

1.2 Kötött mikrorészecskék állapotának kvantitatív leírása

A mikroobjektumokkal kapcsolatos jelenségek közül talán a legérdekesebbek és legfontosabbak azok, amelyek az atomi rendszerekben játszódnak le. Ezeknek a megértéséhez mindenképp a kötött állapotban lévő részecskék (pl. atomi elektronok) viselkedésének kvantitatív leírására van szükség. Az alábbiakban ezzel a problémával foglalkozunk.

1.2.1 Kötött részecske stacionárius állapotai, a Schrödinger-egyenlet

A mikrorészecskék viselkedésének két igen jellegzetes megnyilvánulása az, hogy: *a)* a kötött részecske csak meghatározott, diszkrét energiaértékeket vehet fel, és *b)* a részecskéknek hullámszerű tulajdonságaik vannak, és leírásuknál igen fontos szerepet játszik egy a körülmények által meghatározott hullámfüggvény. A kérdés az, hogyan lehet a hullámfüggvényt és a rendszer lehetséges energiáit elméleti úton, általános fizikai törvények alapján meghatározni.

Annak érdekében, hogy a fenti kérdésre lehetőleg egyszerű, de a lényegét mégis tartalmazó választ adhassunk, a feladatot egyszerűsíteni kell: a kötött részecskéknek csak az időben állandósult, *stacionárius állapotait* vizsgáljuk.

Számos tapasztalat utal arra, hogy a részecskék hullámszerű viselkedése akkor kerül előtérbe, ha mozgásukat valamilyen módon egy kis térrészre korlátozzuk. Tipikusan ilyen eset az atomban kötött, az atom térfogatába bezárt elektron.

Első durva becslésként nézzük meg, hogy milyen eredményre jutunk, ha az atomi elektronhoz hullámot rendelünk. Mivel az atom külső behatás nélkül energiát nem ad le, tehát valamilyen állandósult állapotban van, elektronjának hullámszerű viselkedése állóhullámnak felelhet meg. Ha feltételezzük, hogy az "elektronhullám" r sugarú stacionárius pályán mozog, akkor a körpálya mentén elképzelt állóhullám kialakulásának feltétele az, hogy a körpályán éppen egész számú hullámhossz "férjen el", azaz

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

ahol n egész szám. Felhasználva a $p = h/\lambda$ egyenletet, és azt, hogy az elektron impulzusmomentuma a körpályán $L = rp$, a stacionárius pálya kialakulásának feltételére az

$$L = n\hbar$$

összefüggést kapjuk, ami azonos a Bohr-modellben önkényesen választott, és a H-atom esetén helyes diszkrét energiaértékeket eredményező kvantumfeltétellel. Az állóhullám-kép tehát ebben az esetben helyes eredményre vezetett.

Az a tény, hogy a Bohr-féle kvantumfeltétel a kötött részecskéhez rendelt állóhullám segítségével levezethető, azt sugallja, hogy a kötött részecskék állandósult állapotainak leírásánál érdemes az állóhullámokat leíró stacionárius hullámegyenlet felhasználásával próbálkozni. Már kvalitatív megfontolásokból is látható, hogy ez az egyenlet valóban elvezethet a probléma megoldásához, hiszen térben korlátozott hullámra vonatkozik, és időben állandósult megoldások csak diszkrét hullámhossz illetve hullámszám értékek mellett lehetségesek.

Foglalkozzunk olyan esetekkel, amikor a részecske mozgása egyetlen koordinátával jellemezhető, azaz a probléma egydimenziós. Egy egydimenziós klasszikus állóhullám $\psi(x)$ amplitúdó-eloszlását a

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$$

egyenlet adja meg, ahol k a hullámszám. A mikroobjektumokra való "áttérés" eddig is használt technikáját alkalmazva, fejezzük ki a hullámszámot a részecske impulzusával a részecske-hullám kettősséget kifejező egyenlet segítségével:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h\omega}{2\pi c} = \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k,$$

tehát

$$k = \frac{p}{\hbar}.$$

Ekkor az egyenlet a

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

alakot ölti. Mivel a részecskékre vonatkozó közvetlen tapasztalataink elsősorban az energiával kapcsolatosak (pl. atomi energiaszintek), fejezzük ki az impulzust az E_m mozgási energiával

$$p^2 = 2mE_m.$$

Ezután, felhasználva az

$$E = E_m + U(x)$$

összefüggést, p^2 kifejezhető az E teljes energiával és az általában helyfüggő $U(x)$ potenciális energiával:

$$p^2 = 2m(E - U(x)).$$

Ezzel a $\psi(x)$ függvényre vonatkozó egyenletünk

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

Ez az egyenlet, eredeti szándékunknak megfelelően, olyan állóhullám egyenlet, amelyben részecskejellemzők (E , m) is szerepelnek. Emellett az állóhullám-egyenletre vonatkozó tapasztalataink alapján azt várjuk, hogy az egyenletnek csak az E energia diszkrét értékei mellett vannak megoldásai. Vagyis az egyenlet alkalmas lehet a mikrorészecskék leírására.

A tapasztalat azt mutatja, hogy ez az egyenlet a kötött részecskék hullámfüggvényét és energiaértékeit valóban jól megadja, és így a mikrorészecskék mozgásának leírásával foglalkozó új tudományág, a *kvantummechanika* egyik alapvető törvényévé vált. Megtalálójáról az egyenletet *Schrödinger-egyenletnek* nevezik.

1.2.2 A Schrödinger-egyenlet néhány egyszerű alkalmazása

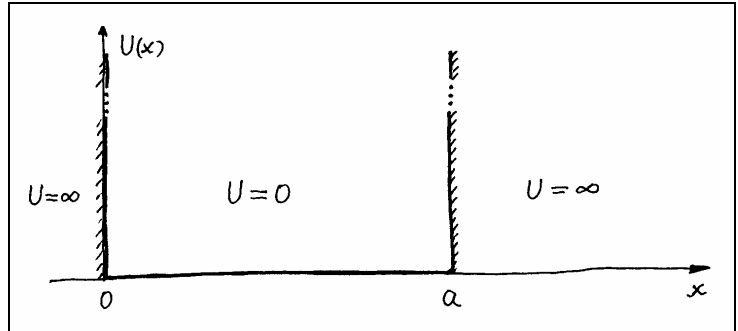
Sajnos a legtöbb valóságos esetben a Schrödinger-egyenlet nehezen oldható meg, ezért az alábbiakban az egyenlet megoldásának bemutatásaként csupán a legegyszerűbb esetet tárgyaljuk részletesen, ahol az $U(x)$ potenciális energiát speciálisan választjuk meg. Egyéb esetekben csak a megoldás kiinduló összefüggéseit és az eredményeket mutatjuk be.

1.2.2.1 Részecske végtelen magas potenciálfalak között

Számszerűen is könnyen végigvihető az egyenlet megoldása, ha egy olyan részecske viselkedését vizsgáljuk, amely az x -tengely mentén mozoghat, és mozgását mindkét oldalról végtelen magas potenciálfal gátolja, azaz potenciális energiája az $x \leq 0$ és az $x \geq a$ helyeken végtelen (ábra).

Határozzuk meg a részecske tartózkodási valószínűségét megadó $\psi(x)$ hullámfüggvényt és a részecske lehetséges energiáit.

A feladat a Schrödinger-egyenlet segítségével oldható meg. Mivel a részecske energiája végtelen nem lehet, csak a $(0, a)$ tartományban tartózkodhat. Itt potenciális energiája $U = 0$, így a megoldandó egyenlet



$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = 0.$$

A végtelen magas potenciálfal miatt a részecske tartózkodási valószínűsége és hullámfüggvénye a $(0, a)$ tartományon kívül és (a folytonossági követelmény miatt) a tartomány határán is nulla. Így a Schrödinger-egyenlet megoldásának peremfeltételei a következők:

$$\psi(0) = 0$$

$$\psi(a) = 0$$

Ez az egyenlet egy olyan állóhullám-egyenlet, amelyet már megoldottunk a mechanikában (két végén rögzített húr). Láttuk, hogy a határfeltételeknek megfelelő megoldás

$$\psi(x) = A \sin(kx),$$

és esetünkben

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

Azt is láttuk, hogy a határfeltételek miatt k csak meghatározott k_n értékeket vehet fel:

$$k_n = n \frac{\pi}{a}$$

(n egész szám).

Mivel k tartalmazza az energiát, az energia értéke sem lehet tetszőleges, hanem csak a fenti egyenletekből következő

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

értékeket vehet fel.

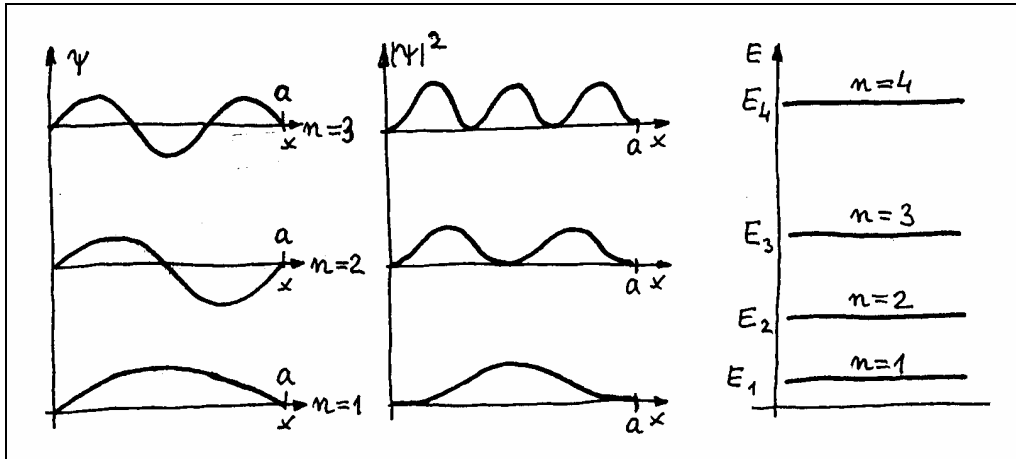
A fentiek figyelembevételével a Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right).$$

Mint említettük, ez a megoldás azonos a két végén rögzített rugalmas kötélben kialakuló állóhullám amplitúdó-eloszlásával. Vagyis ezt az eredményt a stacionárius állapot állóhullám-modellje alapján is megkaphattuk volna (vö. a Bohr-féle kvantumfeltétel "levezetése").

A hullámfüggvényeket, a részecske tartózkodási valószínűségeit és a részecske lehetséges energiáit különböző n értékek esetén az alábbi ábra mutatja.

A megoldás furcsasága az, hogy a részecske nem egyforma valószínűséggel található a $(0, a)$ intervallum különböző helyein.



A megoldásban szereplő A konstans abból a feltételből (*normálási feltétel*) kapható meg, hogy a részecske megtalálási valószínűsége a teljes $(0, a)$ intervallumban 1 , tehát

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = A^2 \frac{a}{2} = 1.$$

Ebből $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$, és így a hullámfüggvény normált alakja

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

1.2.2.2 A harmonikus oszcillátor

Gyakorlatilag is fontos eset, amikor egy részecskét fogva tartó erő ún. lineáris erőtvénnyel adható meg:

$$F = -Dx$$

(D az erőkonstans).

Tudjuk, hogy ilyenkor egy m tömegű részecske $\nu = \sqrt{\frac{D}{m}}$ frekvenciájú harmonikus rezgőmozgást végez az $x = 0$ hely körül, és a potenciális energiája

$$E_h = \frac{1}{2} Dx^2.$$

Ha a rezgő részecske (vagy a gyakran használt elnevezéssel harmonikus oszcillátor) egy mikrorészecske, akkor leírása természetesen a Schrödinger-egyenlettel történik, de most az $U(x)$ potenciális energia helyébe ezt a konkrét kifejezést kell behelyettesíteni:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} Dx^2 \right) \psi(x) = 0$$

Sajnos az x^2 -es potenciális energia-tag miatt ez az egyenlet már nem oldható meg olyan egyszerűen, mint állandó U esetében, ezért a megoldás matematikai részleteivel nem foglalkozunk, csupán a végeredményt adjuk meg.

Amint az a matematikai elemzésből kiderül, az egyenletnek a normálási feltételt kielégítő megoldása csak akkor létezik, ha az energia meghatározott, diszkrét értéksort (E_n) vesz fel:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{D}{m}},$$

azaz

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$$

(n egész szám).

A ν frekvenciájú harmonikus oszcillátor energiája tehát csak $h\nu$ lépésekben változhat. Emlékeztetünk arra, hogy ez volt az a "matematikai kényszerűségből" bevezetett feltevés, amellyel Planck a fekete test sugárzását értelmezni tudta. Ez az eredmény a kvantummechanikából minden külön feltevés nélkül következik.

Az energia kifejezéséből kitűnik, hogy az oszcillátor energiája nem lehet nulla, hanem van egy legkisebb energiaérték: $E_0 = h\nu/2$. Ez jellegzetesen kvantummechanikai eredmény, amely a határozatlansági összefüggés egy megnyilvánulása: ha ugyanis a részecske energiája nulla lenne, akkor ez azt jelentené, hogy pontosan tudjuk, hogy a részecske az origóban van és az impulzusa nulla, márpedig a határozatlansági összefüggés szerint ezt a két adatot egyidejűleg nem ismerhetjük pontosan.

1.2.2.3 A hidrogénatom, kvantumszámok

A Schrödinger-egyenlet igen fontos alkalmazása az atomi elektronok viselkedésének leírása. Ekkor azonban a probléma három dimenzióssá válik, és általában a potenciális energia-tag is bonyolult lesz. Most a legegyszerűbb atomra, a hidrogénatomra elvégzett számítás eredményeit foglaljuk össze.

Az egy dimenziós esetben láttuk, hogy a kvantált mennyiségek megjelenése mind a klasszikus állóhullám-egyenletnél, mind pedig az egydimenziós Schrödinger-egyenletnél lényegében a határfeltételek következménye volt. Ezért várható, hogy a háromdimenziós esetben három ilyen mennyiség lesz, hiszen mindhárom koordináta mentén meg kell adni a határfeltételeket a hullámfüggvényre. Vagyis az egydimenziós esetben megjelenő, az energiát megszabó n paraméter mellett további kettő megjelenésére számíthatunk. Ezeket a mennyiségeket, amelyek valamilyen mennyiség kvantáltságát fejezik ki, *kvantumszámoknak* nevezik, s az elektron állapotát ezeknek a kvantumszámoknak az értékei jellemzik.

Ahhoz, hogy a hidrogénatom elektronjának viselkedését leírassuk, mindenekelőtt a Schrödinger-egyenletet általánosítanunk kell háromdimenziós esetre. Ebben az esetben a hullámfüggvény természetesen háromváltozós lesz $\psi = \psi(x, y, z)$. Magát az egyenletet a háromdimenziós állóhullám-egyenletből kaphatjuk meg az egydimenziós esetben követett módszerrel. Az eredményül kapott háromdimenziós Schrödinger-egyenlet a következő:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x, y, z)) \psi(x, y, z) = 0$$

Ha ezt az egyenletet a H-atom leírására akarjuk felhasználni, akkor be kell helyettesíteni az adott rendszernek megfelelő potenciális energiát, ami a $+e$ töltésű atommag (proton) és a $-e$ töltésű elektron kölcsönhatásából származik. Ez, mint tudjuk,

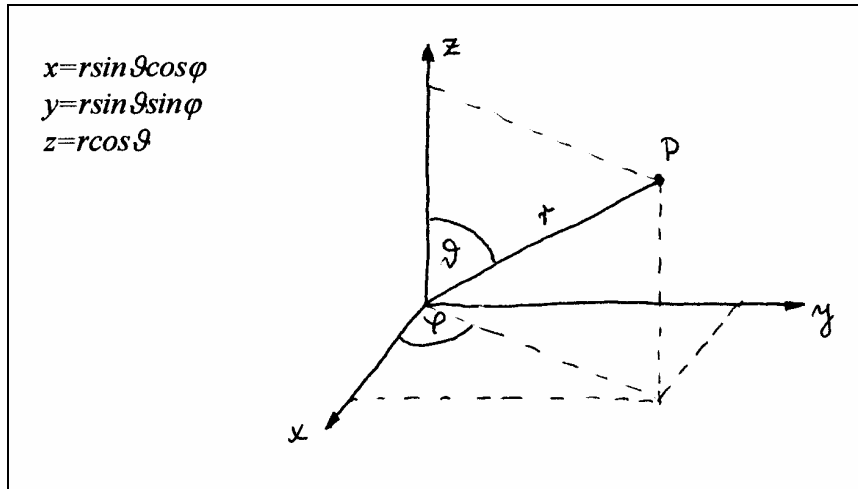
$$U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

ahol $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, az elektron és a mag távolsága. Ezzel az egyenlet az alábbi alakot ölti (a változókat a rövidítés érdekében nem írjuk ki):

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Tekintettel arra, hogy a potenciális energia csak az elektronnak a magtól mért radiális távolságától függ, az egyenlet megoldása várhatóan egyszerűbb, ha átírjuk gömbi polárkoordinátákba (ábra).

Az átírás nem különösebben nehéz, de hosszadalmas, ezért a számolást mellőzzük, és rögtön a végeredményt, a polárkoordinátákba átírt Schrödinger-egyenletet írjuk fel:



$$\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2mr^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Az egyenlet megoldását a változók szétválasztásának módszerével kísérhetjük meg. Írjuk fel a megoldást három egyváltozós függvény (R , Θ és Φ) szorzataként

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

Behelyettesítve ezt a kifejezést a megoldandó egyenletbe, és bevezetve a K_1 és K_2 konstansokat, az egyenlet három egyváltozós, egymástól független differenciálegyenletre esik szét:

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = K_1 \quad (*)$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = K_2 \quad (**)$$

$$\frac{K_1}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) = K_2 \quad (***)$$

A (*) egyenlet formailag azonos az állóhullám-egyenlettel, aminek megoldása

$$\Phi(\varphi) = A \sin(\sqrt{K_1} \varphi + \alpha)$$

(A és α konstansok).

Mint ahogy fizikailag csak egyértékű hullámfüggvény fogadható el (a megtalálási valószínűség ugyanazon a helyen csak egyféle lehet), a periodikus megoldás-függvényre fenn kell állni a

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$$

feltételnek. Ez a feltétel csak akkor teljesül, ha a $\sqrt{K_1}$ konstans egész szám. Vezessük be a

$$\sqrt{K_1} = m_l$$

jelölést, ekkor a Φ függvényre azt kapjuk, hogy

$$\Phi(\varphi) = A \sin(m_l \varphi + \alpha) \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

A (*) egyenlet megoldása során tehát be kellett vezetni egy egész értékeket felvevő m_l paramétert, kvantumszámot, amelyet később részletezendő okból *mágneses kvantumszámnak* neveznek.

A (**) egyenlet megoldása már nem ilyen egyszerű, ezért a számítást nem is részletezzük. A megoldás során kiderül, hogy fizikailag elfogadható $R(r)$ megoldásfüggvényt csak akkor kapunk, ha az egyenletben szereplő E energia az

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

értékek valamelyikét veszi fel, ahol n pozitív egész szám. Ezt a számot, amely tehát az elektron lehetséges energiáit szabja meg, *főkvantumszámnak* nevezik.

Végül a (***) egyenletet megoldva kiderül, hogy a K_2 konstans egy pozitív egész számú értékeket felvevő számmal fejezhető ki. Ha ezt a számot l -lrel jelöljük, akkor a fizikailag elfogadható $\Theta(\vartheta)$ megoldás feltétele

$$K_2 = l(l+1) \quad l=0,1,2,3,\dots$$

Az így kapott l kvantumszámot *mellékvantumszámnak* nevezik.

A Schrödinger-egyenlet megoldása tehát ezektől az egész számoktól függ: minden lehetséges kvantumszám-készlethez tartozik egy hullámfüggvény.

A számítások eredménye az, hogy az elektron állapotát meghatározó hullámfüggvény három – csak egész számú értékeket felvevő – kvantumszámot tartalmaz, amelyeket *fő-, mellék- és mágneses kvantumszámnak* neveznek és rendszerint az n , l és m_l betűkkel jelölik. A hullámfüggvényben ezt a tényt a kvantumszámok feltüntetésével jelzik: $\Psi = \Psi_{n,l,m_l}$

A számításokból az is kiderül, hogy fizikailag értelmes megoldás csak akkor kapható, ha a fenti kvantumszámok között bizonyos összefüggések állnak fenn. Így l értéke nem lehet nagyobb, mint $n-1$, $|m_l|$ pedig maximum l -lrel lehet egyenlő. Ennek megfelelően a kvantumszámok lehetséges értékei:

főkvantumszám: $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

mellékvantumszám: $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

mágneses kvantumszám: $m_l = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, +1, \dots, +(l-1), l$.

1.2.2.4 A kvantumszámok fizikai jelentése

A kvantumszámok – matematikai szerepük mellett – fizikai jelentéssel is rendelkeznek. A részletes számítások szerint a főkvantumszám az *energia* (E) értékét-, a mellékvantumszám az elektron mag körüli mozgásával összefüggő *impulzusmomentum nagyságát* (L)-, a mágneses kvantumszám pedig az *impulzusmomentumvektornak* valamilyen kitüntetett irányhoz viszonyított *beállási irányát* (ha a kitüntetett irány a z -tengely iránya, akkor pl. az impulzusmomentum-vektor L_z z -komponensét; 1. az ábrát) határozza meg.

A számítások eredményeként kapott összefüggések a következők:

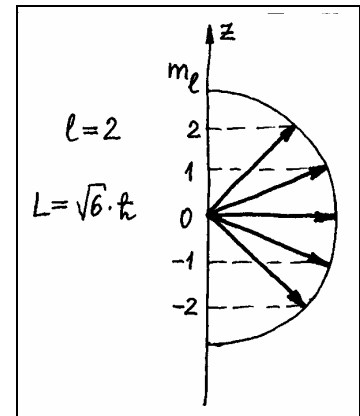
$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

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

$$L_z = m_l\hbar.$$

Mivel a kvantumszámok csak egész értékeket vehetnek fel, az energia-, az impulzusmomentum nagysága- és beállási irányának szöge is csak diszkrét értékeket vehet fel, azaz *kvantált*.

A mágneses kvantumszám elnevezés onnan származik, hogy az impulzusmomentummal együtt jár egy mágneses dipólmomentum is, amely szintén



arányos az m_l számmal. Ha az atom mágneses térben van, akkor az elektron energiája emiatt egy ugyancsak az m_l -lel arányos járulékkal megváltozik.

Az impulzusmomentum, amely a hidrogén atom fenti tárgyalásában szerepel, az elektronnak a mag körüli mozgásából származó ún. *pályamomentum*. Kiderült, hogy az elektronnak ezen kívül van egy *saját impulzusmomentuma* ún. *spinje* is, amely a Schrödinger-egyenletből nem származtatható. Ez az elektron belső mozgásaiból (durva hasonlattal élve, az elektron saját tengelye körüli forgásból) származik. A saját impulzusmomentum vektorának nagysága

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

ahol $s = \frac{1}{2}$, és a vektor a külső térhez viszonyítva kétféleképpen állhat be. A vektornak a tér irányára (pl. a z tengely irány) vett vetületét az

$$L_{sz} = m_s \hbar$$

összefüggés adja meg, ahol $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$. Az új kvantumszám:

m_s *spinkvantumszám*, amelynek lehetséges értékei: $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Az atomi elektron *állapotát* a fenti *négy kvantumszám* határozza meg, a kvantumszámokhoz tartozó hullámfüggvényből pedig kiszámítható, hogy az atommag környezetében az elektron adott helyen milyen valószínűséggel található (az egységnyi térfogatban való megtalálás valószínűsége: $|\psi|^2$).

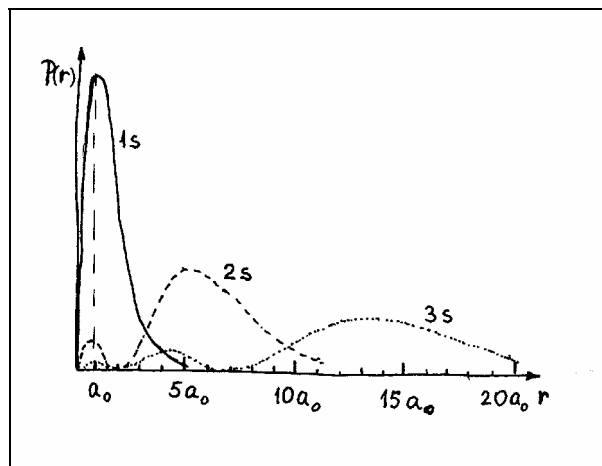
Az elektron állapotának jellemzésénél történelmi- illetve célszerűségi okokból különböző szakkifejezéseket alkalmaznak. Az állapot jellemzésére a leggyakrabban használt adat az energia és az impulzusmomentum nagysága, amiket az n és l értékei egyértelműen megadnak. A spektroszkópiában szokásos jelölés szerint azonban az impulzusmomentum nagyságát gyakran nem számokkal, hanem az egyes számokhoz rendelt betűjelekkel adják meg: az $l=0, 1, 2, 3, \dots$ értékekhez rendre az s, p, d, f, \dots betűket rendelik hozzá. Így pl. az $n=1, l=0$ kvantumszámoknak megfelelő állapot az $1s$ állapot, az $n=2, l=1$ kvantumszámoknak megfelelő állapot a $2p$ állapot, stb. Konkrét atom esetén a jelölést gyakran kiegészítik azzal, hogy megadják az adott állapotban lévő elektronok számát is. Ha pl. az $1s$ állapotban két elektron van az adott atomban, akkor ennek jelölésére az $1s^2$ szimbólumot használják. Adott atom elektronjainak a lehetséges állapotokban történő „elhelyezkedését” az atom elektronkonfigurációjának nevezik; például a 3 elektront tartalmazó Li esetén ez az alábbi szimbólummal adható meg: $1s^2 2s^1$.

Az egyes n értékekhez tartozó állapotok összességét *héjnak* nevezik, és a héjak jelölésére is gyakran betűket használnak: az $n=1, 2, 3, 4, \dots$ értékeknek megfelelő héjak nevei rendre $K-, L-, M-, N-, \dots$ *héj*. Ehhez kapcsolódóan az egyes n, l értékpárokhoz megfelelő állapotok összességét gyakran *alhéjnak* nevezik. Az $n=2$ -nek megfelelő K héj például két alhéjból áll: az $l=0$ értékeknek megfelelő $2s$ és az $l=1$ értéknek megfelelő $2p$ alhéjból.

Adott állapotú elektron hullám-függvényének ismeretében az elektron megtalálási valószínűsége a mag körül szemléletes ábrákon is megjeleníthető. Az alábbi sematikus ábrán látható például az, hogy a hidrogén atom $1s, 2s$ és $3s$ állapotban lévő elektronjának $P(r)$ megtalálási valószínűsége hogyan változik a magtól mért távolság függvényében (Mivel a megtalálási valószínűség függ attól, hogy mekkora távolságintervallumra vonatkozik, az ilyen ábrákon az egységnyi távolság-intervallumban való megtalálás valószínűségét ábrázolják). Az ábrán a magtól mért távolságot egy speciális hossz, az ún. *Bohr-sugár* (a_0) többszöröseként adjuk meg. Ez

a távolság a Bohr-modellben az alapállapotban ($1s$ állapot) lévő elektron „pályasugara”.

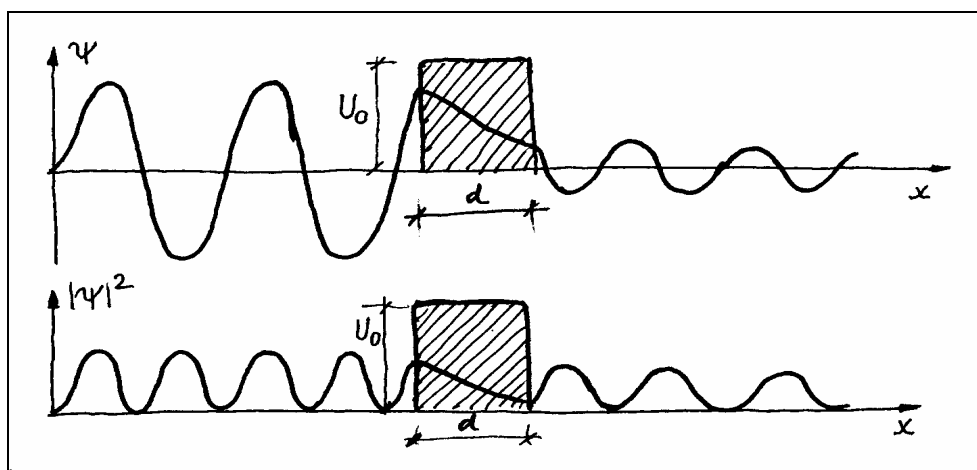
Látható, hogy az $1s$ állapotban az elektron a magtól a Bohr által megadott a_0 távolságban található legnagyobb valószínűséggel. Ez az eredmény a Bohr-modellt bizonyos értelemben igazolja, más értelemben cáfolja: igaz, hogy az elektron legtöbbször a magtól a Bohr-sugárnak megfelelő távolságban található, de megtalálható másutt is, szemben a Bohr-modellben szereplő határozott pályasugárral.



A hullámfüggvényből kiszámítható az elektron tartózkodási valószínűségének iránytól való függése is. A számítások szerint az összes s -állapotban ($l=0$) az elektron előfordulási valószínűsége nem függ az iránytól (az eloszlásfüggvény gömbszimmetrikus), azaz a magtól mért megadott távolságban az elektron minden irányban ugyanolyan valószínűséggel fordul elő. Az $l>0$ állapotokban az előfordulási valószínűség irányfüggése l növekedésével egyre bonyolultabbá válik, az elektron különböző irányokban más és más valószínűséggel található.

1.2.3 Az alagúteffektus

Igen érdekes eredményt kapunk, ha olyan részecske viselkedését vizsgáljuk, amely véges magasságú és szélességű potenciálfalak között helyezkedik el, és energiája kisebb, mint a fal magassága. A Schrödinger-egyenletet ilyen esetre megoldva azt találjuk, hogy a hullámfüggvény, és így a részecske $|\psi|^2$ megtalálási valószínűsége, nem nulla a potenciálfalon kívüli pontokban sem (ábra). Eszerint véges valószínűsége van annak, hogy a részecske a



falon kívül megtalálható, holott a falon való átjutáshoz nincs elegendő energiája.

Ezt a klasszikus fizika törvényei szerint elképzelhetetlen jelenséget találóan *alagúteffektusnak* nevezték el.

A Schrödinger-egyenlet megoldása útján megkaphatjuk a részecske potenciálfalon való áthaladásának, vagyis az alagúteffektus bekövetkezésének w valószínűségét is, ami az ábra jelöléseivel:

$$w \propto \exp \left\{ -2d \left(\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \right)^{\frac{1}{2}} \right\}$$

Eszerint, bár a részecske klasszikus értelemben "szabálytalanul" hatol át a potenciálfalon, annak jellemző adatai mégis befolyásolják a viselkedését: átjutásának valószínűsége exponenciálisan csökken a potenciálfal vastagságával (d), s annál kisebb valószínűséggel jut át, minél távolabb van az energiája (E) a falon való átmenethez klasszikusan szükséges energiától (U_0), vagyis minél nagyobb az $U_0 - E$ energiakülönbség.

A mikrorészecskékről kialakított fenti kép és a Schrödinger-egyenlet helyességét támasztja alá, hogy az alagúteffektus létezését számos kísérleti tapasztalat igazolja. Alagúteffektussal közlekednek pl. az elektronok a villanykapcsoló bekapcsolásakor érintkezésbe hozott fémlapok között, de ilyen módon lépnek ki az atommag belsejéből az alfa sugárzásban terjedő alfa részecskék is (l. 3. fejezet). Az alagúteffektuson alapul az anyagok atomjainak elrendezését láthatóvá tevő alagútmikroszkóp (gyakran használt rövidítése: STM=Scanning Tunneling Microscope).

1.2.4 Pauli-elv, az atomok elektronszerkezete

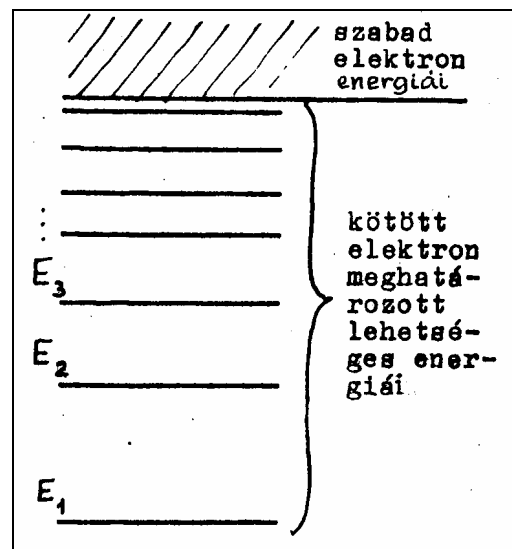
Láttuk, hogy az atomi elektront 4 kvantumszám (n, l, m_L, m_S) jellemzi, amelyek csak diszkrét értékeket vehetnek fel. Fizikailag ez azt jelenti, hogy az elektron energiája (jellemzője n), pálya impulzusmomentumának nagysága (jellemzője l), a pálya impulzusmomentum-vektor iránya (jellemzője m_L), és a spinmomentum iránya (jellemzője és m_S) nem lehet tetszőleges.

Az elektronállapot fontos jellemzője az energia. Egy atomi elektron lehetséges energiáinak sorozatát sematikusán az ábra mutatja. A szabad állapot energiái pozitívak, a kötött állapot energiái negatívak. Az elektronnak az atomból történő eltávolításához a 0 szint- és az elektron energiaszintjének különbségével egyenlő munka szükséges: ez az *ionizációs energia* (az elektront elvesztett atomot ionnak nevezik). Mivel az energia az elektron állapotának csak egyik jellemzője, az egyes energiaszinteken – a többi állapotjellemző értékeitől függően – különböző állapotú elektronok lehetnek.

Fontos tapasztalati ténytet fejez ki az ún. *Pauli-elv*, amely szerint *egy atomi rendszeren belül csak különböző állapotú elektronok lehetnek*, vagyis csak olyanok, amelyeknek legalább egy kvantumszáma eltér a többiétől.

Mivel adott n (adott energia) esetén a három másik állapotjellemző csak véges számú különböző értéket vehet fel (l. 2.2.2.3 pont), *adott energiaszinten csak meghatározott számú elektronállapot ("hely") van*. Ennek az a következménye, hogy a több elektront tartalmazó atomokban az elektronok nem lehetnek mind a legalacsonyabb energiájú állapotban, hanem a rendszám növekedésével az elektronok fokozatosan "feltöltik" a magasabb energiájú állapotokat.

A kvantumszámokra vonatkozó szabályok (2.2.2.3 pont) figyelembe vételével kiszámítható, hogy adott alhéjon illetve héjon hány különböző elektronállapot van. Az n, l alhéjon az m_l kvantumszám $2l+1$ számú lehetséges értékének mindegyikéhez kétféle spinbeállítás (az m_s



kvantumszám kétféle értéke) tartozik, így az összes lehetséges állapotok száma $2(2l + 1)$. Az is könnyen belátható, hogy az n héjhoz (az l kvantumszám $n-l$ számú lehetséges értékének megfelelően) $2n^2$ számú különböző állapot tartozik. Ennek megfelelően az s alhéjakon 2-, a p alhéjakon 6-, a d alhéjakon 10 „elektron-hely” van, a K héjon összesen 2-, az L héjon 8-, az M héjon 18 elektron foglalhat helyet.

Az elektronszerkezet kialakulásának ez a törvényszerűsége igen fontos dolog: ez az oka annak, hogy a különböző elektronszámú (rendszerű) atomok kémiai eltérően viselkednek. A számítások szerint (kvalitatívan a Bohr-moddal egyezően) a legmagasabb energiaszinten lévő elektronok vannak legtávolabb a magtól, vagyis ezek az atom legkülső elektronjai. Az atomok kölcsönhatása elsősorban az egymással közvetlen kapcsolatba kerülő külső elektronok révén valósul meg, vagyis az atomok kémiai viselkedését a legmagasabb energiájú, külső elektronok szabják meg. Mivel a Pauli-elvnek megfelelően a különböző elektronszámú atomok külső alhéjai különböznek egymástól, az atomok kémiai sajátosságai is eltérőek¹.

Tudjuk, hogy az elemek a kémiai tulajdonságaik alapján speciális táblázatba (Periódusos rendszer) foglalhatók, amelynek oszlopaiban hasonló tulajdonságú elemek foglalnak helyet. Annak érzékeltetésére, hogy az atomok elektronszerkezete milyen szerepet játszik ebben törvényszerűségben, az alábbi táblázatban bemutatjuk a $Z=19$ -nél kisebb rendszámú (elektronszámú) elemek elektronkonfigurációit.

K héj ($n=1$)			L héj ($n=2$)			M héj ($n=3$)		
rendszám	elem jele	elektronkonfiguráció	rendszám	elem jele	elektronkonfiguráció	rendszám	elem jele	elektronkonfiguráció
1	H	$1s^1$	3	Li	$1s^2 2s^1$	11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
			4	Be	$1s^2 2s^2$	12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
			5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
			6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
			7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
			8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
			9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
2	He	$1s^2$	10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Látható, hogy a Periódusos rendszer oszlopainak a táblázat vízszintes sorai felelnek meg, és az is megállapítható, hogy az egy sorban (tehát a Periódusos rendszer megfelelő oszlopában) található elemek azonos típusú külső alhéján azonos számú elektron van: a külső alhéj típusa és betöltöttsége azonos (ez alól az utolsó sor kivétel).

Az utolsó sorban (a Periódusos rendszer utolsó oszlopában) a kémiai igen stabil nemes gázok (He , Ne , Ar) vannak, amelyeknél egy külső alhéj éppen betöltődik (s^2 vagy p^6). Az ilyen elektronkonfigurációk a tapasztalat és az elméleti számítások szerint is energetikailag kedvezőek.

A 18-nál nagyobb rendszámú elemeknél az elektronállapotok betöltődésének rendje több esetben eltér a fenti sémától), a periódusok és elektronkonfigurációk fenti összefüggése azonban továbbra is érvényes. (Pl. a $Z=19$ rendszámú káliumban a 19-edik elektron nem a $3d$ -alhéjra, hanem a $4s$ alhéjra kerül, de a $4s^1$ külső alhéjnak megfelelően a táblázatunk első

¹ Az atomok kémiai kölcsönhatása szintén leírható a Schrödinger-egyenlet segítségével. Ilyenkor a kölcsönható atomok összes kölcsönhatásából származó helyzeti energiát kell az egyenletbe beírni, és az egyenlet megoldása után választ kapunk arra a kérdésre, hogy a két atom alkot-e kötött rendszert (vegyületet) vagy nem, ha alkot akkor az atomok elektronjai milyen állapotokba kerülnek.

sorában, tehát a Periódusos rendszer első oszlopában foglal helyet, összhangban a *Li*-hoz, és *Na*-hoz hasonló kémiai tulajdonságaival.

1.2.5 Elektronok szilárd testekben

Az anyagok számos fontos tulajdonságát az elektronok viselkedése határozza meg. Itt egy egyszerű modellen mutatjuk be azokat a változásokat, amelyek az elektronok viselkedésében a különálló atomoknak szilárd testté (kölcsonható atomokká) történő egyesítésekor következnek be.

Energiasávok kialakulása és hatása az elektronok viselkedésére

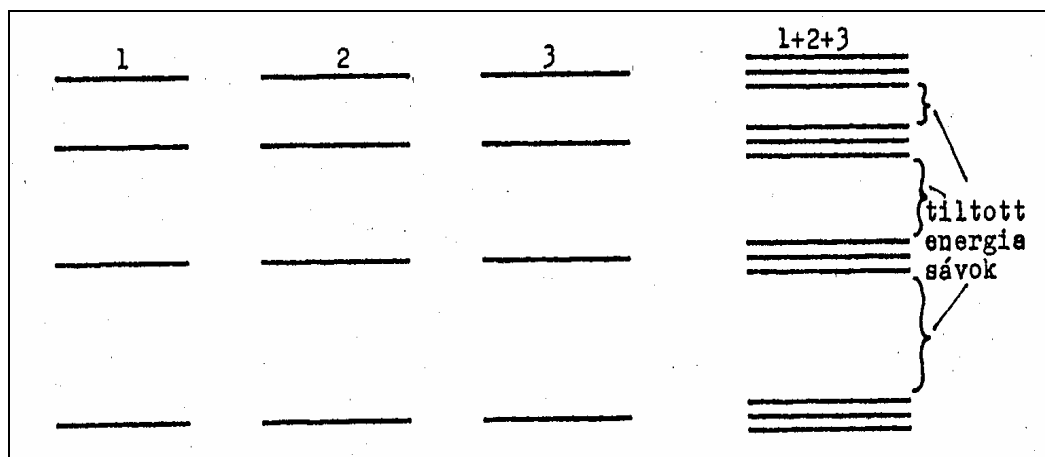
A szilárd anyagok elektronjainak vizsgálatánál az anyagot alkotó különálló atomok elektronjainak sajátságából indulunk ki, majd megvizsgáljuk az atomok kölcsönhatásának következményeit.

A szabad atomban az elektronok meghatározott – és a Pauli-elvnek megfelelően, egymástól eltérő – kvantumszám-négyesekkel jellemzett állapotokban vannak. Adott energiaszinten meghatározott számú elektronállapot van, és az elektronoknak az energiaszinteken való elhelyezkedése szerint az atomoknak a következő két alaptípusa van:

- az elektronok száma olyan, hogy bizonyos számú energiaszintet betöltenek, de az elektront tartalmazó legmagasabb szint csak részben van betöltve,
- az elektronok száma olyan, hogy az elektront tartalmazó legmagasabb energiaszintet éppen betöltik, a következő szint tehát üres.

1.2.5.1 Elektronállapotok szilárd anyagban

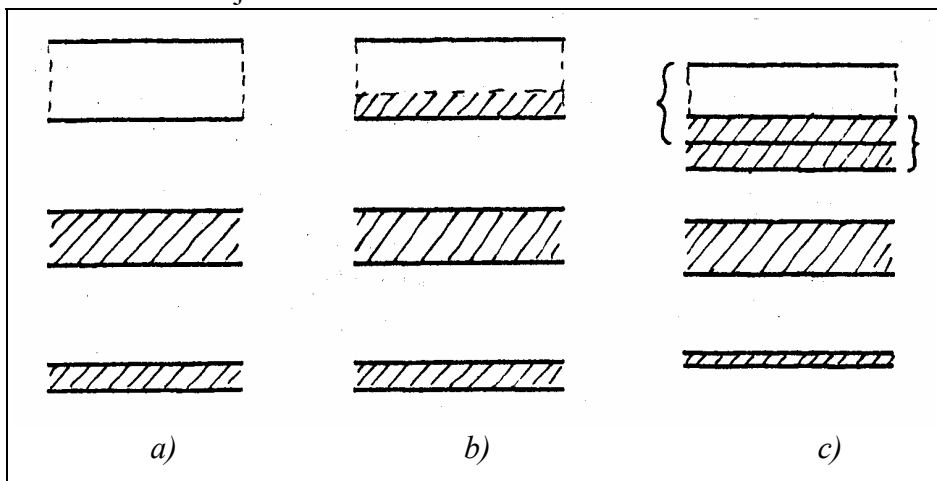
Több, azonos atomot rendezett szilárd testté egyesítve, az új rendszerbe azonos állapotú elektronok kerülnének (annyi, ahány atomból a rendszert létrehoztuk). Ez a Pauli-elv szerint nem lehetséges, ezért az eredetileg azonos állapotú elektronok mindegyike egy kicsit eltérő energiaszintre kerül, az *atomi energiaszintek felhasadnak* (ábra).



Makroszkopikus méretű testben ez nagyságrendben 10^{23} számú alszintet jelent. A felhasadás mértéke kicsi: az alszintek energiakülönbsége 10^{-42} J nagyságrendű, ami az elektronok számára gyakorlatilag *szabad mozgást tesz lehetővé az alszintek között* (a hőmozgás átlagos energiája szobahőmérsékleten kb. 10^{-21} J).

A kvantumelmélet segítségével kristályos anyagokban a sávokat és az elektronok viselkedését elméletileg számítani lehet. Elméletileg kimutatható, és kísérletekkel igazolható, hogy a sávok szélességét és egymáshoz viszonyított helyzetét az atomok közötti kölcsönhatás, a sávok betöltöttségét pedig az atomi energiaszintek betöltöttsége határozza meg. A három lehetséges elrendeződés a következő (ábra):

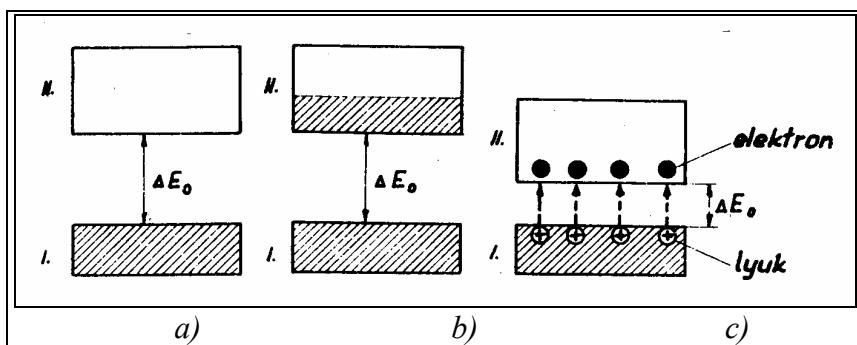
- a kialakult sávok egymást nem fedik át, és csak betöltött és üres sávok vannak (*a* ábra).
- a kialakult sávok egymást nem fedik át, és a legfelső - elektronokat tartalmazó - sáv részben betöltött (*b* ábra)
- az eredetileg *a* ábra szerinti sávrendszer felső üres és betöltött sávjai átfedik egymást (*c* ábra), ilyenkor az elektronok a legalacsonyabb energiájú helyeket foglalják el, ezért mindkét sáv részben betöltött lesz, vagyis lényegében a *b* ábra szerinti sávstruktúra jön létre.



A lehetséges energiaértékeket tartalmazó sávok közötti energiatartományok az elektronok számára nem megengedettek, ezeket a sávokat *tilos sávoknak* nevezik. Külső elektromos tér hatására a két alaptípusba sorolható anyagok elektronjai eltérő módon viselkednek, ami alapvetően meghatározza elektromos tulajdonságaikat. Ennek megfelelően az anyagok az alábbi csoportokba oszthatók.

Szigetelők

Ha a legfelső sáv teljesen betöltött, akkor az elektronok a sávon belül nem változtathatják az energiájukat, így külső tér általában nem képes mozgásba hozni azokat. Ahhoz, hogy az ilyen anyagokban elektromos áram jöjjön létre, a legfelső



betöltött- és üres sáv közötti *tilos sáv szélességének* megfelelő energiát kell az elektronnal közölni. Erre a szokásos elektromos terek általában nem képesek, így (ha nincs egyéb energiaforrás; *l.* alább) az ilyen anyagok vezetőképessége igen kicsi, ezek az anyagok a *szigetelők* (*a* ábra).

Vezetők

Ha a legfelső sáv részben betöltött, akkor az elektronok ebben a sávban gyakorlatilag folytonosan növelhetik az energiájukat, így külső térrel mozgásba hozhatók. Az ilyen anyagok elektromos vezetőképessége nagy, ezek a *vezetők* (*b* ábra). A legfelső, részben betöltött sávot *vezetési sávnak* nevezik.

Félvezetők

Ha egy szigetelő hőmérsékletét emeljük, akkor a hőmozgás átlagos energiája nő. Így egyre nő annak a valószínűsége is, hogy egy szigetelőben a hőmozgás hatására elektronok jutnak az eredetileg üres sávba, vagyis felgyorsítható töltéshordozók keletkeznek. Szobahőmérsékleten számos szigetelő-sáv szerkezetű anyagnak jelentős vezetőképessége van, mert a hőmozgás az említett módon töltéshordozókat hoz létre. Az ilyen anyagokat *félvezetőknek* (c ábra) nevezik.

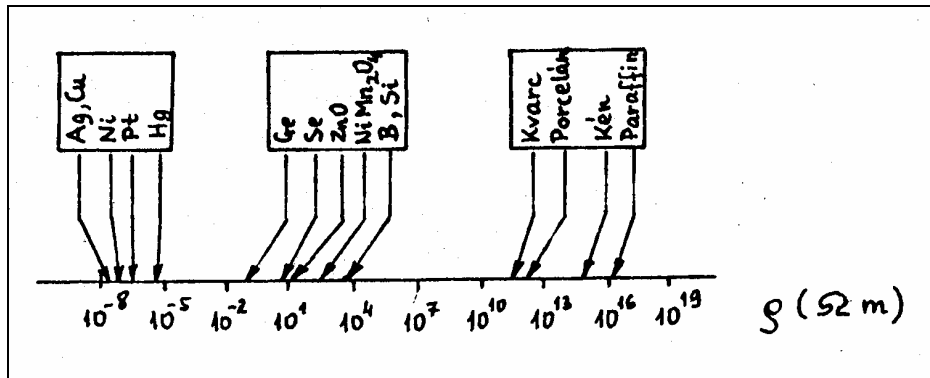
Az elektronnak az eredetileg üres sávba való átmenete egyszerre két töltéshordozót hoz létre: megjelenik egy elektron a vezetési sávban, és keletkezik egy üres hely a betöltött sávban (amit *vegyérték-sávnak* neveznek). A keletkezett üres helyek lehetővé teszik az elektronmozgást a vegyérték-sávban, ami formálisan úgy is leírható, hogy a pozitív töltésű elektron-hiányok, az ún. *lyukak* viselkednek töltéshordozóként. A termikus gerjesztés tehát *elektron-lyuk párokat* hoz létre.

Mivel a töltéshordozókat a hőmozgás kelti, várható, hogy a félvezetők vezetőképessége (illetve fajlagos ellenállása) erősen hőmérsékletfüggő.

1.2.5.2 Sáv szerkezet és fajlagos ellenállás

Régi tapasztalat, hogy a legjobb vezető és a legjobb szigetelő anyagok vezetőképessége illetve fajlagos ellenállása kb. 25 nagyságrenddel tér el egymástól. A magyarázatot a sávmélet adta meg, amely fizikai okokkal tudja értelmezni a tapasztalati úton megállapított vezető-félvezető-szigetelő felosztást is. Az ábrán különböző anyagok fajlagos ellenállásai és az említett felosztásnak megfelelő tartományok láthatók.

A vezetést jellemző mennyiségek, fajlagos ellenállás



Ha a töltéshordozók töltése q , átlagos sebessége v , térfogati koncentrációja n , akkor a vezetőnek a töltésszámlálásra merőleges A keresztmetszetén átfolyó áram:

$$I = qnvA.$$

Az Ohm-törvényből következik, hogy az átlagsebesség arányos a térerősséggel (E)

$$v = \mu E,$$

ahol μ a *töltéshordozó mozgékonyága*. Ezzel az áram

$$I = q\mu nEA,$$

az áramsűrűség pedig

$$j = I/A = q\mu nE.$$

Ezt a $j = \gamma E$ összefüggéssel összehasonlítva, a γ vezetőképességre azt kapjuk, hogy

$$\gamma = q\mu n,$$

amiből a fajlagos ellenállás

$$\rho = \frac{1}{\gamma} = \frac{1}{q\mu n},$$

vagyis a vezetési tulajdonságok alapvetően a *töltéshordozók koncentrációjától és a mozgékonyaságtól* függenek.

A fajlagos ellenállás *kinetikus gázelméleti* megfontolásokból közelítőleg kiszámítható, az ellenállás itt a töltéshordozóknak az atomokkal való ütközésével (a szabad úthosszal) hozható összefüggésbe. Az elképzelés a tapasztalattal nem mindig egyezik.

A *kvantummechanikai tárgyalásban* az elektronok mozgását inkább hullámként képzelhetjük el, amely az anyagon való áthaladás során "szóródhat", ami az elektronáram csökkenéséhez vezet, tehát itt a mozgékonyaság - és ezzel a vezetőképesség - csökkenésének oka az elektronok szóródása. Az elmélet szerint az elektronok egy tökéletes kristályrácsban szóródás nélkül mozognak, a tökéletes kristálynak nincs ellenállása. A szóródást és az ezzel összefüggő ellenállást - a klasszikus felfogással ellentétben - nem a rácsban elhelyezkedő atomok, hanem a *rács rendellenességei, a rácshibák* okozzák. Ez a tárgyalás a tapasztalatokkal egyező eredményeket ad.

1.2.5.3 Fajlagos ellenállás vezetőkben, a szupravezetés

Töltéshordozó-koncentráció és mozgékonyaság vezetőkben

A töltéshordozók koncentrációja (n) adott vezetőben meghatározott, de az anyagi minőségtől függ. A *mozgékonyaság* (γ) ezzel szemben adott anyagban is több tényezőtől (hőmérséklet, kristályhibák) függ.

A kvantumelméleti képből a mozgékonyaságot az elektronokat szóró hibák szabják meg. A szórásban jelentős szerepet játszanak a *szennyező atomok* és az anyag atomjainak hőmozgása, az ún. *rácsrezgések*. Ezek a mozgékonyaságot csökkentik, az ellenállást növelik. Az elmélet (és a tapasztalat) szerint a fenti két mechanizmus által okozott fajlagos ellenállás-járulék additív, a rácsrezgések járuléka a hőmérséklettel nő (nem túl alacsony hőmérsékleten azzal arányosan), a szennyezők járuléka pedig arányos a szennyezés-koncentrációval.

A hőmérséklet csökkenésével az ellenállás csökken, de mindig megmarad a szennyezők által okozott rész, amit *maradék ellenállásnak* neveznek.

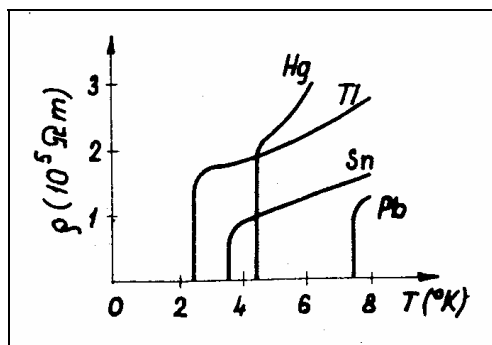
Alkalmazás: A fémek ellenállásának hőmérsékletfüggését *hőmérséklet-mérésre* lehet felhasználni (méréstechnikai szempontból kedvező körülmény, hogy nem túl nagy hőmérsékletváltozások esetén az ellenállás-változás közelítőleg arányos a hőmérsékletváltozással).

A szupravezetés

Bizonyos anyagok a hőmérséklet csökkenésekor egy anyagtól függő T_K kritikus hőmérsékletnél elvesztik az ellenállásukat és a $T < T_K$ hőmérsékleteken fajlagos ellenállásuk nulla (ábra). Ezt a jelenséget *szupravezetésnek*, az ilyen anyagokat *szupravezetőknek* nevezik.

A szupravezető állapot megfelelő erősségű ($H > H_K$) mágneses térrel megszüntethető, a szupravezető állapotban viszont az anyag a külső mágneses teret "kiszorítja magából", a szupravezetőben nincs mágneses tér.

A szennyezések és egyéb rácshibák a jelenséget lényegében nem befolyásolják, ezért feltehető, hogy a szupravezetőben mozgó töltéshordozók a kristályráccsal nem állnak kölcsönhatásban.



A jelenség azzal függ össze, hogy alacsony hőmérsékleten a vezetési elektronok a kristály atomjainak közvetítésével egymással vonzó kölcsönhatásban álló, ún. „Cooper”-párokat képeznek. A párok a rácsrezgésekkel csak akkor tudnak kölcsönhatásba lépni (energiát felvenni), ha a kötésük megszüntetéséhez elegendő energiát kapnak. Alacsony hőmérsékleten ennek valószínűsége igen kicsi, így az *elektronpárok nem tudnak a kristályráccsal kölcsönhatásba lépni*, mozgásuk során tehát nem szóródnak: az ellenállás eltűnik. A hőmérséklet növekedésekor a hőmozgás szétszakítja a párokat, és visszaáll a normális vezetés.

A "klasszikus" szupravezetés igen alacsony (néhány K) hőmérsékleten következik be. Újabban bizonyos fémoxidokban sikerült szupravezető állapotot létrehozni magas (50-100 K) hőmérsékleten. A jelenség magyarázatát egyelőre nem ismerjük pontosan.

Alkalmazás: A szupravezetőben egyszer létrehozott áram igen sokáig megmarad, másrészt nincs Joule-hő, ezért igen nagy áramok, nagy mágneses terek hozhatók létre. Kísérletek folynak számítástechnikában használható memóriák készítésére.

1.3 A lézer működése és alkalmazásai

A hagyományos fényforrások fénye valamilyen módon gerjesztett atomok véletlenszerűen kibocsátott fotonjaiból áll. A lézer olyan fényforrás, amely a fotonokat bizonyos értelemben rendezett módon bocsátja ki, ami miatt a lézerfénynek számos előnyös tulajdonsága van. Működésének megértéséhez a fényelnyelés és fénykibocsátás alapfolyamatait kell megvizsgálunk.

1.3.1 Fény és anyag kölcsönhatásának alapfolyamatai, a lézer alapelve

Vizsgáljunk egy olyan kvantummechanikai rendszert, amelyben az elektronok két diszkrét E_1 és E_2 energiájú állapotban lehetnek, és tegyük fel, hogy $E_1 < E_2$.

Ebben a rendszerben három - az elektromágneses sugárzással kapcsolatos - folyamat mehet végbe:

- 1.) *Abszorpció.* Ez abban áll, hogy az alsó (E_1) energiaszinten lévő elektron egy $h\nu_{12} = E_2 - E_1$ energiájú fotont elnyelve a magasabb (E_2) energiaszintre kerül.
- 2.) *Spontán emisszió.* Ennek során egy magasabb energia-állapotú elektron magától (spontán) az alacsonyabb energiájú állapotba megy át, miközben $h\nu_{12} = E_2 - E_1$ energiájú fotont bocsát ki. A spontán emisszió bekövetkezése véletlenszerű.
- 3.) *Indukált emisszió.* A magasabb energiaszintről az alacsonyabb szintre történő átmenet nem spontán megy végbe, hanem a rendszerbe bejövő, az átmenetnek megfelelő, $h\nu_{12}$ energiájú foton váltja ki (indukálja) az átmenetet. Ennek a folyamatnak fontos sajátossága, hogy az átmenetnél emittált foton nemcsak azonos frekvenciájú az indukáló fotonnal, de a fázisuk is azonos.

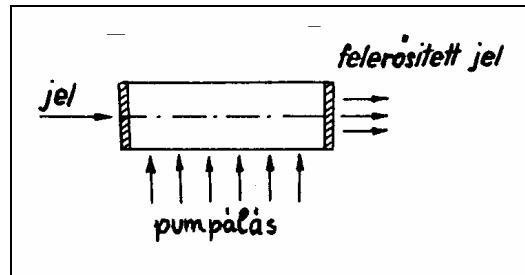
Az indukált emisszió létezése elvileg lehetővé teszi *koherens* fény kibocsátására képes *fényforrás* létrehozását. Ha ugyanis a rendszerbe beérkezik egy, az átmenetnek megfelelő energiájú foton, akkor az az indukált emisszió révén megsokszorozódhat, tehát a rendszer fényerősítőként illetve fényforrásként működhet. A dolog azonban nem ilyen egyszerű.

Ahhoz ugyanis, hogy az indukált emisszió működjön, a rendszerben gerjesztett állapotú atomoknak kell lenni, vagyis az elektronok számottevő részének a magasabb energiájú állapotban kell tartózkodni. Egyensúlyi állapotban azonban az elektronok döntő többsége az alacsonyabb energiájú állapotban van (a betöltöttség exponenciálisan csökken a gerjesztési energiával), így egy beérkező foton nagy valószínűséggel alacsonyabb energiájú elektronnal találkozik, és energiáját átadva az elektronnak, azt a magasabb energiájú állapotba viszi át, miközben maga elnyelődik, vagyis abszorpció következik be.

Ahhoz, hogy a rendszerben az indukált emisszió valószínűsége számottevő legyen, vagyis a rendszert tényleg erősítésre használhassuk, az szükséges, hogy az elektronok száma (populációja) a magasabb energiaszinten lényegesen nagyobb legyen, mint az alacsonyabb szinten. Szaknyelven szólva: *populáció-inverziót* kell elérni. Ez úgy lehetséges, hogy a rendszerben az elektronokat valamilyen külső energiaforrással (ez lehet fény is) folyamatosan gerjesztjük. Ezt a folyamatot a rendszer *pumpálásának* nevezik.

A gerjesztett elektronok természetesen újra visszatérnek az alapállapotba. Ahhoz, hogy az indukált emisszió tényleg működjön, az elektronoknak elegendően hosszú időt kell a felső energiaszinten eltölteni, amit a kvantummechanikai rendszer megfelelő megválasztásával lehet elérni. Ilyen speciális rendszerekkel később foglalkozunk.

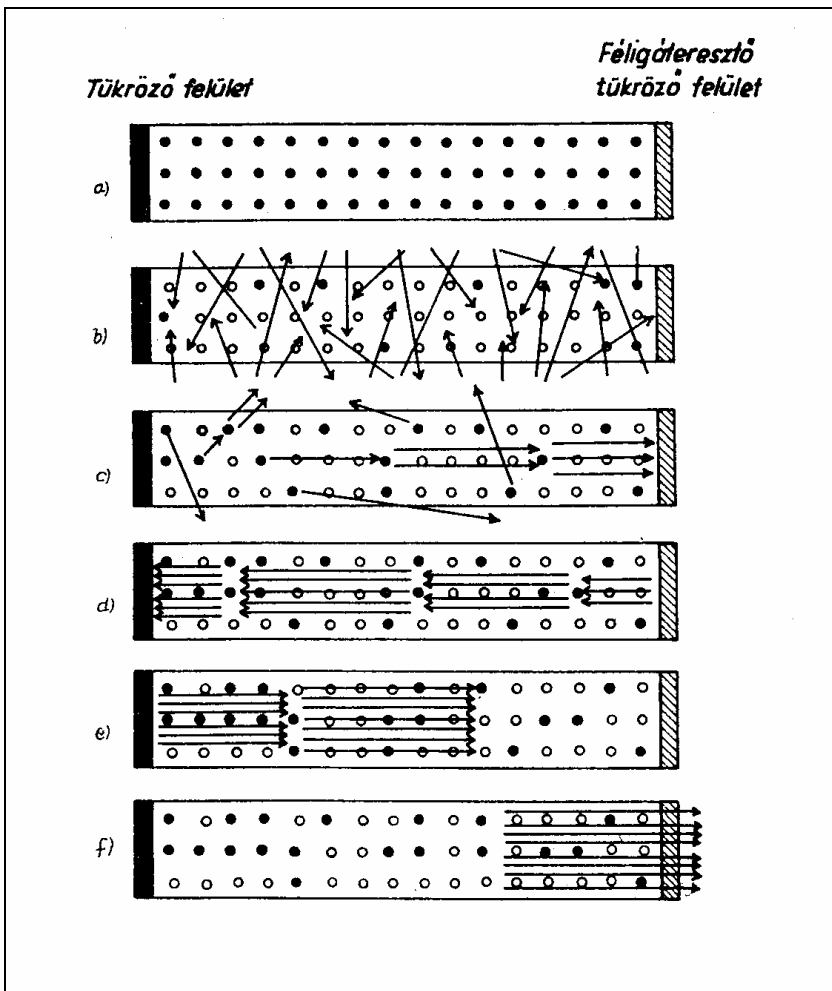
A fenti elven működő fényerősítő sémája a mellékelt ábrán látható. A beérkezett – megfelelő energiájú – fotonokat tartalmazó fényjel a felpumpált (invertált populációjú) anyagon áthaladva indukált emissziók sorozata révén *felerősödik*. A "lézer" elnevezés a "laser" szónak a fonetikus változata, ami az eszköz működési módját megadó kifejezés rövidített alakja: LASER = Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation.



Természetesen jelként magában az anyagban spontán emisszióval létrejött foton is szolgálhat, amit a rendszer felerősít, és így *fényforrásként* működik.

Az erősítés folyamatát vázlatosan a következő ábrán mutatjuk be. A megfelelő kvantumátmeneteket tartalmazó, henger alakúra kiképezett vagy ilyen edénybe helyezett anyag két végén a henger tengelyére merőleges tükröket helyeznek el, amelyek közül az egyik félig áteresztő, vagyis a rászó fény egy részét visszaveri, a másik részét átereszt (a ábra).

A pumpálás hatására a rendszerben bekövetkezik a populáció-inverzió. Eközben egyes



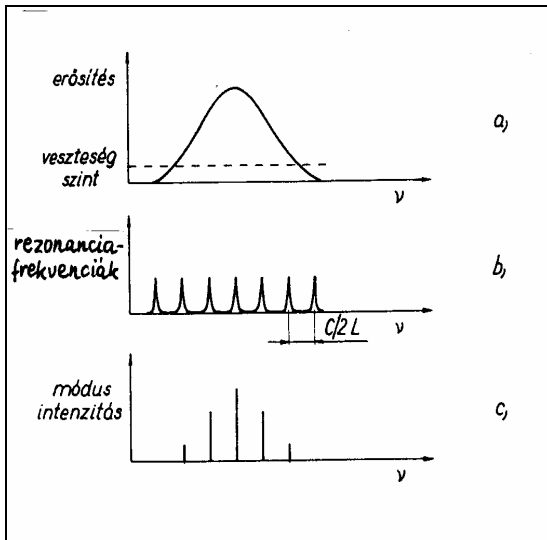
elektronok spontán visszatérnek az alapállapotba, és foton emittálnak (b ábra; az üres körök jelzik a gerjesztett atomokat, a nyilak a fotonokat).

Az így keletkezett fotonok bármelyike létrehozhat indukált emissziót, és így "megduplázódhat", de ha haladási iránya nem párhuzamos a henger tengelyével, akkor az eredeti foton és az általa indukált fotonok is kilépnek a rendszerből.

Bizonyos idő után azonban keletkezik olyan foton, amely a henger tengelyével párhuzamosan halad (c ábra). Az ilyen foton útja mentén indukált emisszióval további fotonokat kelt, és a tükrökön való visszaverődés miatt az

indukált fotonok száma lavinaszerűen növekszik (d, e ábra). A létrejött nagy intenzitású, monokromatikus, koherens és a henger tengelyével párhuzamos sugárzás egy része a félig áteresztő tükrön át kilép a rendszerből, tehát az fényforrásként működik.

A rendszerben keletkező fotonok frekvenciája különböző okokból nem pontosan azonos, hanem egy tartományban oszlik el, ezért itt a lézer-anyag erősítése is egy jellegzetes frekvencia szerinti eloszlást (*a* ábra) mutat. A lézersugárzás nagyfokú monokromatikusága annak a következménye, hogy az egész rendszer erősítése akkor a legnagyobb, ha a két tükör által határolt térben, az ún. *rezonátorban* állóhullámok jönnek létre (rezonancia). Vagyis a rendszer az említett frekvenciasávból kiválasztja az állóhullám-feltételnek megfelelő frekvenciákat (*b* ábra). A tényleges működési frekvenciák a lézer (longitudinális) *módusai*, amelyeknek intenzitását az anyag erősítési görbéje szabja meg (*c* ábra). Amennyiben a pontos monokromatikuság lényeges követelmény, akkor a lézerben - itt nem részletezett módszerrel - a lehetséges frekvenciák közül a középfrekvencia közelében lévő egyetlen frekvenciát választanak ki, vagyis csak ennek a módusnak a felerősödését teszik lehetővé.



1.3.2 Lézertípusok

A lézerek különböző szempontok szerint csoportosíthatók.

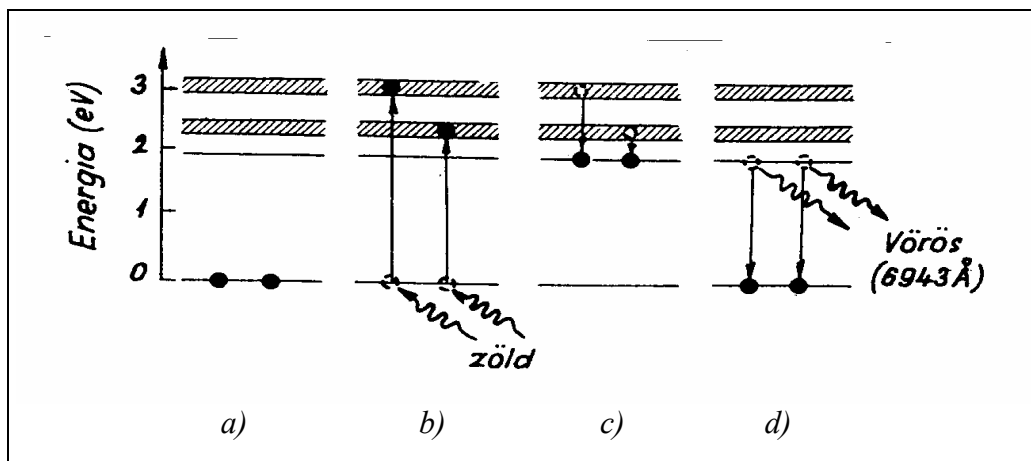
Attól függően, hogy mennyi a lézerfényt adó elektronátmenet energiakülönbsége, különböző frekvencián működő lézerek készíthetők. Vannak az infravörös- a látható- és az ultraibolya tartományban működő lézerek. (A legelső ilyen elven működő eszköz a mikrohullámú tartományban működött, ezt "maser"-nek nevezték.)

A lézerátmenetet adó kvantummechanikai rendszer halmazállapota szerint vannak gáz-folyadék- és szilárdtest lézerek.

Itt részletesebben a történetileg legelőször megvalósított és tipikus szilárdtest lézerrel a *rubinlézerrel*, a leggyakrabban használt gázlézerrel a *He-Ne-lézerrel* és egy perspektivikus, speciális szilárdtest lézerrel a *félvezető lézerrel* foglalkozunk részletesebben.

1.3.2.1 A rubinlézer

A rubinlézer aktív anyaga rubinkristály, amely a színtelen alumínium-oxid kristály krómmal szennyezett változata ($\text{Cr}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$). A rubin piros színe a króm ionok jelenlétének köszönhető, és a lézerhatást adó energianívók is a króm ion energiaszintjei, amelyeknek egy része a kristállyal való kölcsönhatás miatt sávvá

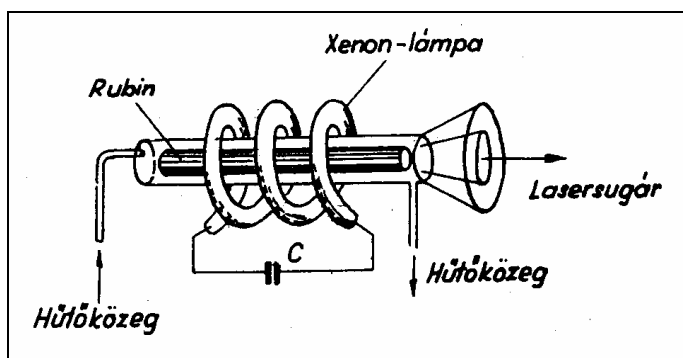


szélesedett (a. ábra).

A kristályt fehér fényvel megvilágítva, a Cr^{3+} ionok a látható fény egy elég széles (zöld és sárga) tartományába eső fotonokat elnyelik. Eközben elektronjaik gerjesztett állapotba kerülnek (b. ábra). Az elektronoknak a gerjesztett állapotból az alapállapotba történő átmenete két lépésben zajlik le. Először a c. ábrán látható közbülső energiaszintre jutnak az elektronok, és eközben az atom nem sugároz ki fényt, hanem energiáját közvetlenül a kristályrácsnak adja át (annak termikus energiája megnő). A közbülső állapotban az elektronok viszonylag hosszú időt (kb. 10^{-3} s) töltenek el, és csak ezután térnek vissza az alapállapotba. A közbülső állapot hosszú élettartama teszi lehetővé, hogy a pumpálást követően itt populáció inverzió jön létre, és az elektronok indukált emisszióval kerülnek az alapállapotba.

A közbülső állapotból az alapállapotba történő átmenetnél az atomok az átmenet energiakülönbségének megfelelő 694.3 nm hullámhosszú vörös fényt bocsátanak ki.

Egy rubinlézer felépítésének vázlatát a mellékelt ábra mutatja. A rubinkristályt henger alakúra csiszolják, és végeit tükröző ezüstréteggel vonják be. A két tükröző réteg egyike a fénynek kb. 30 %-át átterszi, itt jön ki a rendszerből a lézerefény.



A pumpálás igen erős zöld

fényt kibocsátó Xenon-villanócsővel történik, amely kb. 1 ms hosszúságú fényimpulzusokat bocsát ki. Emiatt a lézer is ilyen hosszúságú impulzusokat ad.

A pumpáló fény energiájának csak törtrésze (néhány tized %-a) alakul át lézerefénnyé, a többi hővé alakul, ezért a rendszer hatékony hűtéséről gondoskodni kell.

Egy impulzusban viszonylag kis energia (kb. 10 J) jön ki a rendszerből, de a rövid időtartam miatt ez jelentős teljesítményt (kb. 10 kW) jelent.

Többé-kevésbé hasonlóan működnek a szilárd anyagba (üveg vagy kristály) bevitt Neodímium ionok energiaszintjeit felhasználó, az infravörös tartományban sugárzó neodímium lézerek (Nd-üveglézer, Nd-YAG lézer) is.

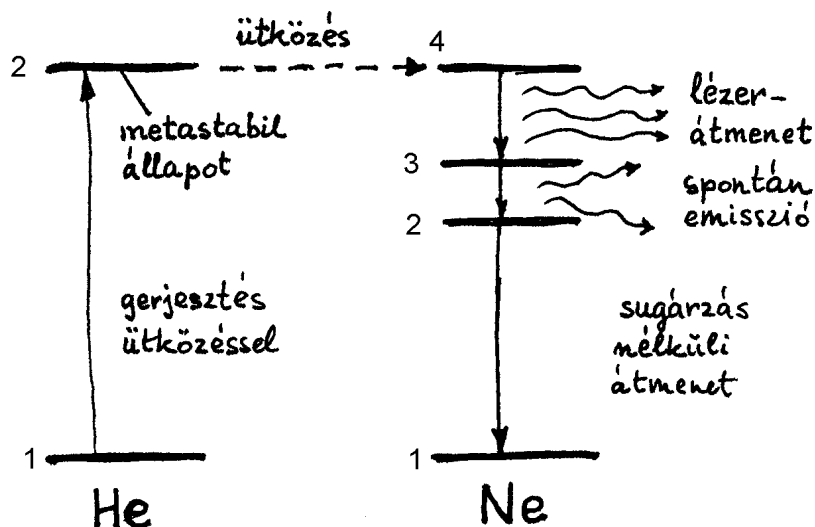
1.3.2.2 A hélium-neon (He-Ne) lézer

A He-Ne lézer a gázlézerek tipikus és leggyakrabban használt típusa. Ebben a lézerben a lézersugárzás hélium-neon gázkeverékben létrehozott gázkisülésben jön létre, ahol a pumpálást a gázkisülés elektronjainak a He-atomokkal való ütközése révén valósítják meg, a lézersugárzás pedig a Ne-atomok két energiaszintje közötti átmenet során jön létre.

A rezonátortükrök között elhelyezett aktív anyag tehát itt egy vékony, henger alakú gázkisülési csőben lévő He-Ne gázkeverék, a pumpáló hatás pedig a kisülési csőben létrehozott elektromos áram.

A He-Ne lézer többféle hullámhosszon működhet, de a leggyakrabban használt változata a 633 nm hullámhosszú vörös fényt kibocsátó lézer. A következő ábrán azokat az energiaszinteket és átmeneteket mutatjuk be, amelyek ennek a lézernek a működésénél szerepet játszanak.

A gázkisülés elektronjai a He-atomokkal ütközve azokat gerjesztik a 2He -vel jelölt szintre (pumpálás), ahol az elektronok viszonylag hosszú ideig maradnak. Emiatt megnő azoknak a He-atomoknak a száma, amelyekben ez a szint elektront tartalmaz. A gerjesztés során a többi He- és Ne-nívókra is kerülnek elektronok, ezek a nívók azonban rövid élettartamúak, ezért az így gerjesztett atomok száma kicsi.



Mivel a Ne-atomnak van egy olyan energiaszintje (az ábrán 4), amely közel van a hosszú élettartamú 2_{He} -nívóhoz, az ütközések során a gerjesztett He-elektronok könnyen átmehetnek a Ne 4 szintjére, és ezáltal ott populáció inverzió jön létre a Ne 3 szintjéhez képest. A szóban forgó lézertény az elektronoknak indukált emisszióval végbemenő 4-3 átmenete során jön létre. A 3 szintről az elektronok spontán sugárzást kibocsátva gyorsan a 2 szintre, onnan pedig sugárzás nélkül az alapállapotba mennek át. Lényeges, hogy a 3 állapot élettartama sokkal kisebb, mint a 4 állapoté, ami megkönnyíti a populáció-inverzió létrehozását. Ez az előnye az itt alkalmazott ún. négy-nívós rendszernek a rubinlézer háromnívós rendszeréhez képest, ahol a lézerátmenet az elektronokat a mindig betöltött alapállapotba juttatja, ami a pumpálás energiaszükségletét megnöveli.

A He-Ne lézer folyamatos üzemű, teljesítménye azonban jóval kisebb, mint az impulzusüzemű szilárdtest lézereké, általában 1-50 mW közötti érték. Elterjedtségét egyszerűségének, alacsony árának és kedvező sugárzási tulajdonságainak köszönheti.

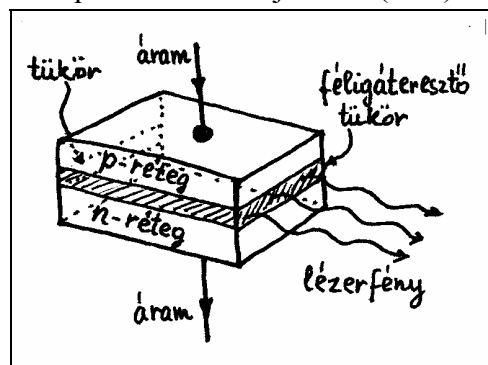
1.3.2.3 A félvezető lézer

Különleges lézertípus a félvezető lézerdióda, amely egy p - n -átmeneten átfolyó áram segítségével létrehozott indukált emisszió alapul. A sugárzás oka az, hogy az átmeneten folyó áram a töltéshordozók sugárzásos rekombinációjával jár (mint a LED esetében).

A pumpálást az átmeneten folyó árammal valósítják meg, a rezonátortükröket az átmenetnek az átmenetre merőlegesen polírozott peremén alakítják ki (ábra). A sugárzás hullámhossza a vörös- illetve a közeli infravörös tartományba esik.

A kis méret miatt a sugárzás párhuzamossága nem túl jó, és monokromatikussága is gyengébb, mint a többi lézéré.

Különlegessége főleg az, hogy kicsi (1 mm-nél kisebb), és hogy az átmeneten folyó árammal közvetlenül modulálható. Felhasználását is ez határozza meg: elsősorban az optikai távközlésben, elektronikus eszközökben (pl. CD-lejátszó) használják, ahol a kis méret előnyös, és a hátrányos tulajdonságok nem zavaróak.



1.3.3 A lézersugárzás tulajdonságai és a lézer alkalmazásai

Az indukált emisszióval történő fénykibocsátás és a rezonátortükrök alkalmazása révén a lézerfénynek különleges tulajdonságai vannak.

A lézersugárzás párhuzamos sugarakból áll, a sugárzás *divergenciája* (széttartása) igen kicsi. A legjobb lézerekben a divergencia szöge 0.01^0 -nál is kisebb, ami azt jelenti, hogy egy 2 mm átmérőjű fénynyaláb 1 km megtétele után is csak 3.5 cm átmérőjű, ami közönséges fényforrással megvalósíthatatlan.

A sugárzás nagy mértékben monokromatikus, amit a sugárzásban előforduló hullámhosszak tartományával, az ún. *sáv szélességgel* jellemeznek. Ez speciális lézerekben 10^{-9} nm, stabilizált gázlézerben 10^{-6} nm körüli érték (összehasonlításul: egy színszűrővel ellátott közönséges izzólámpa sáv szélessége kb. 100 nm).

A monokromatikussággal szorosan összefüggő sajátosság a kibocsátott hullám koherens volta, amit az ún. *koherenciahosszal* jellemeznek. Ez - durván szólva - az a távolság amelyen belül a kibocsátott fénycsugár fázisa π -nél kisebb értékkel változik meg (egy két részre osztott fénycsugár részei között akkor van megfigyelhető interferencia, ha a részcsugarak útkülönbsége kisebb, mint a koherenciahossz). A koherenciahossz speciális lézereknél elérheti a 10^7 m-t, stabilizált gázlézerben 10^4 m körüli érték (egy közönséges izzólámpánál ez az érték mindössze 10^{-4} m).

A lézer alkalmazásai a fenti különleges tulajdonságokkal függnek össze.

A párhuzamosság kézenfekvő alkalmazása az *irányításra* (célzásra) való felhasználás. Ugyanebből következik a nagy távolságok mérésére való felhasználás, hiszen a radarelvű mérésnél a kis divergencia miatt nagy távolságból is jelentős a visszavert sugárzás intenzitása. A lézer a Doppler-effektus alkalmazásával igen pontos *sebességmérésre* is lehetőséget ad.

Kis távolságok interferenciával történő igen pontos *mérését* teszi lehetővé a lézerfény monokromatikussága és koherenciája.

A lézersugárzás nagy koherenciahossza és az irányíthatósága új lehetőségeket nyit meg a *híradástechnikában*. Információt elektromágneses hullám modulációjával csak akkor lehet átvinni, ha a hullám fázisa jól meghatározott. A rádióhullámok ennek a követelménynek megfelelnek, de frekvenciájuk a fényéhez képest igen kicsi, a hullámmal átvitt információ mennyisége viszont a hullám frekvenciájával nő. A koherens fény frekvenciája 5 nagyságrenddel nagyobb, mint a mikrohullámoké, ami nagy mennyiségű információ átvitelét teszi lehetővé. A lézerfény kulcsfontosságú az igen hatékony *fénycsugárzás* kifejlesztésében, és itt - kis méretei miatt - fontos szerepet játszanak a félvezető lézerek is. A fénycsugárzás két másik fontos eleme a kis veszteségű fényvezető kábelek- és a félvezető detektorok létrehozása volt.

A monokromatikusság és a kis divergencia következtében a lézercsugár lencsével igen kis térfogatba *fókuszálható*. Ennek következtében a fókuszpontban igen *nagy energiasűrűség* hozható létre. Ezen alapulnak a lézer *technológiai alkalmazásai* (fűrés, vágás, hegesztés, marás), továbbá a *mikroszövetben* (pl. szemészeti műtétek) történő felhasználása is.

A lézerfény koherenciájának sajátos - és igen fontos - alkalmazása a *holográfia*, amely a fényképezést forradalmasította. Lézerfényt felhasználó speciális interferencia-technikával a tárgyról jövő fénynek nemcsak az intenzitását lehet rögzíteni (mint a közönséges fényképen), hanem a fázisviszonyait is, vagyis a tárgyról jövő minden fényinformációt "felírhatunk" egy fényképezőlemezre (a *hologramra*). A lemez megfelelő megvilágításával a rögzített-, vagyis a tárgyról jövő fényvel azonos fényt indíthatunk el, tehát a tárgyat eredeti, háromdimenziós formájában látjuk.

A lézer jelentős fejlődést hozott a tudományos kutatás és a technika számára is fontos *spektroszkópia* területén. Ez elsősorban azzal függ össze, hogy a lézerfény monokromatikussága a spektroszkópiai módszerek pontosságát, felbontóképességét jelentősen megnöveli.

A felsoroltakon kívül még számos alkalmazást említhetnénk, és számos alkalmazási lehetőség is kínálkozik. Utóbbiak közül csak az optikai információ-feldolgozáson és információtároláson alapuló számítógépek lehetőségét említjük, ami a számítástechnika forradalmi átalakulását hozhatja.

1.2 Kötött mikrorészecskék állapotának kvantitatív leírása.....	21
1.2.1 Kötött részecske stacionárius állapotai, a Schrödinger-egyenlet	21
1.2.2 A Schrödinger-egyenlet néhány egyszerű alkalmazása	22
1.2.2.1 <i>Részecske végtelen magas potenciálfalak között</i>	22
1.2.2.2 <i>A harmonikus oszcillátor</i>	24
1.2.2.3 <i>A hidrogénatom, kvantumszámok</i>	25
1.2.2.4 <i>A kvantumszámok fizikai jelentése</i>	27
1.2.3 Az alagúteffektus.....	29
1.2.4 Pauli-elv, az atomok elektronszerkezete	30
1.2.5 Elektronok szilárd testekben	32
1.2.5.1 <i>Elektronállapotok szilárd anyagban</i>	32
1.2.5.2 <i>Sávszerkezet és fajlagos ellenállás</i>	34
1.2.5.3 <i>Fajlagos ellenállás vezetőkben, a szupravezetés</i>	35
1.3 A lézer működése és alkalmazásai.....	37
1.3.1 Fény és anyag kölcsönhatásának alapfolyamatai, a lézer alapelve	37
1.3.2 Lézertípusok	39
1.3.2.1 <i>A rubinlézer</i>	39
1.3.2.2 <i>A hélium-neon (He-Ne) lézer</i>	40
1.3.2.3 <i>A félvezető lézer</i>	41
1.3.3 A lézersugárzás tulajdonságai és a lézer alkalmazásai	42