábra szerint ábrázolhatunk. Itt az A elektronállapothoz csak két rezgési állapotot ( $v = 0$  és  $1$ ), ezek mindegyikéhez pedig csak három rotációs állapot ( $J = 0, 1, 2$ ) rajzoltunk; hasonlóan egy másik (B) elektronállapotnál. Igen fontos az a várható és éppen a spektrumok által igazolt tény, hogy általában a szomszédos rotációs nívók közti különbségek kicsinyek a rezgési nívók közti különbségekhez, ezek pedig kicsinyek az elektronívók közti különbségekhez képest.



14.2 ábra Részlet a molekula termsémájából

### 14.2 A spektrumok értelmezése

A Bohr-féle posztulátum szerint a kibocsátott vagy elnyelt fény  $\bar{\nu}$  hullámszáma két term különbsége, vagyis:

$$\bar{\nu} = (T'_{el} - T_{el}) + (T'_{oszc} - T_{oszc}) + (T'_{rot} - T_{rot}) = \quad (14-7)$$

$$= (T'_{el} - T_{el}) + \left[ \omega \left( v' + \frac{1}{2} \right) - \omega \left( v + \frac{1}{2} \right) \right] + [B'J'(J'+1) - BJ(J+1)] ,$$

ahol a felső állapotot az alsótól ' -vel különböztettük meg. Igen fontos, hogy átmeneteknél („kvantumugrásnál”) a rotációs kvantumszám az elmélet szerint (a legegyszerűbb esetben) csak 1-gyel változhat, vagyis fennáll a következő *kiválasztási szabály*:

$$J' - J = \pm 1 . \quad (14-8)$$

Ezek után a molekulaszíneképeket a következőképpen rendszerezhetjük.

#### a) Tiszta rotációs színeképek

A tiszta rotációs színeképek (a távoli infravörösben és a mikrohullámú tartományban) olyan abszorpciós kvantumugrásoknak felelnek meg, amelyeknél csak a rotációs állapot változik meg, az elektron- és a rezgési állapot nem (ld. 14.2 ábra bal oldalát). Ekkor (14-7) jobboldalán az első két tag 0, továbbá

$$B' = B \quad (14-9)$$

és

$$J' = J + 1 , \quad (14-10)$$

tehát

$$\bar{\nu} = 2B(J+1) , \quad (14-11)$$

ahol  $J = 0, 1, 2, \dots$ ; vagyis a színek egyenlő közű vonalakkól áll. Tiszta rotációs színeképeket csak dipólmolekuláknál figyeltek meg és csak abszorpcióban (ti. pusztán a forgással kapcsolatban csak a dipólmolekulák bocsátanak ki, vagy nyelhetnek el fényt, de a kibocsátott fény igen gyenge).

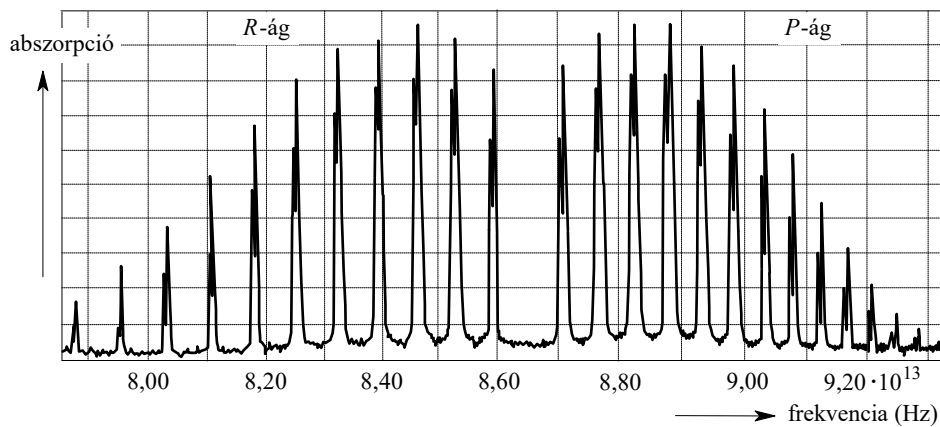
A HCl molekula rotációs spektrumának egy részét az 14.3 ábra mutatja. Két szomszédos vonal távolsága  $20,7 \text{ cm}^{-1}$ , ami (14-11) szerint:  $2B$ . Így (14-3) alapján az  $r$  magtávolság meghatározható:

$$r = 1,29 \cdot 10^{-8} \text{ cm.} \quad (14-12)$$

A (14-2) energia és a forgás szögsebessége közti kapcsolat felhasználásával kimutatható továbbá, hogy a HCl-nél egy körülfordulás időtartama:

$$\frac{1,6 \cdot 10^{-12}}{J} \text{ s,} \quad (14-13)$$

vagyis a másodpercenkénti fordulatszám, a rotációs frekvencia a  $J = 1$  állapotban kb.  $6 \cdot 10^{11}$ , a  $J = 2, 3, \dots$  állapotban pedig 2, 3, ...-szor nagyobb.



14.3 ábra A HCl molekula rotációs spektrumának egy részlete

#### b) Rezgési rotációs színeképek

A rezgési rotációs színeképek (a közelebbi infravörösben) olyan kvantumugrásoknak felelnek meg, amelyeknél a rotációs állapoton kívül a rezgési állapot is megváltozik, de az elektronállapot nem (ld. 14.2. ábra, középen). Most az energiakülönbségek nagyobbak – az ábrán a nyilak hosszabbak –, ezért van a színekép a közeli infravörösben. A (14-7)-ben  $\omega' = \omega$ , mivel a rezgési nívó ugyanahhoz az elektronállapothoz tartozik, de  $B'$  kissé különbözik  $B$ -től, mert a különböző rezgési állapotokban az átlagos magtávolság kissé más. Így, ha pl.  $\nu' = 1$  és  $\nu = 0$ , akkor (14-7) és (14-10) szerint a vonalak hullámszámai  $J' = J - 1$ -nél („P-ág”):

$$\bar{\nu} = \omega - (B' + B)J + (B' - B)J^2, \quad (14-14)$$

ahol  $J = 1, 2, \dots$ ;

$J' = J + 1$ -nél („R-ág”):



$$\bar{\nu} = \omega + (B' + B)(J + 1) + (B' - B)(J + 1)^2, \quad (14-15)$$

ahol  $J = 0, 1, 2, 3, \dots$

c) *Elektronsáv színeképek*

Az elektronsáv színeképek olyan kvantumugrásoknak felelnek meg, amelyeknél az elektronállapot megváltozik (l. *14.2 ábra*, jobboldalt). Az így fellépő nagyobb energiakülönbségek miatt ezek a színeképek – amelyek minden (nemcsak dipól) molekulánál előfordulnak – a közeli infravörös, a látható vagy az ultraibolya tartományba esnek. Egy meghatározott  $\nu' \rightarrow \nu$  rezgési átmenethez tartozó rotációs vonalak összessége alkot egy *sávot*, amelyet (17-7) és (14-10) alapján az (14-14)-(14-15)-höz hasonló formula ír le. Most azonban a  $B'$  és  $B$  rotációs állandók egymástól általában nagyobb mértékben különböznek, mint az *14.2 ábra* szerinti színeképeknél, mert a molekula különböző energiaállapotaiban az átlagos magtávolság eléggé különböző lehet. Ezért (14-14)-(14-15)-ben a  $J$ -ben másodfokú tagok befolyása nagyobb: a vonalak ( $B'-B$  előjelétől függően vagy a  $P$ -ág, vagy az  $R$ -ág  $J = 1, 2, 3, \dots$ -nak megfelelő vonalai) pl. jobbról balra haladva, egyre sűrűsödnek, majd ellenkező irányba haladva, egyre távolodnak egymástól. Kisebb felbontású spektroszkóp a vonalakat különösen a sűrűsödés helyén nem is bontja fel, így fényképező lemezen az egyik oldalon élesen határolt, a másik oldalon elmosódó sávhoz hasonló képet kapunk, ami a molekulaszíneképekre annyira jellemző, hogy ezeket *sávós színeképeknek* is hívják. A sáv élesen határolt vége a „sávfej”.

Ha két meghatározott elektronállapot ( $A$  és  $B$ ) közt egy helyett az összes megengedett rezgési átmenetet tekintetbe vesszük, az így származó több (a *14.2 ábrán* négy, a valóságban igen sok) sáv alkot egy *sávrendszert*. Egy „elektronugrásnak” az atomoknál egyetlen színeképvonal felel meg, a molekuláknál viszont egy egész sávrendszer, gyakran több száz, esetleg több ezer vonallal. Ha a molekula egy további elektronállapota  $C$ , akkor általában fellép a  $C-A$  és  $C-B$  átmenetekhez tartozó további két sávrendszer is stb. Így érthető, hogy a nem ritkán sok ezer vonalat tartalmazó molekulaszíneképek kimérése, analízise és rendszerezése igen komoly feladat.

## 15. A sugárzás kvantummechanikai elméletéről, a spektrumvonalak intenzitása

A fejezet elsajátítása után az olvasó

- ismeri a sugárzás kvantumelméleti alapvetéseit,
- ismeri a stacionárius és átmeneti dipólmomentum fogalmát,
- ezen fogalmak ismeretében értelmezni tudja az Einstein-féle átmeneti valószínűségeket, az azok között fenálló összefüggéseket,
- értelmezni tudja az abszorpció, a spontán emisszió és az indukált emisszió bekövetkezési valószínűségét, illetve a spektrumvonalak intenzitását,
- értelmezni tudja atomi rendszerben az optikai erősítés feltételét,
- elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja az atomi nívók között létrejövő átmenetek bekövetkezési valószínűségének az átmeneti dipólmomentumtól való függését.

Jelen fejezetben ismertetjük a molekulák spektrumának – az atomi spektrumoktól eltérő – jellegzetességeit. Megismerjük a molekulák forgásából, illetve rezgéséből eredő diszkrét energianívók tulajdonságait, a „tiszta”, illetve a „kombinált” átmenetekre vonatkozó szabályokat. A fejezetben helyet kapnak a spektrális mérésekből – a molekulák felépítésére, mozgására vonatkozó – következtetések.

A fénysugárzásra és fényelnyelésre képes rendszerek legegyszerűbb *klasszikus modellje*: a *rezgő elektromos dipólus* vagy *Hertz-féle* lineáris oszcillátor. Feltételezve, hogy az  $\mathbf{M}$  dipólusmomentum  $\nu$  frekvenciájú harmonikus rezgésnek megfelelően változik az idővel, vagyis

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_0 \cos 2\pi\nu t. \quad (15-1)$$

Ekkor – az elektrodinamika szerint – a dipólus által az időegység alatt a teljes térszögbe kisugárzott energiának időbeli átlagértéke, más szóval *a rezgő dipólus sugárzási teljesítménye* a következő kifejezéssel adható meg (ld. elektromosságban):

$$P_{dip} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{16\pi^4}{3c^3} \mathbf{M}_0^2 \nu^4, \quad (15-2)$$

ahol  $\mathbf{M}$  dipólmomentum,  $\nu$  a rezgés frekvenciája. Ezt az összefüggést lényegében a kvantummechanika is érvényesnek tekinti az atomok sugárzásának egyszerűsített („félíg klasszikus”) tárgyalásában, csak az  $\mathbf{M}$  dipólusmomentumot megfelelően, az alább leírt módon értelmezi.

### 15.1 Az atomok stacionárius és átmeneti dipólusmomentuma

a) *Az atomok stacionárius dipólusmomentuma.*

Az egyszerűség kedvéért tekintsük a *hidrogénatomot*. A  $+e$  töltésű mag és az ettől  $\mathbf{r}$  vektori távolságban lévő,  $-e$  töltésű elektron dipólust képez, amelynek (a mag felé mutató) momentuma a *klasszikus* felfogás szerint:

$$\mathbf{M} = -e\mathbf{r}. \quad (15-3)$$

A *kvantummechanika* értelmében az atomnak pl. az  $E_j$  energiájú *stacionárius állapotát* a

$$\Psi_j = \psi_j e^{-2\pi i \frac{E_j}{\hbar} t} \quad (15-4)$$

hullámfüggvény jellemzi, és az  $\mathbf{r}$  helyen felvett  $dV$  térfogatelemben az elektron tartózkodási valószínűsége:

$$\Psi_j^* \Psi_j dV. \quad (15-5)$$

Szemléletesen azt is mondhatjuk, hogy az „elektronfelhő”  $dV$  térfogatú részében

$$-e \Psi_j^* \Psi_j dV \quad (15-6)$$

töltés van, amely a mag megfelelő töltésűnek képzelt részével együtt

$$-e \mathbf{r} \Psi_j^* \Psi_j dV \quad (15-7)$$

momentumú dipólust alkot. Ebből az egész térre kiterjesztendő integrálással adódik, hogy *stacionárius állapotban a H-atom dipólusmomentuma:*

$$\mathbf{M}_{stac} = -e \int \Psi_j^* \mathbf{r} \Psi_j dV = -e \int \psi_j^* \mathbf{r} \psi_j dV, \quad (15-8)$$

amely *állandó*, tehát – megfelelően az elektrodinamikának – *stacionárius állapotokban az atom nem sugároz*. Így a kvantummechanikából önként következik a *Bohr-féle első posztulátum*, amely az „elektronpályákra” vonatkozó szemléletes alakjában az elektrodinamika törvényeivel összeegyeztethetetlen volt.

b) *Az atomok átmeneti dipólusmomentuma.*

A (15-8) kifejezés alapján kézenfekvő az az itt ugyancsak formálisnak látszó, de Dirac által elméletileg is megalapozott általánosítás, hogy az  $E_j$  és  $E_k$  ( $<E_j$ ) energiájú két *stacionárius állapot közti átmenet*hez a következő „*átmeneti dipólusmomentumot*” rendeljük:

$$\mathbf{M}_{jk} = -e \int \Psi_j^* \mathbf{r} \Psi_k dV = -e \int \psi_j^* \mathbf{r} \psi_k dV \cdot e^{2\pi i t \frac{(E_j - E_k)}{\hbar}} = \mathbf{M}_{jk}^0 e^{2\pi i \nu_{jk} t}. \quad (15-9)$$

Az  $\mathbf{M}_{jk}$  időben periodikusan változik a  $\nu_{jk}$  frekvenciával, vagyis az *atom – ismét összhangban az elektrodinamikával – a  $j \rightarrow k$  kvantumátmenetkor az alábbi frekvenciájú fényt bocsátja ki:*

$$\nu_{jk} = \frac{E_j - E_k}{h} \quad (E_j > E_k). \quad (15-10)$$

A fenti kvantummechanikai formalizmusból tehát a *Bohr-féle második posztulátum* is következik.

c) *A kvantumátmenet során emittált teljesítmény.*

A (15-9) alatti  $\mathbf{M}_{jk}$  momentum komplex (általában a  $\mathbf{M}_{jk}^0$  amplitúdó is:  $\mathbf{M}_{jk}^0 = |\mathbf{M}_{jk}^0| e^{i\delta}$ , ahol  $\delta$  a továbbiakban nem lényeges fázisállandó), és ezért a (15-2) előtt alapul vett (15-1) valós momentum megfelelőjének az alábbi  $\mathbf{M}_{jk} + \mathbf{M}_{jk}^*$  összeget tekintjük:

$$\mathbf{M}_{jk} + \mathbf{M}_{jk}^* = |\mathbf{M}_{jk}^0| \left( e^{i(2\pi\nu_{jk} t + \delta)} + e^{-i(2\pi\nu_{jk} t + \delta)} \right) = 2 |\mathbf{M}_{jk}^0| \cos(2\pi\nu_{jk} t + \delta). \quad (15-11)$$

A (15-2)-ből a  $\mathbf{M}_0 \rightarrow 2|\mathbf{M}_{jk}^0|$  és  $\nu \rightarrow \nu_{jk}$  helyettesítésekkel adódó eredményt úgy fejezhetjük ki, hogy *sok atomra vonatkozó átlagban az egy atom által a  $j \rightarrow k$  spontán kvantumátmenet során emittált teljesítmény a következő:*

$$P_{atom} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{64\pi^4}{3c^3} \nu_{jk}^4 |\mathbf{M}_{jk}^0|^2, \quad (15-12)$$

ahol

$$\mathbf{M}_{jk}^0 = -e \int \psi_j^* \mathbf{r} \psi_k dV. \quad (15-13)$$

Mivel az  $\mathbf{M}_{jk}^0$  vektor komponensei:  $-e \int \psi_j^* x \psi_k dV$  stb.,  $|\mathbf{M}_{jk}^0|^2$  így is írható:

$$|\mathbf{M}_{jk}^0|^2 = e^2 \left( |x_{jk}|^2 + |y_{jk}|^2 + |z_{jk}|^2 \right), \quad (15-14)$$

ahol az

$$x_{jk} = \int \psi_j^* x \psi_k dV, \dots \quad (15-15)$$

Ily módon  $|\mathbf{M}_{jk}^0|^2$  és ezzel  $P_{atom}$  a  $j$  és  $k$  állapotok Schrödinger-féle  $\psi$  függvényeinek ismeretében kiszámíthatók.

## 15.2 Az Einstein-féle átmeneti valószínűségek

a) *A spontán és indukált emisszió*

A sok atomból álló rendszerben az időegység alatt bekövetkező  $j \rightarrow k$  spontán (vagyis látszólag önként végbemenő) átmenetek száma a  $j$  állapotban lévő atomok  $N_j$  számával arányos:

$$N_j A_{jk}, \quad (15-16)$$

ahol  $A_{jk}$  az 1/idő dimenziójú „átmeneti valószínűség”. Így az  $N_j$  számú atom időegységenként  $N_j A_{jk}$  számú,  $h\nu_{jk}$  energiájú fotont, azaz

$$P_\alpha = N_j A_{jk} h\nu_{jk} \quad (15-17)$$

energiát sugároz ki, ez viszont (15-12) értelmében egyenlő az  $N_j P_{\text{atom}}$  mennyiséggel. A (15-12) és (15-17) kifejezések egybevetéséből  $A_{jk}$ , a *spontán emisszióra vonatkozó átmeneti valószínűség*:

$$A_{jk} = \frac{I}{4\pi\epsilon_0} \frac{64\pi^4}{3hc^3} \nu_{jk}^3 |\mathbf{M}_{jk}^0|^2 . \quad (15-18)$$

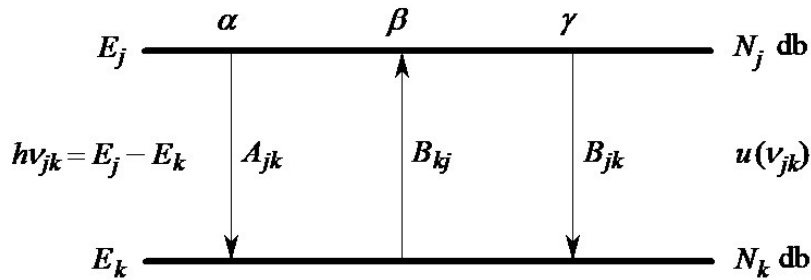
Egy  $\nu_{jk} = (E_j - E_k)/h$  frekvenciájú elektromágneses sugárzás hatására az atom a  $j$  állapotból a  $k$ -ba – a fent említett és a sugárzástól független valószínűségű *spontán emisszió*n kívül Einstein sejtésének megfelelően – kényszerített vagy *indukált emisszió* révén is átmehet, továbbá *abszorpció* folytán  $k$ -ból a  $j$  állapotba juthat. Sok atomból álló rendszerben e kétfajta átmenet időegységenkénti száma arányosnak vehető  $N_j$ -vel, illetve  $N_k$ -val, valamint az elektromágneses sugárzás  $u(\nu_{jk})$  energiasűrűségével, azaz így írható:

$$N_j B_{jk} u(\nu_{jk}), \text{ illetve } N_k B_{kj} u(\nu_{jk}), \quad (15-19)$$

ahol  $B_{jk}$  az *indukált emissziós*,  $B_{kj}$  az *abszorpciós átmeneti valószínűség*.

b) *Összefüggések az átmeneti valószínűségek között; kvantumelektronika*

Vizsgáljunk a térfogategységben eloszlott  $N$  számú azonos felépítésű atomot, amely közül  $N_j$  számúnak az energiája  $E_j$ , a többi – vagyis  $N_k = N - N_j$  számúé – pedig  $E_k (< E_j)$ . E térfogategységben azonban  $u(\nu)$  spektrális térfogati sűrűségű sugárzási energia is legyen jelen. Mivel az  $E_j$  és  $E_k$  energiaértékek között kvantumátmenet lehetséges, ezért a Bohr-féle frekvenciafeltétel szerint a jelenlévő  $E_j - E_k = h\nu_{jk}$  energiájú fotonok energiasűrűsége  $u(\nu_{jk})$ . Az előző pontban leírtak szerint egyidejűen háromféle kvantumátmenet lehetséges (15.1 ábra).



15.1 ábra Lehetséges kvantumátmenetek

$\alpha$ ) Spontán fényemisszió:  $j \rightarrow k$ -nak megfelelően.

A  $j$  állapotba jutástól számítva ezen állapot élettartamának lejártá után bekövetkező ilyen természetű emisszióknak a kisugárzott teljesítménye szükségképpen:

$$P_\alpha = N_j A_{jk} h\nu_{jk} , \quad (15-20)$$

ahol  $A_{jk}$  jelenti annak valószínűségét, hogy egy  $E_j$  energiájú atom önként  $E_k$  energiájúvá változzék.

$\beta$ ) Abszorpció az  $u(\nu_{jk})$  energiasűrűségű sugárzási térből.

Ilyen  $k \rightarrow j$  kvantumátmenet során az atomhalmaz által elnyelt sugárzási teljesítmény szükségképpen:

$$P_{\beta} = N_k B_{kj} u(\nu_{jk}) h\nu_{jk}, \quad (15-21)$$

ahol  $B_{kj}$  jelenti annak valószínűségét, hogy egy  $k$  állapotú atom az  $u(\nu_{jk})$  hatására  $j$  állapotúvá változzék.

$\gamma$ ) Indukált emisszió a  $j \rightarrow k$  átmenetnek megfelelően.

(A környező  $u(\nu_{jk})$  tér „indukáló” hatására még a  $j$  állapot élettartamán belül bekövetkező ilyenfajta, az indukálóval szigorúan koherens emisszió lehetőségére Einstein sejtése nyomán a hullámmechanika mutatott rá.) Ilyen kvantumátmenet során az  $N_j$  számú atom kisugárzási teljesítménye:

$$P_{\gamma} = N_j B_{jk} u(\nu_{jk}) h\nu_{jk}, \quad (15-22)$$

ahol  $B_{jk}$  jelenti annak valószínűségét, hogy egy  $j$  állapotú atom az  $u(\nu_{jk})$  hatására  $k$  állapotúvá relaxálódjon.

Az atomhalmaz és az azt környező sugárzási tér termikus *egyensúlyának* az a feltétele, hogy

$$P_{\alpha} + P_{\gamma} = P_{\beta} \quad (15-23)$$

legyen, vagyis hogy teljesüljön a következő összefüggés:

$$N_j [A_{jk} + B_{jk} u(\nu_{jk})] = N_k B_{kj} u(\nu_{jk}). \quad (15-24)$$

Azonban  $T$  hőmérsékleten a termikus egyensúly miatt szükségképpen fennáll még

$$\frac{N_j}{N_k} = \frac{g_j}{g_k} e^{-(E_j - E_k)/kT}, \quad (15-25)$$

ahol  $g_j$  és  $g_k$  a  $j$ , illetve  $k$  állapot „statisztikai súlya”, amely nem elfajult állapotra 1, elfajult állapotra pedig az ugyanazon energiájú nívók száma; pl. egy  $J$  belső kvantumszámú állapotnál  $2J+1$  az iránykvantálásnak megfelelően. Ezért a (15-24)-ből

$$\frac{g_k}{g_j} e^{-h\nu_{jk}/kT} [A_{jk} + B_{jk} u(\nu_{jk})] = B_{kj} u(\nu_{jk}), \quad (15-26)$$

amelyből

$$u(\nu_{jk}) = \frac{A_{jk}/B_{jk}}{\frac{B_{kj}g_k}{B_{jk}g_j} e^{h\nu_{jk}/kT} - 1}. \quad (15-27)$$

Ezt az eredményt összevetve a Planck-féle sugárzási törvény  $h\nu \ll kT$  klasszikus határesetével, amelyre az

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (15-28)$$

Rayleigh-Jeans formula érvényes, a

$$B_{kj}g_k = B_{jk}g_j, \quad (15-29)$$

$$\frac{A_{jk}}{B_{jk}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}$$

összefüggések adódnak.

Spontán emisszió esetén egyetlen atom a (15-12)-(15-13), valamint  $\alpha$ ) szerint

$$P'_\alpha = \frac{I}{4\pi\varepsilon_0} \frac{64\pi^4}{3c^2} \nu_{jk}^4 |\mathbf{M}_{jk}^0|^2 = A_{jk} h\nu_{jk} \quad (15-30)$$

teljesíménnyel sugároz. A korábban már bevezetett (15-18)

$$A_{jk} = \frac{I}{4\pi\varepsilon_0} \frac{64\pi^4}{3hc^3} \nu_{jk}^3 |\mathbf{M}_{jk}^0|^2.$$

összefüggés ismeretében  $B_{jk}$ , illetve  $B_{kj}$  is kifejezhető az  $|\mathbf{M}_{jk}^0|$ , illetve az  $|\mathbf{M}_{kj}^0|$  átmeneti dipolmomentummal:

$$B_{jk} = \frac{I}{4\pi\varepsilon_0} \frac{8\pi^3}{3h^2} |\mathbf{M}_{jk}^0|^2, \quad B_{kj} = \frac{I}{4\pi\varepsilon_0} \frac{8\pi^3}{3h^2} |\mathbf{M}_{kj}^0|^2. \quad (15-31)$$

A kvantummechanikai megfontolásokkal kiszámítható  $|\mathbf{M}_{jk}^0|$  ismeretében tehát kiszámítható az atomi halmaz által kibocsátott, illetve elnyelt rezonanciasugárzási teljesítmény.

A hagyományos források általában spontán emisszió útján sugároznak. Indukált emisszió és ezzel egyetlen indukáló (gerjesztő) fotonnak a megkettőződése, kvantumos erősítése csakis akkor jelentkezhet, ha  $P_\alpha \ll P_\gamma > P_\beta$ , vagyis ha (15-24) így módosul:

$$N_j B_{jk} > N_k B_{kj}, \quad (15-32)$$

amelyből (15-29) alapján:

$$N_j > N_k \frac{g_j}{g_k}. \quad (15-33)$$

A (15-25) miatt ez ellentéte a termikus egyensúly esetének. Az indukált emisszióknak szükséges feltétele tehát az, hogy a felső  $E_j$  energiaszinten több ( $N_j$  számú) atom tartózkodjon, mint az alsó  $E_k$ -n, más szóval, hogy az  $N_j$  és  $N_k$  betöltési számok (ún. populációk) az egyensúly esetéhez képest fordított nagyságúak legyenek (vagyis ún. populáció-inverzió álljon fenn) valamilyen energiának alkalmas betáplálása (vagyis optikai besűrítése, ún. pumpálása) következtében.

Az előbbieket alapján könnyen meg lehet mutatni, hogy egy (el nem fajult:  $g_j = g_k = 1$ ) két energiaszintű ( $E_j > E_k$ ) molekulahalmazba az  $x$  irányban behatoló  $\nu_{jk}$  frekvenciájú és  $\Delta\nu_{jk}$  félértékszélességű párhuzamos fénynyaláb  $J$  intenzitásának  $x$  irányú gradiensét az abszorpciós és azt követő indukált emissziós teljesítmény különbségeként az alábbi kifejezéssel adható meg:

$$\frac{dJ}{dx} = -\frac{h\nu_{jk} B_{kj}}{\pi^2 c \Delta\nu_{jk}} (N_k - N_j) J. \quad (15-34)$$

Ebből kitűnik, hogy az ún. rezonancia-abszorpciónál a  $K$  abszorpciós koefficiens szerepét a

$$K_\nu \equiv \frac{h\nu_{jk} B_{kj}}{\pi^2 c \Delta\nu_{jk}} (N_k - N_j) \quad (15-35)$$

tölti be. Látjuk, hogy populáció-inverzió esetén  $K_v < 0$ , vagyis ekkor nem elnyelés, hanem erősítés következik be. A (15-35) egyben magyarázatát adja annak a tapasztalatnak, miért szükséges éles ( $\Delta\nu \rightarrow 0$ ) színeképvonalú gerjesztő fény a rezonancia-sugárzás előidézése.

A populáció-inverzió technikai megvalósítása és ezáltal egy atom- vagy molekulahalmazban láncreakciószerű koherens indukált emisszió előidézése az ún. kvantumelektronikának a feladata. Az ezt megvalósító berendezéseknek két fontos képviselője: a mikrohullámok tartományában működő ún. maser (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) és a fényhullámok tartományában működő *laser* (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Mindkét név egy működési módot jelöl, de a hétköznapi életben az ezen elvű működő eszközökre is használjuk a kifejezéseket.

### 15.3 A spektrumvonalak intenzitása

Ha a fényforrásban a  $j$  és  $k$  kvantumállapotú atomok száma  $N_j$ , illetve  $N_k$ , akkor – az előzőek értelmében – a  $j \rightarrow k$  átmenethez ( $E_j - E_k = h\nu_{jk}$ ) tartozó *emissziós vonal intenzitását* a következő összefüggéssel írhatjuk le:

$$I_{jk} = N_j A_{jk} h\nu_{jk} = \frac{16\pi^3}{3\varepsilon_0 c^3} N_j |M_{jk}^0|^2 \nu_{jk}^4, \quad (15-36)$$

a  $k \rightarrow j$  *abszorpciós vonal*  $I_{kj}$  *intenzitását* pedig az alábbi kifejezés szolgáltatja:

$$I_{kj} = N_k B_{kj} u(\nu_{jk}) \cdot h\nu_{jk}. \quad (15-37)$$

A (15-36)-ban szereplő  $N_j$  „betöltési szám” a gerjesztési körülményektől függ. Hőmérsékleti egyensúly, illetve hőmérsékleti gerjesztés esetén  $N_j$  – a Boltzmann-eloszlásnak megfelelően – arányos  $e^{-E_j/kT}$ -vel, pontosabban:

$$N_j = N_0 \frac{g_j}{g_0} e^{-E_j/kT}, \quad (15-38)$$

ahol  $N_0$  és  $g_0$  az alapállapot ( $E_0 = 0$ ) *betöltési száma*, illetve *statisztikai súlya*. Nem nagyon nagy hőmérsékleteken a magasabb gerjesztett állapotok igen ritkák. A gázkisülésekben viszont sokszor ezek az állapotok is gyakoriak a nagy sebességű elektronokkal való ütközések következtében.



## Felhasznált irodalom

1. Budó-Mátrai: Kísérleti Fizika III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1979
2. Hevesi Imre, Szatmári Sándor: Bevezetés az atomfizikába, JATEPress, Szeged, 2002
3. Wolfgang Demtröder: Atoms, Molecules and Photons, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005

## Ábrák forrásmunkái

Budó-Mátrai: Kísérleti Fizika III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1979

9.5, 10.5, 10.6, 10.7, 15.1

Hevesi Imre, Szatmári Sándor: Bevezetés az atomfizikába, JATEPress, Szeged, 2002

1.2, 1.3, 1.5, 1.7, 1.8, 1.9, 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.7, 2.8, 2.9, 3.2, 3.3, 3.5, 3.6, 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 5.1, 5.2, 5.3, 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6, 6.7, 6.8, 7.1, 7.2, 7.3, 7.4, 7.5, 7.6, 8.1, 8.2, 8.3, 8.4, 8.5, 8.6, 9.1, 9.2, 10.1, 10.2, 10.3, 10.4, 10.9, 10.10, 11.1, 11.2, 11.3, 11.4, 11.5, 11.6, 11.7, 11.8, 11.9, 11.10, 12.1, 12.2, 12.3, 12.4, 12.5, 12.6, 12.7, 12.8, 13.1, 14.1, 14.2, 14.3

## Tantárgyleíráshoz alkalmazható sablon

–a MAB hivatalos űrlapja alapján<sup>1</sup>–

### ALAPSZAK

<b>(1.) Tantárgy neve: Atomfizika</b>	<b>Kreditértéke: 3</b>
A tantárgy besorolása: kötelező	
A tantárgy elméleti vagy gyakorlati jellegének mértéke, „képzési karaktere” <sup>12</sup> : 80-20 (kredit%)	
A tanóra <sup>2</sup> típusa: előadás és óraszám: 30 az adott félévben, Az adott ismeret átadásában alkalmazandó további (sajátos) módok, jellemzők <sup>3</sup> (ha vannak): az adott anyaghoz kapcsolódó egyszerű példafeladatok megoldása a jelenségek jobb megértése érdekében, ill. igény esetén konzultációs órák	
A számonkérés módja (koll. / gyj. / egyéb <sup>4</sup> ): kollokvium Az ismeretellenőrzésben alkalmazandó további (sajátos) módok <sup>5</sup> (ha vannak): -	
A tantárgy tantervi helye (hányadik félév): 4.	
Előtanulmányi feltételek (ha vannak): Hullámtan és optika, Elektromágnesség	
<b>Tantárgy-leírás: az elsajátítandó ismeretanyag tömör, ugyanakkor informáló leírása</b>	
<p><b>A tantárgy célja:</b> Az atom- és kvantumfizikai ismeretek forradalmi változást hoztak a fizikai gondolkodásmódban; alapjául szolgálnak a klasszikus felfogáson messze túlmutató mai fizikai világképünknek.</p> <p>A tantárgy célja az atomok felépítésének, szerkezetének, továbbá az atomoknak egymással, illetve az elektromos és mágneses térrel való kölcsönhatásának a megértése.</p> <p>A tantárgy megismerteti a hallgatókat az atomfizika klasszikus alapjaival, fontosabb kísérleti eredményeivel és a kvantumelmélet néhány, konkrét alkalmazásával, mellyel betekintést nyújt a modern atomfizika egyes problémáinak megoldási módszereibe.</p> <p>A tantárgy keretében elsősorban tárgyalt atomhéjfizikai ismeretek elsajátítása hozzájárul az elektronburok felépítésének megismeréséhez, a héjszerkezet megértéséhez, valamint – kiegészülve a későbbi tanulmányokban részletesebben és mélyebben sorra kerülő kvantummechanikai és statisztikus fizikai ismeretekkel – segíti az eligazodást pl. a mag- és részecskefizikában, a szilárdtestfizikában, plazmafizikában stb.</p> <p><b>Tematika:</b></p>	

<sup>1</sup> A Magyar Akkreditációs Bizottság honlapjának 2018. januári állása alapján, az ott szereplő űrlapot - tantárgyleírásra konkretizált résszel – kiegészítve készült.

<sup>2</sup> Nftv. 108. § 37. tanóra: a tantervben meghatározott tanulmányi követelmények teljesítéséhez az oktató személyes közreműködését igénylő foglalkozás (előadás, szeminárium, gyakorlat, konzultáció), amelynek időtartama legalább negyvenöt, legfeljebb hatvan perc.

<sup>3</sup> pl. esetismertetések, szerepjáték, tematikus prezentációk stb.

<sup>4</sup> pl. folyamatos számonkérés, évközi beszámoló

<sup>5</sup> pl. esettanulmányok, témakidolgozások, dolgozatok, esszék, üzleti, szervezési tervek stb. bekérése

1. Az atomfogalom kialakulása. Az atomok létezésének bizonyítékai; rövid történeti áttekintés. Az atomok tömege, a relatív atomtömeg és a relatív molekulatömeg, az 1 mol anyagmennyiség, moláris térfogat, normáltérfogat. Az Avogadro-állandó meghatározása: „leülepedési egyensúlyból, Brown-féle mozgásból; radioaktivitás, elektrolízis és röntgensugarak kristályokon való elhajlása alapján. Az atomok nagyságának meghatározása: az Avogadro-állandó segítségével, a „saját térfogattól”, ütközési hatáskeresztmetszetből, közepes szabad úthosszból, a röntgensugaraknak kristályokon történő diffrakciója alapján.
2. Az elektromosság „atomos” szerkezete. Elektronok és ionok; az elektrolízis törvényei, a katódsugarak. Az elemi töltés meghatározása Millikan-kísérletéből. Az elektron fajlagos töltése. Az elektron mozgása elektromos és mágneses terekben. Az elektron fajlagos töltésének kísérleti meghatározása Thomson, Busch és Kirchner módszerével. Az elektron tömege és nagyságának függése a sebességétől.
3. Ionok, az ionok fajlagos töltésének meghatározása Thomson-féle parabolamódszerrel. Tömegspektrográfok működési elve (irány- és sebességfókuszálás). Az Aston-, a Dempster- és a Bainbridge-féle tömegspektrográf. Izotópok.
4. Atommodellek. A Thomson-féle atommodell. Elektronok áthaladása vékony fémlemezekon és gázokon: a Lénárd-féle atommodell.  $\alpha$ -részecskék szóródása; a Rutherford-féle szórási formula. A Rutherford-féle atommodell. Az atommag.
5. A sugárzás kvantumozott természete, a hőmérsékleti sugárzás. Elektromágneses hullámok üregben. Kirchhoff-törvénye. Az abszolút fekete test és törvényszerűségei: a Stefan-Boltzmann-féle törvény, a Wien-törvény, a Rayleigh-Jeans-féle törvény. Lumineszcencia sugárzások: fluoreszcencia, foszforeszcencia. A Planck-féle sugárzási törvény: A Planck-féle állandó („hatáskvantum”). A szürke sugárzó test. A sugárzási törvények alkalmazása magas hőmérsékletek mérésére.
6. A fényelektromos hatás, Lenard kísérletei. A fénykvantum (foton) hipotézis. Az Einstein-féle fényelektromos egyenlet. Alkalmazások. A röntgensugárzás. A karakterisztikus és fékezési röntgensugárzás keletkezése. Röntgensugárzás kölcsönhatása az anyaggal.
7. A Compton-effektus. Kísérleti eredmények és azok értelmezése. A Compton-formula. A fénynyomás. A fény kettős természete. A mikrorészecskék kettős természete: anyaghullámok. A de Broglie-hullámok. Az anyaghullámok kísérleti bizonyítékai.
8. A Bohr-féle atommodell. A Bohr-féle posztulátumok. Franck-Hertz-féle elektronütközési kísérletek. A hidrogénatom elmélete a Bohr-modell alapján. A H-atom színképének értelmezése. A hidrogénszerű ionok spektruma. A Bohr-Sommerfeld-féle hidrogénatom modell. Fő-, mellék- és mágneses kvantumszámok, iránykvantálás. A Bohr-féle korrespondencia elv.
9. A kvantummechanika kialakulása. A Bohr-elmélet hiányosságai. A Schrödinger egyenlet. Egyszerű rendszerek Schrödinger egyenleteinek sajátértékei (lineáris harmonikus oszcillátor, részecske végtelenül mély és véges mélységű potenciálgödörben, részecske áthaladása potenciálfalon). A H-atom mechanikai modellje. Sajátértékek és sajátfüggvények. A fő-, mellék- és mágneses kvantumszámok jelentése. Átmenetek az energianívók között. Az elektron valószínűség-sűrűségének eloszlása a hidrogénatomban.

10. Az alkálifém-atomok spektrumai. Fősorozat, első- és második melléksorozat, Bergmann sorozat. A spektrum modellszerű értelmezése. Az alkálistektrumok dublett szerkezete. Az elektron spinje és saját mágneses momentuma. Iránykvantálás: Stern–Gerlach kísérlete. A finomszerkezeti formula.
11. Többelektronos atomok spektruma. Termék rendszerezése a vektormodell alapján: LS-csatolás, jj-csatolás. A Lande-féle g-faktor. A Zeeman-effektus.
12. A röntgenspektrumok. Moseley-törvénye. A röntgenspektrumok keletkezése. Az abszorpciós röntgen spektrum. Az Auger-effektus és a fotoelektron-spektroszkópia (ESCA).
13. Az elemek periódusos rendszere. Az elektronburok héjszerkezete (héjak és alhéjak). A Pauli-elv. A periódusos rendszer felépítése és értelmezése. Periódusok.
14. Molekulaszerkezet. Kötési mechanizmusok (ionos-, kovalens-, hidrogén-, van der Waals-kötések. A molekula energianívói és a molekulaszpektrumok (forgási-, rezgési-, elektronsáv energiaspektrumok. A molekulaszpektrumok értelmezése. A Raman-effektus.
15. A sugárzás kvantummechanikai alapjai. Az atomok stacionárius és átmeneti dipólmomentuma. Az Einstein-féle átmeneti valószínűségek. Kvantumelektronika. Spontán és indukált emisszió. Az optikai erősítés feltétele. Lézerfény tulajdonságai: lézerek.

A **2-5** legfontosabb *kötelező*, illetve *ajánlott irodalom* (jegyzet, tankönyv) felsorolása bibliográfiai adatokkal (szerző, cím, kiadás adatai, (esetleg oldalak), ISBN)

1. Hevesi I., Szatmári Sándor: Bevezetés az atomfizikába (Szeged, JATEPress 2002)
2. Budó Á.: Kísérleti Fizika I-III. (Budapest, Tankönyvkiadó, 1979)
3. Haken, H.–Wolf. H.C.: Atom- und Quantenphysik (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New-York, 1983)
4. Kiss D.–Horváth Á.–Kiss Á.: Kísérleti atomfizika (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 1998)
5. Spolszkij, E.V.: Atomfizika I-II. (Akadémiai Kiadó, Budapest, 1958)

Azoknak az **előírt szakmai kompetenciáknak, kompetencia-elemeknek** (*tudás, képesség* stb., *KKK 7. pont*) a felsorolása, **amelyek kialakításához a tantárgy jellemzően, érdemben hozzájárul**

**A KKK-ban szereplő kompetenciák, amelyek kialakításához a tantárgy hozzájárul:**

**a) tudása**

Ismeri a fizika alapvető összefüggéseit, törvényszerűségeit, és az ezeket alkalmazó matematikai, informatikai eljárásokat.

**b) képességei**

Képes a fizika területén szerzett tudását alapvető gyakorlati problémák megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is.

**c) attitűdje**

Elkötelezett új kompetenciák elsajátítására és világképének bővítésére, fejleszti, mélyíti szakterületi ismereteit.

**d) autonómiája és felelőssége**

A tantárggyal kialakítandó <u>konkrét</u> tanulási eredmények:			
Tudás	Képesség	Attitűd	Autonómia-felelősség
Ismeri az atomfizika kialakulásának legfontosabb mérföldköveit és az anyagszerkezetre vonatkozó alapvető fogalmakat.	Képes értelmezni és magyarázni az atomok létezésére vonatkozó kísérleteket és azok következményeit.	Elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja az anyagok atomos szerkezetére vonatkozó bizonyítékokat.	Alapvető fizikai állandók segítségével képes az anyag fizikai tulajdonságainak meghatározására, figyelembe véve az anyag atomos szerkezetét és az elemi töltés kvantáltságát.
Ismeri az anyag, illetve elektromosság kvantált tulajdonságaira vonatkozó törvényszerűségeket, és ezen összefüggéseknek az atomok oszthatóságára vonatkozó következményeit.	Megismeri a töltés legkisebb egységének, az elemi töltés meghatározásának módszereit, az elemi töltést hordozó elektron tulajdonságait.	Elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja, hogy mikro-rendszerekben a fizikai mennyiségek sok esetben kvantáltak.	
Ismeri a szabad ionok keletkezéséhez vezető alapvető folyamatokat, az ionok fajlagos töltésének mérésén alapuló, tömegük mérésére szolgáló tömegspektrográfok működését, az izotópok szétválasztására szolgáló eljárásokat.	Képes értelmezni a tömegspektrográfokban alkalmazott irány és sebességfókuszálási módszereket.		Ismeretei alapján képes az elektromágneses térben mozgó töltött részecskék mozgásának leírására, ezáltal adott paramétereknek megfelelő szelektív konfigurációk elméleti vizsgálatára.

<p>Ismeri az atomok felépítésére vonatkozó ismereteink fejlődésének legfontosabb mérföldköveit, az atommodelleket.</p>	<p>Képes értelmezni és magyarázni az elektron abszorpciójára, az <math>\alpha</math> részecskék szóródására vonatkozó kísérleti eredményeket, illetve ezeknek a különböző atommodellekhez való kapcsolatát.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálataiban szem előtt tartja az atommag tulajdonságaira vonatkozó új ismereteket.</p>	
<p>Ismeri a hőmérsékleti sugárzás manapság elfogadott törvényszerűségeinek felismeréséhez vezető út főbb állomásait.</p>	<p>Képes értelmezni ezen törvényszerűségek és az elektromágneses sugárzási tér kvantumozásának közötti összefüggéseket.</p>	<p>Elfogadja és későbbi munkája során szem előtt tartja az anyag és a sugárzási tér kapcsolatában megjelenő kvantumozás természetét.</p>	
<p>Ismeri a fotonhipotézis kialakulásához vezető kísérleti megfigyeléseket, eredményeket, a röntgensugárzás segítségével keltett röntgensugárzás spektrális tulajdonságait.</p>	<p>Képes értelmezni és magyarázni a fotoeffektust leíró Einstein-féle egyenletet és a fékezési sugárzás spektrumának tulajdonságait a fotonelmélet alapján.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálataiban szem előtt tartja a fékezési sugárzás keletkezésére vonatkozó – a fotonelméleten alapuló – képet, valamint a fénynek – a fényelektromos jelenségekre vonatkozó – korpuszkuláris jellegét.</p>	<p>Különbséget tesz az elektromágneses sugárzás hullám- és korpuszkuláris természete közt, a fizikai jelenségeket megfelelően értelmezi a fénykettős természetének figyelembevételével.</p>

<p>Ismeri a fény kettős természetét igazoló kísérleti megfigyeléseket.</p>	<p>Képes értelmezni és magyarázni ezen megfigyeléseket a hullám-, illetve a fotonelmélet segítségével.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja a kettős természetből eredő, a fény különböző kölcsönhatásaira vonatkozó értelmezéseket, különös tekintettel a hullám- és fotonelmélet együttes alkalmazásának ellentmondásaira.</p>	
<p>Ismeri a Bohr-féle, illetve a Bohr-Sommerfeld modell alapvetéseit, a Bohr-féle atommodell kísérleti bizonyítékait.</p>	<p>A modell alapján képes értelmezni a hidrogén atom termrendszerét, spektrumát.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja az atom rendszerek energiájának kvantáltságára, diszkrét meghatározott energiaállapotaira vonatkozó tényeket.</p>	
<p>Ismeri a kvantummechanika kialakulásának mérföldköveit, a Schrödinger egyenlethez, a hullámmechanika alapegyenletéhez vezető megfontolások alapvetéseit.</p>	<p>Képes értelmezni a legfontosabb mikrorendszerekre kapott eredményeket.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja a mikrorendszerek viselkedésének valószínűségi jellegét a mikrorendszerekre jellemző fizikai mennyiségek kvantáltságát.</p>	<p>Az alapvető kvantummechanikai rendszerek energia-sajátértékeinek ismeretében tanulmányai során képes következtetéseket levonni összetettebb rendszerek fizikai tulajdonságaira vonatkozóan.</p>

<p>Ismeri az alkáli fémek termrendszerének, illetve spektrumának jellegzeteségeit, az elektron spinjének tulajdonságait.</p>	<p>Képes értelmezni az alkáli atomok spektrumának a hidrogén spektrumához való hasonlóságát, az eltérések, illetve a dublett szerkezet okát.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja a mikrorendszerekre jellemző vektormennyiségek nagyság- és iránykvantálását.</p>	
<p>Ismeri a többelektronos atomi rendszerek spektrumának főbb jellegzetességét, a termék részletesebb jelölését; az adott elektron konfigurációt jellemző kvantumszámokhoz való kapcsolatát.</p>	<p>A vektori összeadás szabályainak, illetve a vektormodell ismeretében képes értelmezni a spektrumok tulajdonságait.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai során szem előtt tartja mikrorendszerekre jellemző vektormennyiségek összeadására vonatkozó szabályokat, a termeket képes rendszerezni a vektormodell alapján.</p>	
<p>Ismeri az emisszióban megfigyelhető karakterisztikus röntgensugárzás, illetve az abszorpciós röntgenspektrumok szerkezetét.</p>	<p>Képes értelmezni a karakterisztikus röntgensugárzás, illetve az abszorpciós röntgenspektrumok keletkezését</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai alapján szem előtt tartja a röntgen spektrumok főbb tulajdonságait, valamint keletkezésüknek az elemek elektronburkának héjszerkezetén alapuló magyarázatát.</p>	



<p>Ismeri a Pauli elvet, illetve a Pauli-elv felállításához vezető kísérleti tapasztalatokat.</p>	<p>A Pauli-elv alapján képes értelmezni az elektronburok szerkezetét a héjakon, az alhéjakon elhelyezkedő elektronok maximális számát, valamint a periódusos rendszer felépítését, az elemek kémiai, fizikai tulajdonságának periodikus változását.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai alapján szem előtt tartja a Pauli-elv szerepét az elektronburok felépítését illetően.</p>	
<p>Ismeri a molekulák forgásából, illetve rezgéséből eredő diszkrét energianívók tulajdonságait, az átmenetek számát korlátozó kiválasztási szabályokat, az elektron-, a rezgési és a forgási energiák „kapcsolódására”, illetve az ilyen kombinált átmenetekre vonatkozó szabályokat.</p>	<p>Képes értelmezni a spektrális mérésekből származtatható – a molekulák felépítésére, mozgására vonatkozó – következtetéseket.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálatai alapján szem előtt tartja az atomi és molekula spektrumok közötti különbségeket, illetve ezek eredetét.</p>	<p>Szakmai segítséggel képes az alapvető spektroszkópiai módszerekkel kapott eredmények értelmezésére és azok atomi szintű magyarázatára.</p>

<p>Ismeri a sugárzás kvantumelméleti alapvetéseit, a stacionárius és átmeneti dipólmomentum fogalmát.</p>	<p>Ezen fogalmak ismeretében értelmezni tudja az Einstein-féle átmeneti valószínűségeket, az azok között fennálló összefüggéseket, az abszorpció, a spontán emisszió és az indukált emisszió bekövetkezési valószínűségét, illetve a spektrumvonalak intenzitását, valamint atomi rendszerben az optikai erősítés feltételét.</p>	<p>Elfogadja és vizsgálataiban során szem előtt tartja az atomi nívók között létrejövő átmenetek bekövetkezési valószínűségének az átmeneti dipólmomentumtól való függését.</p>	
---	---	---	--

**Tantárgy felelőse (név, beosztás, tud. fokozat): Dr. Szatmári Sándor, egyetemi tanár, a fizikai tudomány doktora**

**Tantárgy oktatásába bevont oktató(k), ha van(nak) (név, beosztás, tud. fokozat): Dr. Tóth Zsolt, tudományos főmunkatárs, PhD**