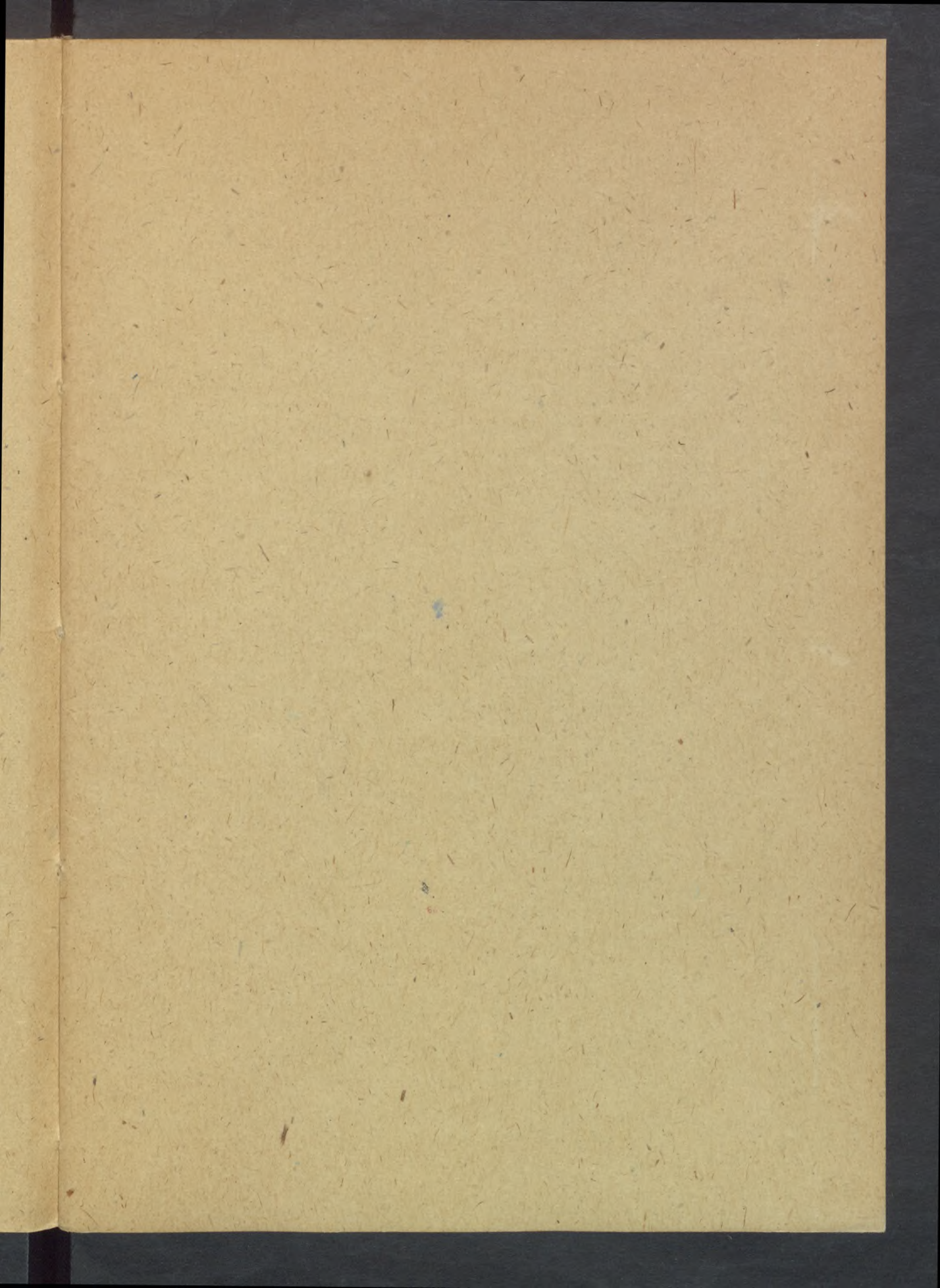
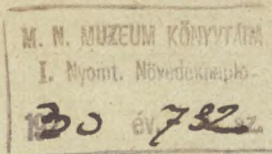


614.649









614649



A kvantumelmélet.

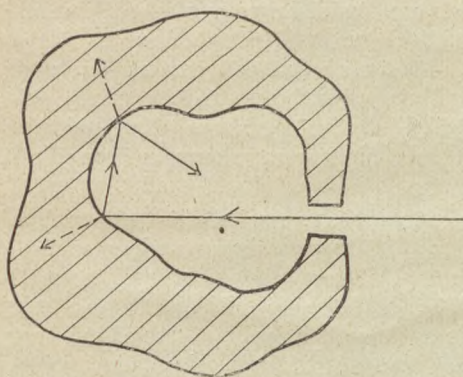
1. **Bevezetés.** A kémia fejlődésében korszakalkotó volt az atómhipotézis fölállítása (1803). E föltevés segítségével egyszerű és tiszta képet lehetett alkotni a vegyülésnek első pillanatra sajátos és érthetetlen mennyiségi törvényeiről. Az oszthatatlan atóмок gondolata azonban csak állomás volt a fejlődési fokozatok hosszú láncolatában. Már PROUT (1815) összetett testeknek gondolta az atóмокot, mondván, hogy a magasabb rendszámú elemek atómjai hidrogénatóombokból vannak felépítve. Azután jött a radióaktivitás felfedezése! Fel kellett áldozni az atóмок egyszerűségét: az atóмокot a közönséges értelemben vett súlyos anyagból és elektronokból felépített rendszernek kellett gondolni. Szóval a régi egyszerű atóm helyébe egy meglehetősen bonyolult kis világ lépett, melyre már nem is igen illett rá az „atóм” elnevezés.

A következő kérdés az volt, hogy milyen hát ennek a kis világnak a berendezése, milyen törvényeknek van alávetve az alkotórészek mozgása. RUTHERFORD (1902) vetette föl az atóми naprendszer gondolatát, mely szerint a pozitív töltésű atómmag körül az elektronok bolygók módjára keringenek, de a naprendszer részleteivel már nem foglalkozott. A kvantumelmélet az atóми naprendszer szerkezetéről, a reá vonatkozó törvényekről óhajt tájékoztatni bennünket. A kvantumelmélet tehát nem más, mint az atóмок fizikája. De még tovább is megy ennél! A fény, a sugárzás az atóмокoknak legközvetlenebb megnyilatkozása: a kvantumelmélet tájékoztatni óhajt a fény keletkezéséről és terjedéséről is. Az elnevezés eredetéről még megemlékezünk.

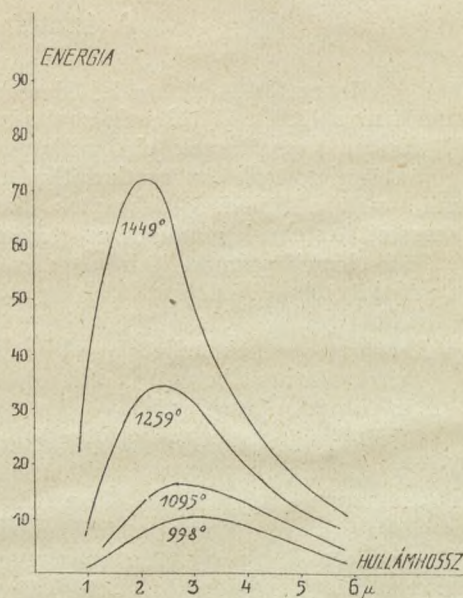
Legtermészetesebb volna annak a föltevése, hogy az atóмок körében is a fizika közönséges törvényei érvényesek. Így mindenekelőtt természetesnek látszik az, hogy a bolygóelektronok pályája semmiféle korlátozásnak nincsen alávetve; az elektron keringhet mindazokon a pályákon, melyek a vonzóerőnek megfelelnek, s így energiája is bármilyen lehet. Természetesnek látszik továbbá az a feltevés is, hogy ezek az elektronok — ha elemi fényforrásoknak tekintjük őket — folytonosan sugározzák ki az energiát s folytonosan is abszorbeálják. Ennek az egyetlen feltétele a klasszikus világnézet szerint csak az, hogy az elektron sebességének iránya vagy nagysága folytonosan változzék, ami úgy a rezgő, mint az ellipszispályán mozgó elektron esetében bekövetkezik. A folytonosság itt úgy értendő, hogy a fényt kisugárzó elektron egy pillanatra sem pihen, környezetébe állandóan sugározza a fényt, akárcsak a hangvilla a hangot. Ez a természetes, vagy — mint mondják — klasszikus fizikai felfogásmód,

Kiderült azonban, hogy ez a világnézet, mely egyedül látszik jogosnak, egyes esetekben helytelen, a tapasztalattal meg nem egyező eredményekre vezet. Le kellett tehát vonni a következtetést, hogy az atomok világa más világ, mint a látható, érzékelhető világ. Ugyanis úgy látszik, hogy itt hiányzik a természeti jelenségeknek egyik legjellemzőbb tulajdonsága: a folytonosság.

2. A fekete sugárzás. Mint a legtöbb nagy elméletet, úgy a kvantumelméletet is egy tapasztalati jelenség keltette életre: ez a fekete sugárzás, a hősugárzásnak egyik speciális faja. Vázoljuk röviden a fekete sugárzás kérdését. Abszolút fekete vagy röviden fekete az olyan test, mely minden ráeső sugárzást teljesen elnyel (csak hőmérsékletemléssel előállítható sugárzásra gondolunk). Jól megközelíti ezt a köröm, de még jobban egy átlátszatlan test belsőjében levő üreg határfala, melyen



1. rajz. Átlátszatlan test keresztmetszete, melynek belsejében üreg van. („Fekete test.”) A lyukon belépő sugárzás teljesen elnyelődik, viszont belőle „fekete sugárzás” indul ki.

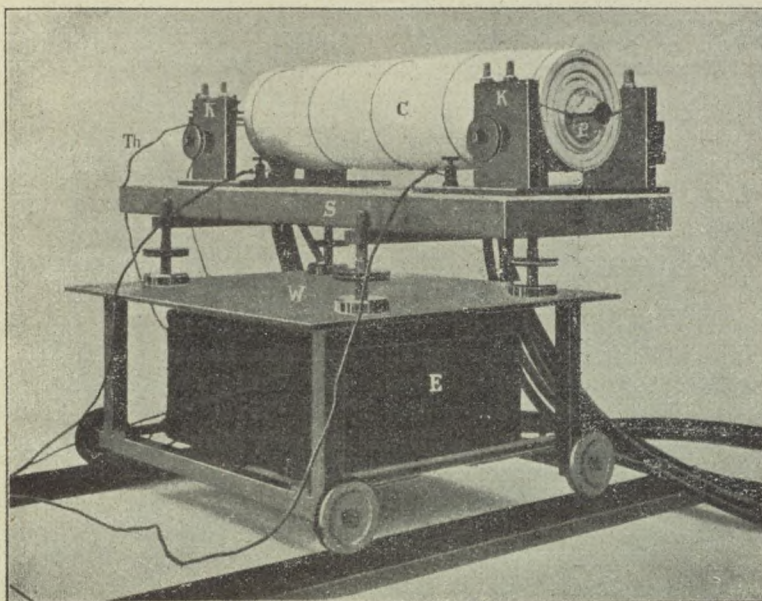


2. rajz. Az energia eloszlása a fekete sugárzás színeképében különböző abszolút hőmérsékletek mellett. A látható színeképrész 1 μ (mikron)-tól balra van.

kis nyílás, lyuk van (1. rajz). Ugyanis a nyíláson keresztül bejutó sugárnyaláb többszörös visszaverődés után végül teljesen elnyelődik; viszont, ha az üreg fala állandó hőmérsékleten van, a lyukon kilépő sugárzás majdnem teljesen olyan, mint a megegyező hőmérsékletű fekete test sugárzása. Kisebb barlangok, odúk elég jól megközelítik a fekete testet. A fekete sugárzást néha látni is lehet, pl. a kályhában izzó széndarabok közti üregekből látható fekete sugárzás lép ki. A látható fekete sugárzás színeképe telt színekben gazdag, folytonos színekép. Mérésekkel is meg lehet róla győződni, hogy akármilyen anyagból készül is a fekete test, akármilyen alakja van is az ürnek, azonos hőmérséklet mellett ugyanakkora nyíláson mindig ugyanolyan erősségű és összetételű sugárzás lép ki. Ha tehát 1 cm^2 -es nyílás és 1 mp sugárzási idő mellett egy koordinátarendszer vízszintes tengelyére felmérjük a hullámhosszúságot, a függőleges tengelyére pedig a megfelelő energiát s megrajzoljuk az energiagörbét; ennek alakja és nagysága ugyanolyan lesz, bármilyen alakú és anyagú is a fekete test (2. rajz). A 2a. rajz

ban látható annak a fekete testnek a képe, mellyel LUMMER és PRINGSHEIM német fizikusok az előbbi energiagörbéket meghatározták. A fekete sugárzás problémája a következő: keresendő egy olyan matematikai formula, mely rajzban ábrázolva ilyen görbéket ad, vagy pontosabban: amelyből adott hőmérséklet mellett kiszámítható egy tetszőszerinti hullámhosszúságra eső sugárzó energia.

PLANCK, a berlini egyetem tanára ezt a formulát a következő megfontolással igyekezett megtalálni. Az űrben ideális sugárzóforrásokat: egyenes vonal mentén rezgő elektronokat (lineáris oszcillátorokat) képzelt



2a. rajz. A fekete sugárzás mérésére való fekete test. A belső 40 cm hosszú és 4 cm átmérőjű tűzálló henger vékony platinalamezzel van bevonva, melyet elektromos árammal izzítanak. A belső henger hőszigetelés céljából újabb hengerrel és azbesztkabukolattal (C) van körülvéve s kb. 1500 C°-ra hevíthető.

el. (3. rajz.) Természetesen hallgatagon feltette, hogy ezek folytonosan sugároznak ki energiát, viszont folytonosan el is nyelik a reájuk eső sugárzást. Az egyensúlyi állapotnak a feltevése az, hogy a kiadás egyenlő legyen a bevétellel: a kisugárzott energiamennyiség egyenlő legyen az elnyelttel. Ezt az alap gondolatot PLANCK egyenletekbe, matematikai formába öntötte s nyert egy olyan formulát, mely szerint bármilyen alacsony hőmérsékleten is a rövid hullámokra igen nagy energia esik, vagyis minél mélyebbre hatolunk az ibolyántúli színeképrészben, annál nagyobb lesz a sugárzó energia; a teljes kisugárzott energiamennyiség meg végtelen nagy, bármilyen alacsony hőmérséklet mellett is. Ez az eredmény természetesen éles ellentétben áll a tapasztalattal, ami annál meglepőbb, mert a számítás helyes.

3. A kvantumelmélet keletkezése. PLANCK e körülményből leszűrte azt

a következtetést, hogy gyökeresen meg kell változtatni a fizikai világnézetet: feladta a folytonosságot a mikrokozmoszban (1900). Ugyanis feltette, hogy a rezgő elektron energiája nem lehet akármilyen, hanem csak egy meghatározott nagyságú energiamennyiségnek egészszámú többszöröse. Ezt a kicsiny energiamennyiséget nevezik energiakvantumnak (ZEMPLÉN Győző energiaadagnak hívta) s rendszerint ϵ betűvel jelölik. Innen származik az egész elmélet elnevezése. Tehát egy rezgő elektron energiája így fejezhető ki:

$$E = n\epsilon,$$

hol n zérust vagy egy pozitív egész számot jelent. Ebből már most következik, hogy a rezgő elektron nem sugározhat ki és nem nyelhet el az ϵ -nál kisebb, tetszésszerűtlen kicsiny energiamennyiséget, vagyis nem sugározhat és nem abszorbeálhat folytonosan, mert ekkor nem teljesülne az a feltétel, hogy energiája csak $n\epsilon$ lehet. Hanem az elektron csak ϵ nagyságú energiamennyiséget adhat ki vagy vehet föl (esetleg ennek többszörösét); még pedig mindkét folyamat pillanatnyilag, a véletlenre bízott időpontokban játszódik le. Egyébként az elektron meglévő energiájával csillapítás nélkül rezeg, tehát nem sugárzik, bár sebessége folyton változik, gyorsulása van, s így a klasszikus elektronelmélet szerint sugározni kellene. A rezgő elektron energiájának az idővel való változását tehát nem folytonos, hanem a mellékelt szakadásos görbe ábrázolja (4. rajz). A vízszintes tengelyre felmértük az időt, a függőlegesre pedig az energiát. Egy hasonlattal is rávilágíthatunk az itt kifejtett alapgondolatra. Tegyük fel, hogy valaki végrendeletileg arra van kötelezve, hogy készpénzállománya csak a pengő egészszámú többszöröse lehet. Ebből az következik, hogy az illető csak egy pengőt (esetleg többet) költhet el egyszerre vagy ennyit fogadhat el; filléreket ellenben nem.¹ A pengő megfelel az ϵ energiakvantumnak.

Az ϵ azonban nem állandó, nem közös a különböző rezgésszámú elektronokra, nem egy univerzális energiaatóm, hanem arányos a másodperc alatt végzett rezgések számával (ν -vel), tehát

$$\epsilon = h\nu,$$

ahol a h arányossági tényező egy igen kicsiny szám:

$$h = 6,54 \times 10^{-27} \text{ erg sec.}$$

Ennek neve: elemi hatásmennyiség, mivel energia és idő szorzata.

Hogy az ϵ kvantum arányos a rezgésszámmal, az már nem feltevés volt, hanem a fekete sugárzásra vonatkozó korábbi elméleti és tapasztalati eredmények következménye. (WIEN-féle eltolódási törvény). Ugyanis a kvantumok feltevése mellett levezethető formulák csak akkor voltak összhangban a korábbi tapasztalati eredményekkel, ha ϵ -t a rezgésszámmal arányosnak tekintették. Pár adatot fölemlítünk az ϵ energiaadag nagyságára

¹ Ugyanannyi fillérnek egyidejű bevétele és kiadása itt nem jöhet számba,

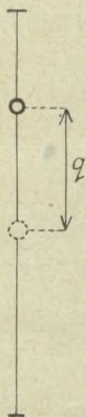
vonatkozólag is. Vörös színt kisugárzó rezgő elektron esetében kb. $\epsilon = 5 \times 10^{-12}$ erg, Röntgen-sugarakra vonatkozóan kb. $\epsilon = 2 \times 10^{-8}$ erg, hol 1 erg jelenti azt a munkát, melyet végzünk, ha kb. 1 mg-ot 1 cm-rel magasabbra emelünk fel.

Tekintetbe véve ezt, az energia $E = n \cdot h\nu$

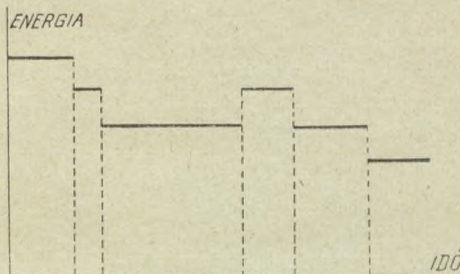
$$\text{és így } \frac{E}{\nu} = nh.$$

Vagyis egy egyenes vonal mentén rezgő elektron energiájának és rezgésszámának a hányadosa az elemi hatásmenyiségnek egészszámu többszöröse.

Ennek az eredménynek érdekes geometriai jelentése is van. (3. rajz.) Legyen az elektron kirezgése, az egyensúlyi helyzettől való távolodása q , a mozgásmenyisége (tömegének és sebességének szorzata)



3. rajz. Az egyenes vonal mentén rezgő elektron (lineáris oszcillátor). Középen van az egyensúlyi helyzete.



4. rajz. A rezgő elektron energiájának változása a kvantumelmélet szerint.

pedig $p = mv$; ez utóbbi úgy is nyerhető, hogy a mozgási energiának a sebesség szerinti differenciáhányadosát vesszük:

$$p = \frac{dE_m}{dv} = \frac{d}{dv} \left(\frac{1}{2} m v^2 \right) = \frac{1}{2} m 2v = mv^*.$$

Ekkor a mozgási energia így írható:

$$E_m = \frac{p^2}{2m}.$$

A helyzeti energia kiszámítása céljából vegyük figyelembe azt a munkát, melyet végeznünk kell, hogy a rugalmas erővel kötött elektront egyensúlyi helyzetéből q távolsáig kimozdítsuk. A kimozdításhoz szükséges erő folyvást nagyobbodik, miközben az egyensúlyi helyzettől távolodunk. Vehetjük azonban a kifejtett erő közepes értékét. Jól ismeretes, hogy a rezgő mozgás esetében a fellépő erő arányos az elmozdulással, tehát

* A d betűk itt a differenciálást jelentik. Hatványmennyiséget úgy differenciálunk, hogy a kitevőjével szorzunk, majd pedig új kitevőnek eggyel kisebb számot választunk. Az m állandó változatlanul marad.

az alkalmazott külső erőre ugyanez érvényes; vagyis a külső erő q -kimozduláskor a tömeg és a gyorsulás szorzataképen így fejezhető ki:

$$m4\pi^2\left(\frac{l}{T}\right)^2 q = 4\pi^2 v^2 m q,$$

ahol T a rezgési időt jelenti, a v pedig az egy másodpercben foglalt rezgési idők számát, röviden a rezgésszámot. Ez a képlet a rezgő mozgás elemi tárgyalásakor nyerhető. Viszont az egyensúlyi helyzetben ($q=0$) a külső erő, meg a rugalmas erő is zérus. Tehát a két külső erőérték összegének a fele, vagyis az erő középértéke az elmozdulás alatt:

$$2\pi^2 v^2 m q.$$

Az egész jelenség már most úgy tekinthető, mintha állandóan ekkora erőt kellene kifejteni a kimozdítás közben; tehát a munka, az erő és elmozdulás szorzata — mely most a helyzeti energiát adja — a következő:

$$E_h = 2\pi^2 v^2 m q^2.$$

Az egész energia a mozgási és helyzeti energia összege:

$$E = E_m + E_h = \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 v^2 m q^2.$$

Tegyük fel, hogy az elektron csillapítás, tehát kisugárzás nélkül rezeg, s osszuk az egyenlet mindkét oldalát az állandó energiaértékkel, E -vel. Ezenfelül még alaki változásokat tegyünk. Ekkor

$$\frac{q^2}{\frac{E}{2\pi^2 v^2 m}} + \frac{p^2}{2mE} = 1.$$

Az elektron rezgése közben a q - és p -értékek ennek az egyenletnek tesznek eleget. Ez azonban nagyon hasonlít az ellipszisnek jól ismert egyenletéhez:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1,$$

hol a és b a tengelyek felét jelentik. Ha a fentebbi nevezőket egyszerűen a^2 és b^2 -tel egyenlővé tesszük, a féltengelyek értékét kiszámíthatjuk. Ez az eredmény pedig geometriailag azt jelenti, hogy ha q - és p -t egy síkban koordinata-tengelyek gyanánt választjuk (közönségesen x - és y -tengelyekről beszélnek), akkor a rezgés minden pillanatában megfelel az elektronnak a síkban egy pont, mely egy rezgés ideje alatt egy ellipszis kerületén halad végig. Az ellipszis tengelyeinek méretei is ismertek, ha az energia és a rezgésszám adva vannak (5. rajz).

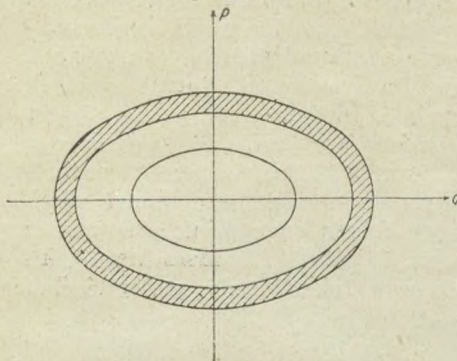
Az ellipszis területét úgy számítjuk ki, hogy a féltengelyek szorzatát még π -vel megszorozzuk.

$$ab\pi = \pi \sqrt{\frac{E}{2\pi^2 v^2 m}} \cdot \sqrt{2mE} = \frac{E}{v}.$$

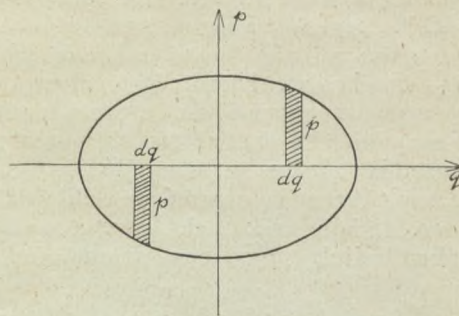
A jobb oldal azonban a kvantumfeltevés szerint egyenlő nh -val. Tehát az a körülmény, hogy a rezgő elektron energiája csak nh lehet, geometriailag azt jelenti, hogy az elektronnak a (q, p) síkban megfelelő pont csak olyan ellipsziseken mozoghat, melyeknek területe a h mennyiségnek egészszámu többszöröse. Akár emisszió, akár abszorpció történik, ez a pont egyik ellipszistről a másikra ugrik át. Két ellipszis között fekvő gyűrű területe mindig egyenlő h -val. E szalag mindig vékonyabb és

vékonyabb lesz, amint nagyobb ellipszisekhez érkezünk. A folytonossági elméletben mindenféle ellipszisen mozoghatott az elektronnak megfelelő pont.

A fentebbi ellipszisnek a területét úgy is nyerhetjük, hogy a 6. rajz szerint keskeny sávokra (közelítőleg trapézekre) osztjuk fel s ezeknek



5. rajz. Az ellipszisek, melyeken a rezgő elektronnak megfelelő pont mozoghat. Egy-egy ellipszis területe mindig a h egész számú többszöröse, egy ellipszisyűrűé pedig h .



6. rajz. Az ellipszist kicsiny szalagokra bontjuk, s ezeknek területét összegezzük. Az összeg (az ellipszis területe) egyenlő a kvantumintegrállal.

a területét összegezzük. Egy-egy ilyen kis szalag területe $p \cdot dq$, tehát az egész ellipszis területe

$$\sum p \cdot dq.$$

A Σ -jel helyett integrál-jelet is írhatunk, csak igen keskeny sávokra kell gondolnunk. Ekkor

$$\sum p dq \leadsto \int p \cdot dq = nh.$$

Az integráció kiterjesztendő mindazokra a q -értékekre, melyeken a rezgő pont egy periódus alatt áthalad. Ezt hívják kvantumintegrálnak.

A kvantumelmélet fejlődése olyan volt, hogy az energiakvantumok gondolatából kiindulva jutott PLANCK a kvantumintegrálhoz. A fejlődés későbbi fokán csak a kvantumintegrál maradt meg. E szerint az elektron csak olyan rezgéseket végezhet, melyek a kvantumintegrálnak megfelelnek, vagyis amelyekhez tartozó ellipszisek területe a h -nak egészszámú többszöröse. Mivel pedig az ellipszisére nézve

$$nh = \frac{E}{\nu},$$

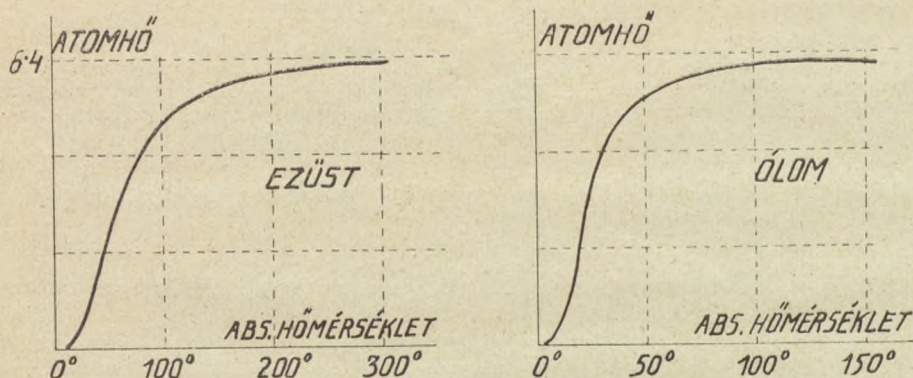
tehát

$$E = n \cdot h\nu = n\epsilon,$$

vagyis a rezgő elektron energiája csak az ϵ -kvantum egészszámú többszöröse lehet. Tehát a kvantumintegrál föltevéséből következnek az energiakvantumok.

Ha PLANCK ilyen szerkezetűnek gondolta a fekete sugárzással telt ürből felállított oszcillátorokat, akkor a tapasztalattal megegyező formulát tudott levezetni a fekete sugárzás színeképében fellépő energiaeloszlásra vonatkozólag. Ez a híres Planck-féle sugárzási formula, mely tulajdonképpen az egész kvantumelméletet életre keltette.

4. A fajhő elmélete. Eddigélé a kvantumelméletet csak egy mesterséges modellre, a rezgő elektronra alkalmaztuk s csak azt mondhatjuk, hogy a természet ilyenekre megengedi a diszkontinuitások feltevését. EINSTEIN alkalmazta az elméletet először a valóságos atomokra. Ő első közelítésben az egyatómos szilárd testek (réz, ezüst stb.) atomjait rezgő anyagi pontoknak gondolta, melyek rugalmas erőkkel vannak egyensúlyi helyzetükhöz kapcsolva. Egy ilyen atom esetleg ellipszispályán is rezeghet. Azonban mindig helyettesíthető három lineáris oszcillátorral, melyek egy derékszögű koordinátarendszer tengelyei mentén rezegnek s összes energiájuk egyenlő az eredeti rezgő atom energiájával. Szóval egy N -atomból álló szilárd test úgy szerepel, mint $3N$ lineáris oszcillátor halma. Ha ezekre az oszcillátorokra a folytonos energiacsere tételét alkalmazzuk, arra az eredményre jutunk, hogy összes energiájuk arányos az abszolút hőmérséklettel. Ismerve az energia függését a hőmérséklettől, kiszámíthatjuk, hogy egy grammatómnak egy fokkal való melegítéséhez



7. rajz. A fajhő változása az absz. hőmérséklettel. Az ezüst fajhője rohamosabban csökken az absz. zérus fok felé közeledve, mint az ólomé.

mennyi hő szükséges, ez lesz az atomhő. Így számolva, arra jutunk, hogy ez állandó érték, sem az anyagi minőségtől, sem a hőmérséklettől nem függ. Ez pedig merőben ellenkezik a tapasztalattal, a valóságban ugyanis a fajhő az anyagi minőség és a hőmérséklet függvénye.

EINSTEIN rámutatott arra, hogy a szilárd testek atomjai is alá vannak vetve a kvantumfeltevésnek, az energiát csak adagokban vehetik fel és adhatják ki. Ha a szilárd test összes belső energiáját e föltevés mellett számítjuk ki, ez a hőmérsékletnek eléggé bonyolult függvénye lesz. Kiszámítva most az egy fok hőmérsékletemeléshez szükséges energiamennyiséget (atomhő), azt találjuk, hogy ez nem állandó, hanem a hőmérséklet függvénye, mely függvény az abszolút zérus fok felé közeledve, nagyon kicsiny értékeket vesz fel, egyúttal azonban igen alacsony hőmérséklet mellett eltér a tapasztalattól.

EINSTEIN eredményét DEBYE tökéletesítette. Ugyanis EINSTEIN azt tette föl, hogy az összes atomok azonos rezgésszámmal rezegnek, ami nem valószínű; ezzel szemben DEBYE a legkülönbözőbb rezgésszámokat lehetőknek tartotta azzal a kikötéssel, hogy minden testre nézve van egy az anyagi minőségtől függő maximális rezgésszám, mely tehát a testekre jellemző állandó. A Debye-féle formula szerint is a szilárd testek fajhője rohamosan csök-

ken, amint az abszolút zéruspont felé közeledünk, s ennek közvetlen közelében majdnem zérus lesz. Ezt a formulát NERNST és tanítványainak a mérései teljesen megerősítették Ag, Al, Cu, Pb stb. esetében. Néhány görbét be is mutatunk: a vízszintes tengelyre felmértük az abszolút hőmérsékletet, a függőlegesre pedig a fajhőt (atómhőt). (7. rajz.) A kvantumfeltevés általánosabb alakjában, a hidrogén fajhőjére nézve is nevezetes eredményekhez vezetett.

5. A Bohr-féle atom. A fekete sugárzás színe a leggazdagabb folytonos színkép. Érdekes, hogy mégis ez a jelenség keltette életre a diszkontinuitás gondolatát s csak azután fordult a fizikusok figyelme a vonalas színképek felé, melyek tipikus példái a nem folytonos jelenségeknek. BOHR dán fizikusé az érdem, hogy felismerte a kvantumgondolat nagy jelentőségét a vonalas színképek elméletében (1913).

PLANCK a fekete sugárzás problémájának megoldásakor rezgő elektronokat használt sugárzóforrás gyanánt, melyekre az elmozdulással együtt növekvő, de vele ellenkező irányú erő hat, az ú. n. kvázilasztikus erő. Ez a modell csak egy segédeszköz volt s az általa elért eredményeket nem érinti az, hogy ez a természetben, a valóságban előfordul-e vagy sem; a fontos csak az, hogy a diszkontinuitás gondolata összefér-e a mikrokozmosz berendezésével vagy nem. Ha a valóságban keressük a kvázilasztikusan kötött elektront, mely a klasszikus fizika sok optikai problémájának megoldásában szerepel, nagy nehézségekkel találkozunk. Ugyanis jól ismeretes, hogy pontszerű elektromos töltések között a távolság négyzetével fordítottan arányos erő hat, mely tehát az elmozdulással rohamosan csökken, nemhogy nőne. Szóval nehéz számot adni a kötőerő eredetéről. E nehézségen lehet ugyan segíteni úgy, hogy a pozitív töltést, melyhez a rezgő elektron kötve van, nem pontszerűnek gondoljuk, hanem olyan gömbnek, melynek sugara kb. az elektron maximális elmozdulásának felel meg, de ekkor meg más nehézségek támadnak. Ugyanis nem tudunk számot adni a pozitív töltésű α -sugaraknak nagy irányváltozásáról, ha ezek vékony fémlemezeket haladnak át, mert a nagyobb térfogatban elosztott pozitív töltés ekkor nem tudja a megfelelő nagy taszítóerőt kifejteni. Éppen ez a jelenség készítette RUTHERFORD-ot arra, hogy a pozitív töltésű atómmagot pontszerűnek gondolja. Ekkor ugyanis az α -részeeske a pontszerű pozitív töltéshez igen közel juthat, nagy taszító erő, nagy irányváltozás léphet fel. RUTHERFORD feltételezte továbbá, hogy az elektronok a mag körül bolygók módjára keringenek és számuk egyenlő az elem rendszámával a periódusos rendszerben. Legegyszerűbb a hidrogén-atóm, mely áll egy pozitív elektron töltésű atómmagból, mely körül egyetlen elektron kering kör- vagy ellipszispályákon. Foglalkozunk először ezzel.

A klasszikus elektronelmélet szerint a keringő elektronnak állandóan kellene sugároznia, hiszen állandóan változik a sebessége, van gyorsulása; másrésről az elektron bármilyen nagyságú pályán keringhet, erre nézve senkiféle különös előírás nincsen. Ebből azt a következtetést lehetne levonni, hogy a Rutherford-féle atommodell használhatatlan, hiszen a kisugárzott fény rezgésszámát mindenestre a mp-kénti keringési szám szabja meg; ez azonban függeni fog az elektron energiájától, amely meg a kisugárzással együtt folyton változik. Így tehát egy keringő elektron nem lenne képes meghatározott rezgésszámú színképvonal kisugárzására. Itt szólott hozzá alapvetően a kérdéshez BOHR. Ő feltette, hogy éppen úgy,

mint a lineáris oszcillátor esetében az amplitudók, itt is a lehetséges pályák alak és nagyság szerint elő vannak írva: ezek a kvantum pályák, melyeken az elektron kisugárzás nélkül kering, bár sebessége változik, tehát van gyorsulása s így a klasszikus felfogás értelmében sugározni kellene. Mikor történik a kisugárzás? Akkor, ha az elektron egy nagyobb energiájú pályáról kisebb energiájúra ugrik át; ez a jelenség s vele együtt a kisugárzás pillanatnyilag történik, az elektron explozió módjára kilöki a térbe a sugárzó energiát. Azonban a kisugárzott energia rezgésszáma nem lesz egyenlő az elektronnak másodpercenkénti keringési számával, akár a kezdeti, akár a végpályát vizsgáljuk is. A kisugárzott fény színére vonatkozólag új feltevés szükséges. Bohr általánosította a lineáris oszcillátorra vonatkozó speciális eredményt. Itt ugyanis a kisugárzott energia mindig $\epsilon = h\nu$, hol ν az elektron rezgésszámát jelenti, amely meg van adva. Bohr szerint az elektron ugrása közben felszabaduló energia (ΔE) is mindig olyan rezgésszámú sugárzás lesz, hogy

$$\Delta E = h\nu$$

és így

$$\nu = \frac{\Delta E}{h}.$$

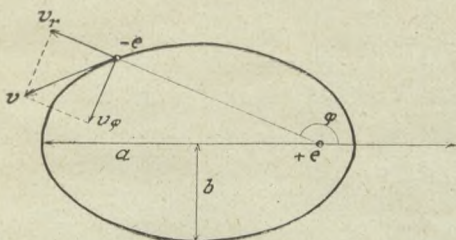
Ez a Bohr-féle szaporasági feltétel, mely szerint a sugárzás rezgésszámát úgy kapjuk meg, hogy az atom összes energiájában beálló fogyást elosztjuk a h -val. Minél nagyobb a felszabaduló energia, annál nagyobb lesz a ν , viszont annál rövidebb lesz a hullámhosszúság és fordítva. Így tehát az ibolyafény kisugárzásához nagyobb ΔE -re van szükség, mint vörös fény kisugárzásához. Az abszorpció viszont úgy történik, hogy az elektron energiája a ráeső fény színének megfelelően éppen $h\nu$ -vel növekszik s a megfelelő külső pályára ugrik át. Természetesen nagy kérdés az, hogy a $h\nu$ -energia miképpen áll pillanatnyilag rendelkezésre a tér egy kicsiny részében. Hiszen ez pl. Röntgen-fény esetében, mikor a ν igen nagy, elég tekintélyes lehet.

E feltevések után csak a lehetséges pályák méreteit kell megszabni. Erre szolgálnak a kvantumintegrálok. Itt most a keringő elektron helyzetét a pálya síkjában két független koordinata határozza meg (8. rajz.): a magtól való távolság, radius (r) és a sugár elfordulási szöge (φ) valamely kezdeti állástól számítva. (A rezgő elektron helyzetét csak egyetlen adat határozza meg: az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás; itt egy szabadsági fok van, az utóbbi esetben kettő. Ezért lesz két kvantumintegrál is.) Határozzuk meg most a kvantumintegrálokhoz szükséges adatokat. A sebességet felbontjuk két összetevőre. Egyik a sebességnek a sugármenti összetevője (v_r), a másik a sugárra merőleges forgató összetevő (v_φ), melyet számszerűen úgy nyerünk, hogy a középponttól 1 cm távolságban lévő pont sebességét (a szögsebességet, ω) megszorozzuk a sugárral ($r \cdot \omega$). Körpálya esetén csak ez az utóbbi fordul elő, ez a teljes sebesség. Az egész sebesség négyzete a Pythagoras-féle tétel értelmében egyenlő a két összetevő négyzetének az összegével s így a mozgási energia

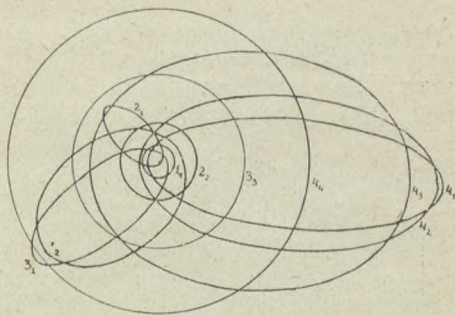
$$E_m = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{m}{2} (v_r^2 + v_\varphi^2).$$

hol $v_\varphi = r \cdot \omega$.

Az r és φ helyzeti koordinátákhoz, melyek megfelelnek a korábbi q -nak (oszillátor), most két impulzuskoordináta, két p -koordináta tartozik. Ezeket úgy nyerjük, hogy a mozgási energiát először az r -nek megfelelő v_r sebesség, majd a φ -nek megfelelő ω szögsebesség szerint parciálisan differenciáljuk. A v_r szerint parciálisan úgy differenciálunk, mintha a mozgási energia kifejezésében az r_ω állandó volna, tehát nem változnék, miközben az elektron tovább halad; hasonlóképen járunk el, ha a szög-



8. rajz. Az ellipszispályán keringő elektron.
A mag töltése $+e$.



10. rajz. A hidrogénatom elektronjának lehetséges pályái. A nagyobb számok a főkvantumszámok, az indexek az azimutális kvantumszámok.

sebesség szerint parciálisan differenciálunk. Az pedig jól ismeretes, hogy egy állandó mennyiségnek a differenciálhányadosa valamely változó

szerint zérus, tehát a mozgási energia parciális differenciálása úgy történik, mintha az vagy csak v_r -től, vagy csak ω -tól függene. Így tehát

$$p_r = \frac{\delta E_m}{\delta v_r} = \frac{m}{2} 2v_r = mv_r$$

$$p_\varphi = \frac{\delta E_m}{\delta \omega} = \frac{m}{2} r^2 2\omega = (mr\omega)r = (mv_\varphi)r.$$

Tehát p_r jelenti a mozgásmennyiségnek a sugármenti összetevőjét, a p_φ pedig a mozgásmennyiség forgató összetevőjének (mv_φ) és a sugárnak a szorzatát; ez utóbbit a sugárra merőleges mozgásmennyiségi összetevő nyomatékának nevezik a magra vonatkozólag. Ennek az értéke állandó a mozgás tartama alatt, mert nagy távolságban lassan megy a bolygó, tehát az mv_φ kicsiny, míg r nagy, kis távolságban meg fordítva áll a dolog. (KEPLER törvénye a bolygók vezérsugara által leírt területre vonatkozólag.)

A keringő elektronhoz hozzá lehet rendelni két síkot: egyikben a koordinata-tengelyekre felmérjük r -et és p_r -et, a másikban φ -t és p_φ -t (9. rajz). Az elektronnak mozgása közben mindegyik síkon megfelel egy pont, mely egy görbét ír le, míg az elektron ellipszispályáját körüljárja. Egyik görbét úgy nyerjük, hogy minden pillanatban felmérjük az r és p_r koordinátákat s a kapott pontokat összekötjük: a görbe elipszishez hasonló lesz; a φ és p_φ -hez tartozó síkban egy egyenes vonalat kapunk, mert a p_φ állandó; ez a vonal téglalappá egészíthető ki.

A rezgő elektron esetében egyetlen kvantumintegrál volt, most kettő

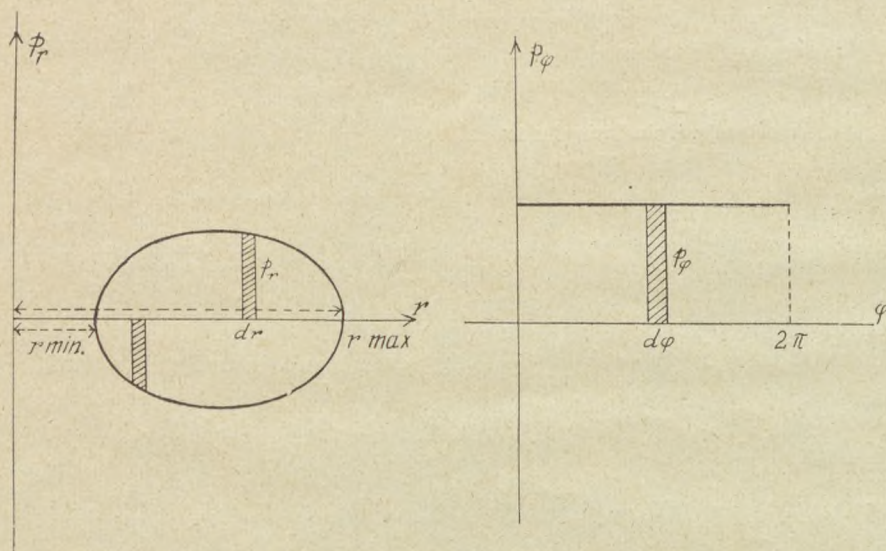
van. Ezek a kvantumintegrálok azt kívánják, hogy a két síkban bezárt területek mindegyike nh legyen, hol n -re még megjegyzést teszünk. Ezt úgy is érthetjük, hogy a megjelölt keskeny sávok összege legyen az említett értékű. Egy-egy ilyen sáv területe az egyik síkban $p_r dr$, a másikban $p_\varphi d\varphi$. Tehát fennállnak

$$\Sigma p_r dr \sim \int p_r dr = n_r h$$

és

$$\Sigma p_\varphi d\varphi \sim \int p_\varphi d\varphi = n_\varphi h.$$

Az n_r a radiális kvantumszám, értéke lehet 0, 1, 2, 3...; az n_φ az azimutális kvantumszám, értéke lehet 1, 2, 3..., tehát zérus nem, mert akkor a pálya egyenes vonal lenne s az elektron neki ütődne a mag-nak. Ezek a kvantumintegrálok formális általánosításai a rezgő-elektronra



9. rajz. A két kvantumintegrál geometriai jelentése az ellipszispályán keringő elektron esetében.

nyert egyetlen integrálnak. Amint látható, nem azt írjuk elő, hogy az ellipszispályán keringő elektron energiája az ϵ -kvantumnak egészszámú többszöröse legyen, mert ez az általánosítás nem bizonyulna termékenynek, különösen nem még több szabadsági fok mellett. Megjegyezzük, hogy ha az elektron körpályán kering, az r -hez tartozó kvantumintegrál mindig zérus, mert az r állandó, tehát nincs is dr -változás, továbbá a mozgásmiennyiségnek sincsen sugármenti összetevője (p_r).

Az elektron csak olyan ellipszispályákon keringhet a mag körül, amely ellipsziseknek a két fázissíkban megfelelő területek az elemi hatáskvantum egészszámú többszörösei. Felhasználva az ellipszis egyenletét, kiszámíthatjuk a szereplő integrálokat. Ekkor egyrészt nyerjük a pályák méreteit, másrészt a pályákon keringő elektronok energiáját. A pályák lehetnek körök vagy ellipszisek. Az első kör sugara 0.532×10^{-8} cm, tehát nagyobb egy fél Ångströmnél, a sebesség pedig e pályán majdnem századrésze a fény terjedési sebességének.

Az ellipszisek nagy tengelye, mely tulajdonképen irányadó az ellipszis nagyságára nézve, csak a két kvantumszám összegétől függ, a kis tengely kifejezésében azonban külön is előfordul az azimutális kvantumszám, tehát az ellipszis lapultsága függ ettől. A 10. rajzban láthatók a lehetséges ellipszisek.

Az elektron energiája¹ egy lehetséges pályán ugyancsak a két kvantumszám összegétől függ:

$$E = -\frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2} \cdot \frac{1}{(n_r + n_\phi)^2} = -\frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2},$$

hol m az elektron tömege, e pedig a töltése és

$$n_r + n_\phi = n.$$

Ez az n a főkvantumszám. Tehát az elektron energiája ugyanolyan főkvantumszámhoz tartozó pályákon ugyanakkora, bár e pályák alakja különböző.

Ha az elektron egy nagyobb m rendszámú pályáról ugrik a kisebb n rendszámú pályára, akkor felszabadul $\Delta E = E_m - E_n$ energiamennyiség. Ha a Bohr-féle szaporasági feltétel szerint ezt elosztjuk h -val, megkapjuk a kisugárzott fény rezgésszámát:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

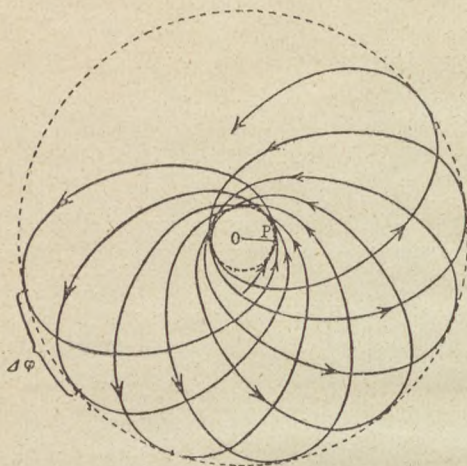
Ha itt $n=2$, vagyis végpályának a másodrendű ellipsziseket választjuk, akkor az elektronnak a 3-ik pályáról erre történő ugrása alkalmával keletkezik a hidrogén színképében egy vörös vonal, a negyedikről történő ugráskor egy zöldeskék vonal, stb. Ez a híres Balmer-féle színképvonal-sorozat (series). A mérések és számítások eredménye bámulatosan egyezik. Az R a Rydberg-féle állandó, mely ki van fejezve az elektron tömegével, töltésével, a h állandóval, stb., tehát más állandókra van visszavezetve, míg korábban független állandónak tekintették ezt. Megjegyzendő, hogy a Balmer-series vonalainak rezgésszámát kifejező formula — mint tapasztalati eredmény — ismeretes volt Bohr előtt is, de rejtély volt annak a levezetése.

6. A színképvonalak szerkezete. Az eddigi eredmények ama feltevés mellett érvényesek, hogy az elektron tömege változatlan, állandó, ami régebben a tömeg fogalmával szorosan össze volt kapcsolva. Ha azonban felteszünk azt, hogy az elektron tömege a sebességtől függ olyan módon, hogy a keringés sebességének növekedésével a tömeg is növekszik, mint azt a relativitás elve kívánja, akkor az energia kifejezésében nemcsak a két kvantumszám összege fordul elő, hanem ezek külön-külön is, tehát az energia ugyanazon főkvantumszámhoz tartozó különböző alakú ellipsziseken nem lesz ugyanakkora. Ennek az lesz a következménye, hogy a hidrogén esetében a 3 rendszámú pályákról a 2-re való ugrások alkalmával nem mindig ugyanazt a vörös vonalat kapjuk, hanem egymáshoz igen közel eső vörös vonalakat. A hidrogén esetében három ilyen vonal várható, melyek közül kettő olyan

¹ Az energia azért negatív, mert a domináló helyzeti energia negatív. Ez alatt ugyanis azt a munkát értjük, amelyet az elektromos erők végeznének, miközben az elektront a magtól végtelen nagy távolságra vinnénk. Ez a munka pedig negatív, mert vonzásról van szó.

közel van egymáshoz, hogy egészen összeolvad; így azután kettős vonal, dublett keletkezik, amelyet nagy felbontású spektroszkópokkal meg is találtak.

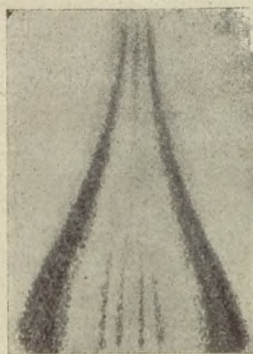
Az elektron tömegének a sebességgel való változásából még az is következik, hogy az ellipszispálya maga is a mag körül forog, vagyis a pálya perihéliuma, a maghoz legközelebb eső pontja nem egy helyen van, hanem a mag körül mozgást végez, ez a perihéliummozgás (11. rajz).



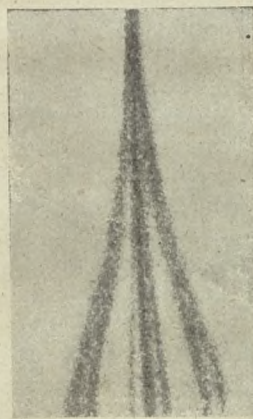
11. rajz. Az ellipszispályán keringő elektron perihéliumának mozgása.



13. rajz. A Zeeman-féle jelenség: a hidrogén vörös vonalának széthasadása mágneses térben.



a)



b)

12. rajz. A Stark féle jelenség: a hidrogén ibolyakék vonalának széthasadása elektromos erőterben. A térerősség lefelé növekszik. a) = az erővonalakkal párhuzamosan, b) = az erővonalakra merőlegesen rezgő komponensek.

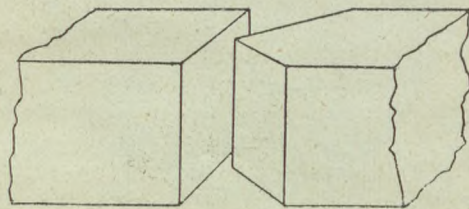
7. Stark-effektus. Ha a hidrogént erős elektromos tér hatásának tesszük ki, s úgy gerjesztjük, azt tapasztaljuk, hogy a színeképvonalak sok, egymáshoz nagyon közel eső vonalra hasadnak szét (12. rajz). Ez a széthasadás persze csak nagy felbontású optikai rácsokkal, vagy más e célra szolgáló

berendezésekkel észlelhető. Ezeknek a vonalaknak a hullámhosszúsága is kiszámítható a Bohr-féle elmélet alapján. Ugyanis az elektromos térben megváltozik a pálya alakja és a keringő elektron energiája, tehát a vonalak rezgésszáma is. Az elmélet és a tapasztalat jól egyezik egymással.

Ez az eredmény a kvantumelmélet egyik diadala volt, mert a klasszikus felfogásmód alapján nem sikerült magyarázatát adni a Stark-féle jelenségnek. Ha ugyanis rezgő elektront helyezünk állandó elektromos térbe, ennek a rezgésszáma nem változik meg és így új vonalak az elektromos tér mellett sem lépnek fel. Csak bizonyos mellékfeltevések útján lehetett némileg tájékozódni a jelenségről.

8. Zeeman-effektus. A Bohr-féle modell alapján számot lehet adni a Zeeman-féle jelenségről is. Ha a hidrogént erős mágneses térben gerjesztjük és a színekp vonalakat nagy felbontású ráccsal vizsgáljuk, akkor sem az egyszeres vörös, zöld, stb. Balmer-vonalakat látjuk, hanem a vonalak széthasadnak több, egymáshoz igen közel eső vonalra (13. rajz). A mágneses térben ugyanis megváltozik a Bohr-féle pályák alakja, megváltozik a keringő elektron energiája az egyes pályákon, s így az ugrások közben is más lesz a kisugárzott színekp vonalak rezgésszáma. Megjegyezzük, hogy erősebb elektromos vagy mágneses térben a hidrogénvonalak úgy hasadnak szét, mintha eredetileg egyszeres vonalak lennének (PASCHEN-BACK-effektus). A 6. pontban említett szerkezet nem jön számításba.

9. Az atómsugarak. A mágneses térbe helyezett hidrogén-atóm még egy érdekes sajátságot mutat. A keringő elektron ugyanis igen gyenge áramnak tekinthető. Az pedig jól ismeretes, hogy ilyen áramkör mágnessel helyettesíthető. Tehát a hidrogén-atóm úgy szerepel, mint egy nagyon gyenge mágnes, melynek tengelye az elektron pályasíkjára merőlegesen áll. Első pillanatra a klasszikus felfogásmód alapján azt gondolnánk, hogy ennek a mágnesnek, vagyis az ellipszispályára merőleges egyenesnek (normális) az iránya a mágneses tér irányával tetszésszerű szöget zárhat be. A kvantumelmélet azonban azt kívánja, hogy ezek a szögek is csak meghatározott nagyságúak legyenek éppen úgy, mint a pályák méretei. Szóval az atómot helyettesítő mágnes tengelyének iránya is kvantumfeltételeknek van alávetve, ez az iránykvantumolás. A lehetséges irányokat itt az úgynevezett mágneses kvantumszám (m) szabja meg. A legegyszerűbb eset az, mikor ez a szám olyan, hogy az atomi mágnes tengelye párhuzamos az erővonalakkal, de lehetséges, hogy irányuk megegyezik, vagy ellenkező. Természetesen az iránykvantumolás nemcsak hidrogén-atómra, hanem más atomokra is érvényes.

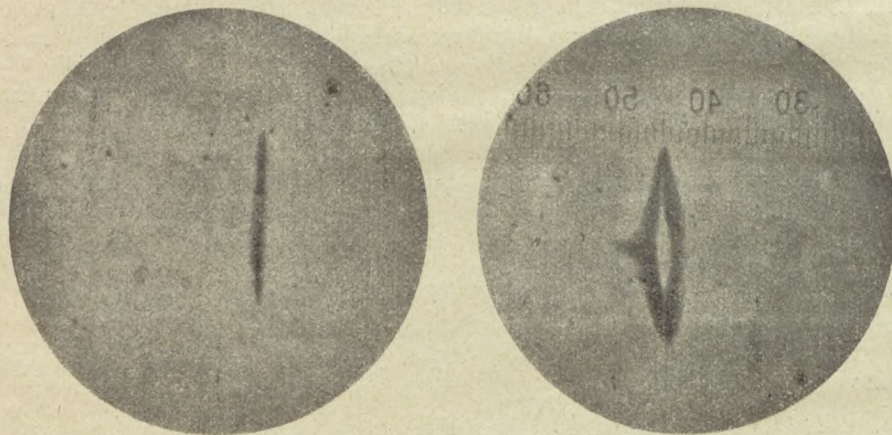


14. rajz. Mágnesek nem egyenmő mágneses tér előállítására.

Hogy ez a jelenség a természetben valóban előfordul, azt STERN és GERLACH mutatták ki egy igen szellemes kísérlettel. E célra ezüstöt választottak. Még pedig az ezüstöt gőzzé változtatták, s keskeny résen át, légüres térben ezüst-gőzsugarat engedtek igen erős, de nem homogén mágneses téren keresztül. Ezt úgy nyerték, hogy vasrúddal szembe vas-

éket állítottak. (14. rajz.) A gőzsugár az ékkel párhuzamosan haladt. A mágneses térből kilépő sugárnyalábót üveglemezen fogták föl, s ott állandósították alkalmas eljárással. Mágneses tér nélkül egyetlen vonalat kaptak, a tér bekapcsolása után pedig a vonal közepén kettéhasadt és kidudorodott. (15. rajz.) Ez a jelenség úgy magyarázható, hogy az atomi mágnesek tengelye csak az erővonalakkal párhuzamos lehetett, de azokkal vagy megegyező, vagy ellenkező irányú, s így egyes atomok jobbra, mások pedig balra repültek. Ha az atomi mágnesek tengelye mindenféle irányt elfoglalhatna az erőter irányához képest, akkor ilyen szabályszerű széthasadás nem fordulhatna elő.

10. A periódusos rendszer és a Pauli-féle elv. Az eddig mondottak majdnem kizárólag csak a hidrogén-atómra vonatkoznak. Belőle kiindulva azonban felépíthetjük az egész periódusos rendszert. A magtöltést egy-egy pozitív elektronnal növeljük, s a keringő-elektronok számát is mindig egy újjal szaporítjuk. Így azután az elektronok száma megegyezik az elem rendszámával a periódusos rendszerben. (Természetesen a mag súlyát, az atomsúlyt is növelni kell.) Ezek a külső elektronok első közelítésben a hidrogén-atóm elektronjának lehetséges pályáin helyezkednek el, mely pályák a térben elhelyezve gondolhatók. Az elektronok elosztása a pályákon régebben bizonyos kémiai és fizikai szempontok figyelembe vétele mellett történt. Újabban a Pauli-féle elv alapján, melyről mindjárt szó lesz. Az elektronpályák a mag körül egymástól jól megkülönböztethető burkokat képeznek, egy-egy burok elektronjai ugyanazon főkvantumszámhoz tartoznak, tehát különböző



15. rajz. Az ezüstgőzsugár keresztmetszete mágneses tér nélkül (bal) és mágneses térben (jobb).

méretű, de valószínűleg a térben elhelyezett pályákon keringenek. Általánosságban véve, az alkáli fémekkel mindig egy-egy új burok kezdődik, amely a nemes gázzal részben lezáródik. Legfelül van a *K*-burok, azután következnek az *L*-, *M*-, *N*-, *O*-burok vagy héjak.

A Pauli-féle elv érdekes betekintést enged a periódusos rendszer fölépítésébe. Egy elektron pályáját eddig 3 kvantumszámmal jellemeztük: főkvantumszám (n), azimutális (n_ϕ) és mágneses kvantumszám (m). Az újabb föltevések szerint még egy negyedik kvantumszám is föllép. Ugyanis fölteszik, hogy az elektronnak saját forgása is van (spin), melyből

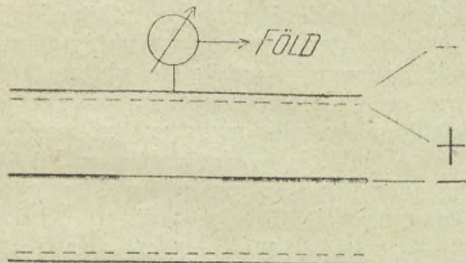
azután új mozgásmennyiségi nyomaték származik; az elektron forgó mozgásmennyiségi nyomatéka éppen úgy kvantumolva van, mint a pályán való keringési mozgásmennyiség nyomatéka; a hozzátartozó kvantumszám (s) lehet $+\frac{1}{2}$ vagy $-\frac{1}{2}$; ez az ú. n. spin-quantumszám, vagy forgási kvantumszám. Tehát egy elektron állapotát az atómkötésekben mindig 4 kvantumszám határozza meg.

A Pauli-féle elv tulajdonképpen azt fejezi ki, hogy valamint egy családnak nincs két teljesen egyforma tagja, úgy egy atom kötélekében sincsen két olyan elektron, melyeknek állapota teljesen megegyezik, melyek ugyanazon: 4 kvantumszámhoz tartoznak. Szemléletesebben nincs két olyan elektron, melyekre a pálya nagysága, alakja (excentricitása), térbeli elhelyezkedése, továbbá az elektron forgási tengelyének iránya azonos volna.

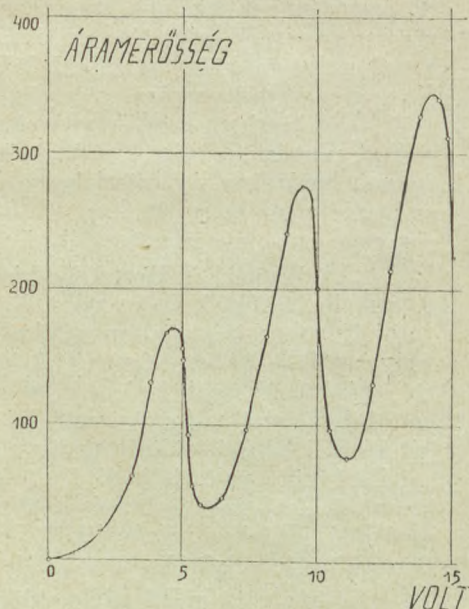
Ha megadjuk a főkvantumszámot, ez az elv rögtön megadja az egyes elektronburkokban egyáltalában lehetséges elektronok számát és eloszlását. Még pedig a nemes gázokra a következő eredményt kapjuk:

He	2						
Ne	2	2 6					
A	2	2 6	2 6				
Kr	2	2 6	2 6 10	2 6			
Xe	2	2 6	2 6 10	2 6 10	2 6		

Nem akarunk behatóan foglalkozni a periódusos rendszerrel, csak röviden a vegyérték fogalmáról emlékeztünk meg. Bizonyos elektronoknak a kémiai egyesülés alkalmával fontos szerepe van (erről később lesz szó). Ezek a valencia-elektronok. A Bohr-féle atómelmélet felfedezése szerint azok az elektronok szerepelnek valencia-elektronok gyanánt, amelyek az elemhez legközelebb álló nemesgáz elektronburkolatán kívül esnek. Ezek az elektronok könnyen megválnak az atómtól, vagy könnyen társulnak annyi új elek-



16. rajz. A Franck és Hertz-féle kísérleti berendezés vázlata.



17. rajz. Az áramerősség ugrásszerű változása a Franck- és Hertz-féle kísérletek közben.

trónnal amennyi a legközelebbi nemesgáz-burkolathoz szükséges. Így azután egy elem akkor n -szeresen pozitív értékű, ha n valencia-elektronja van, melyeket leadhat; viszont egy elem akkor n -szeresen negatív, ha n valencia-elektront vehet föl. Érthető, hogy a pozitív-értékűség a periódusos rendszerben balról-jobbra haladva növekszik, míg a negatív-értékűség jobb-

ról-balra haladva nő, még pedig minden következő elemnél 1-gyel. Világos magyarázatot talál bizonyos elemekig az Abegg-féle szabály is, mely szerint egy elem maximális pozitív és negatív értékeinek összege nyolc. Így pl. a klór maximálisan egy negatív értékű (HCl) és maximálisan 7 pozitív értékű (Cl_2O_7). Ez úgy magyarázható, hogy a klór a periódusos rendszerben az argon előtt áll, tehát vagy egyetlen elektront vesz föl, vagy hetet adhat le, hogy egy nemes gázburkolatot elérjen (az utóbbi a neon).

Az is érthető, hogy a nemesgázoktól egyenlő távol eső elemek miért mutatnak hasonló kémiai viselkedést. Azért, mert ugyanannyi valenciaelektronjuk van. Ezek az állítások inkább csak a könnyebb elemekre érvényesek (Ca -ig), a nehezebb elemeknél a viszonyok bonyolultabbak.

11. Röntgen-színképek. Ismerve az atomok szerkezetére vonatkozó föltevéseket, számot adhatunk a Röntgen-színképek keletkezéséről is. Ismeretes, hogy a Röntgen-lámpában a katódról nagy sebességű elektronok repülnek ki, melyek valamilyen nehéz fémbe (wolfram, platina), az antikatódba ütköznek. Ha egy ilyen elektron valamelyik atom K -burkolatáról kilök egy elektront, ennek a helyére ugorhat egy másik, az L , M , N , stb. burkok egyikéről; ezáltal keletkeznek a K_α , K_β ... Röntgen-színképvonalak, melyek annál keményebbek, minél nagyobbat ugrik az elektron.

Megmagyarázhatók az abszorpciós Röntgen-színképek is. A beeső Röntgen-fénynek legalább olyan keménységűnek kell lennie, hogy a $h\nu$ energiamennyiség elégséges legyen arra, hogy egy elektront a K , L , stb. burkolatról az atom külső részébe kilökjön; ezáltal azután elnyelődik a beeső fény. Keményebb sugárzás természetesen eo ipso képes erre. Ennek azután az lesz a következménye, hogy a fémlemezek szélesebb abszorpciós tartományokat mutatnak, melyek a lágy, kisebb rezgésszámú sugárzás felé élesen vannak határolva. Arra is lehetne gondolni, hogy elég az elektront a külső szomszédos pályára átlökni, amihez megfelelő Röntgen-fény kell, s így abszorpciós vonal jelentkeznék. Ez azonban csak szórványosan lép fel.

12. A Franck és Hertz-féle kísérletek. A Bohr-féle atom-modell helyesége mellett szólnak éppen az eddig ismertett eredmények. Mégis szükség volt közvetlen kísérleti bizonyítékokra. Ezek FRANCK és HERTZ híres kísérletei, melyeket 1913–14-ben végeztek. A kísérleti berendezés alapelve a következő. (16. rajz.) Üvegcső belsejében, mely ritkított nemesgázzal, vagy fémgőzzel volt töltve, platina-fonál izzott. Ettől néhány cm távolságban platinadrótból készült háló, körülötte pedig platina-eső volt elhelyezve. Az izzószál és a háló között változtatható feszültségkülönbség volt, mely az izzó szálból kirepülő elektronok sebességét növelte. A háló és a platinahenger között uralkodó esékély potenciálkülönbség meg az ide belépő elektronokat fékezte le. A külső platinaeső galvanométeren át földelve volt.

Ha már most a Bohr-féle atom-modell helyes, akkor a drótszálból kirepülő elektronok és a gáz-, illetve gőz-atomok kötelékébe tartozó elektronok összeütközésekor energiaátadás csak abban az esetben történhetik, ha a mozgó elektronnak legalább akkora sebessége van, hogy egy atom-elektront a normális pályájáról a szomszédos magasabb energiájú (külső) pályára tud emelni. Ha az elektron energiája ennél kisebb, akkor teljesen rugalmasan (változtatlan nagyságú sebességgel) elpattan az atómtól: az atom és elektron között rugalmas ütközés történik. Mihelyt azonban az elektron eléri a kérdéses sebességet, az ütközés közben egész energiáját

átadja az atom-elektronnak, s ekkor teljesen rugalmatlan ütközés lesz. A további sebességnövelés esetében az atom-elektron csak a megkívánt energiakvantumot veszi át, míg a fennmaradó energiával az elektron mozog tovább.

FRANCK és HERTZ fémgőzőket és nemesgázokat használtak kísérleti célokra, melyeknek atomjai nem ragadják magukhoz az elektronokat, csekély elektron-affinitást mutatnak. Első nevezetes méréseiket higanygőzön végezték s azt találták, hogy ha az izzószáll és a háló között a feszültségekülönbséget növelik, mind több és több elektron jut a galvánométerhez, tehát az áramerősség nő, majd 5 voltnál hirtelen lezuhan, mert az elektronok nagy része rugalmatlanul ütközik. (17. rajz.) Ez persze csak meghatározott potenciálkülönbség, illetőleg elektronsebesség mellett következhetett be. A potenciálkülönbség további növelésével ismét nőtt az áramerősség, de 10 volt körül újra lezuhant, mivel ekkor az elektron energiája akkora volt, hogy két különböző elektront tudott egy másik kvantum pályára emelni. Az eredeti pályájukról kilökött, majd oda visszaugró elektronok ibolyántúli fényt is sugárzanak ki, tehát a Franck—Hertz-féle kísérlet egy új mód a fény gerjesztésére is.

Ez a kísérlet jól megmagyarázható a Bohr-féle atommodellel, a diszkrét elektronpályák létezésével, amelyeken mozgó elektronok között meghatározott energiabeli különbség van. Az atómelektron csak akkor fogadhat el energiát az ütközőtől, ha ez utóbbi annyit tud neki adni, amennyi legalább a szomszéd pályára való jutáshoz szükséges. Egyúttal kizárja a kísérlet a csigavonalszerű elektronpályák létezését, hiszen ez esetben semmi értelme sem lenne a kritikus elektronsebességeknek.

13. A fényelektromos jelenségek, fénykvantumok. A Bohr-féle elmélet szerint minden kisugárzási és minden elnyelési folyamat alkalmával az elektron energiája $h\nu$ -vel változik meg. Ez a feltevés azonban csak rezgő vagy keringő elektronokra vonatkozik; szóval olyanokra, amelyek periodikus mozgást végeznek.

EINSTEIN egész általánosságban föltette, hogy ha egy tetszésszerű sebességgel haladó elektron lefékeződik, vagy fény hatására elektron válik ki valamilyen anyagból, az elektron energiájában beálló változás (ΔE) mindig egyenlő $h\nu$ -vel, vagyis

$$\Delta E = h\nu.$$

ZEMPLÉN Győző is az elsők között ismerte föl a kvantumgondolat általános érvényét.

Ha a Röntgen-lámpában az elektron a katódtól az antikatódig megy, mozgási energiáját úgy kapjuk meg, hogy a lámpára kapcsolt feszültséget szorozzuk az elektron töltésével (eV); ugyanis ekkora munkát végeznek az elektromos erők, míg az elektron a katódtól az antikatódig eljut. Ha viszont a keletkező Röntgen-fény rezgésszáma ν , akkor

$$eV = h\nu.$$

Persze nem az összes elektronok érkeznek az antikatódra a baloldalon jelzett energiával, hiszen közben ütközhetnek is stb. Ez a lehető legnagyobb energia. Így tehát a Röntgen-színképnek a nagy rezgésszámok felőli oldalán éles határa van, hirtelen megszűnik, nem olyan, mint a látható színkép. A határrezgésszám

$$\nu = \frac{eV}{h}.$$

Ez az egyenlet a tapasztalattal jó megegyezésben áll.

Hasonlóan, ha fényt ejtünk valamilyen anyagra, különösen fémre, elektronok repülnek ki belőle. Ha a beeső fény rezgésszáma ν , akkor az elektron legfeljebb akkora energiával repülhet ki, hogy mozgási energiája egyenlő $h\nu$ -vel, vagyis

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu.$$

Ez az egyenlet is egyezik a tapasztalattal. Ebből egyúttal az a meglepő jelenség is következik, hogy a fény hatására kiváló elektronok sebessége teljesen független a beeső fénynyaláb erősségétől, hanem csak annak a színétől függ. Még pedig az ibolyaszínű fény becsesebb, mint a vörös, mert az általa kiváltott elektronok nagyobb sebességre tesznek szert.

Előfordul az az eset is, hogy valamilyen színű fény árán másszínű, leggyakrabban kisebb rezgésszámú fényt kapunk. Ez történik a fluoreszcencia alkalmával, mikor pl. ibolyaszínű fényt ejtünk be s az anyag kékes színben világít. Tehát a visszakapott fényben szereplő $h\nu$ -mennyiség vagy kisebb, vagy legfeljebb akkora, mint a beeső fény $h\nu$ -je:

$$h\nu_v \leq h\nu_b.$$

Ez a híres Stokes-féle törvény.

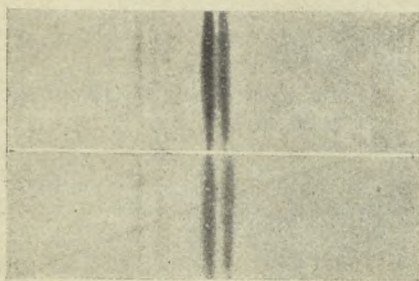
Amint látható, a $h\nu$ -mennyiségnek sok fizikai jelenség alkalmával fontos szerepe van. Hasonlóképpen tapasztalható ez a fényelektromos vezetés alkalmával is. GUDDEN és POHL megállapították, hogy a szelénen kívül az anyagoknak egész sorozata van, melyek az elektromos áramot sötétben egyáltalában nem, vagy csak nagyon rosszul vezetnek, a fény hatására azonban vezetővé válnak. Ilyenek a gyémánt, kén, cinkszulfid stb. A jelenség úgy magyarázható, hogy a fény hatására az atómkötelékből elektronok válnak ki, melyek azután az áramvezetést lehetővé teszik. Közelfekvő gondolat, hogy mindegyik elektron leválasztására éppen $h\nu$ -energia szükséges, tehát annyi elektron válik szabaddá és vesz részt az elektromos áramban, ahány $h\nu$ -energiakvantum van az egész elnyelt fény mennyiségben. Ez az ún. kvantumekvivalencia-törvény. Ezt leginkább a gyémántra találták érvényesnek.

Valószínű már most az a feltevés, hogy a fény nem hullámokban terjed tovább, hanem kicsiny térfogatokban összesűrítve; a kis térfogatban lévő fényenergia a fénykvantum; a fénykvantumban lévő energia éppen úgy együttmarad, bármilyen nagy távolságra jusson is el a fényforrástól, mint egy kilótt golyó. Nem így a hullám-elméletben! E szerint ugyanis egy kis térfogatba eső energiamennyiség fokozatosan kisebbedik, amint távolabb és távolabb megyünk a fényforrástól. A fénykvantumok többféle jelenség megmagyarázására alkalmasak, ilyen mindenekelőtt a fényelektromos jelenség s általában a diszkontinuus fényelnyelés, de már az interferencia és a polározás jelenségeinek körében esődöt mondanak, itt a hullám-elmélet diadalmaskodik.

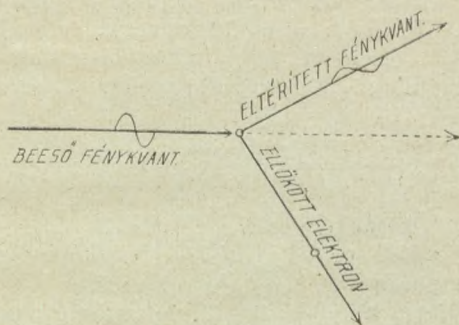
14. A Compton-effektus. Megismerve a fénykvantumok föltevését, beszámolhatunk a nevezetes jelenségről is, mely különösen alkalmas a föltevés támogatására. A fluoreszcenciához hasonló jelenség a Röntgen-sugarak körében is észlelhető. COMPTON 1922–23-ban azt tapasztalta, hogy a másodlagos Röntgen-sugárzás¹ — különösen ha a sugarak szétszóródása kicsiny

¹ Ha egy testre Röntgen-sugarak esnek, ez újabb Röntgen-sugárzás forrásává válik. Ez a másodlagos (secundaer) sugárzás.

rendszámú elemeket tartalmazó anyagon történik — kisebb rezgésszámú, lágyabb lesz, mint a gerjesztő sugárzás (18. rajz). A sugár lágyulása azonban, mely tulajdonképen a hullámhosszúság növekedését jelenti, függ a szórási szögtől, melyet a szétszórt sugár a beesővel bezár, még pedig e szöggel együtt növekszik; a hullámhosszúság legfőljebb 0.0486 \AA -mel növekedhetik, ha a beesővel éppen ellentétes irányú sugárra gondolunk. Nagyon nevezetes azonban, hogy a lágyulás teljesen független a másodlagosan sugárzó anyag minőségétől és a beeső sugárzás hullámhosszúságától, keménységétől. Úgyhogy, ha igen kemény Röntgen- vagy γ -sugarakat használunk, a hullámhosszúság kétszeresére is növekedhetik. A sugárzás lágyulása fokozatos is lehet, ha a sugárzás egymás után többszörös szóródást szenved.



18. rajz. A molybdán $K\alpha$ (jobbrol) és $K\beta$ (balról) röntgen-színkép vonalainak Compton-effektusa grafiton. A kettős vonalak közül a bal az eredeti vonal, míg a hozzá közel eső az eltolódott színkép vonal. A felső 72° , az alsó 90° szórási szögre vonatkozik.



19. rajz. A Compton-effektus vázlatos lefolyása a fénykvantumok alapján.

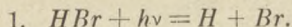
Ez a jelenség jól megmagyarázható a fénykvantumok föltevésével, sőt nem is igen van más mód erre, ezért ezt tekintik a fénykvantumok egyik főtámaszának. A fénykvantumok úgy repülnek tova a térben, akárcsak az elektronok, nagyon csekély tömegük is van. (19. rajz.) Ha egy Röntgen-fénykvantum lazán kötött elektronnal összeütközik, energiájából ad át neki, kilöki, saját maga pedig más irányban kisebb energiával tovarepül; igen, de energiája $h\nu$ -volt, tehát kellett, hogy a rezgésszáma kisebbedjék, vagyis a hullámhosszúsága növekedjék. E gondolat alapján levezethető képletek a mérések eredményeivel jó összhangban vannak.

15. A fotokémia és a fénykvantumok. A fényelektromos hatás módjára csakhamar a fény kémiai hatása is (a fotolízis és fotoszintézis) bekapcsolódott a kvantumelmélet tárgykörébe. Erre és a gázok ionizációjára vonatkozólag EINSTEIN a következő törvényt mondotta ki: a szétvált molekulák, illetőleg ionizált atómkok száma (N) egyenlő az elnyelt fényenergiában (E_a) foglalt kvantumok számával:

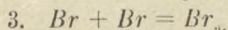
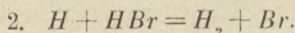
$$N = \frac{E_a}{h\nu}$$

Ez a fotokémiai ekvivalencia törvénye, melyet szerzője később csak a látható és ibolyántúli sugárzásra korlátozott. E törvényt gázokon (bróm-

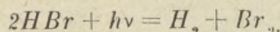
hidrogén szétbontása) WARBURG, brómezüst-rétegű fényképezőlemezeken pedig EGGERT és NODDACK vizsgálták. WARBURG azt tapasztalta, hogy minden elnyelt fényadagra két brómhidrogén-molekula széthasadása esik, ami látszólag ellentétben áll a fenti törvénnyel. Szekundér-reakciók fölvételével azonban sikerült megmenteni a törvény érvényességét erre az esetre. A primér-hatás ugyanis az lenne, hogy a fényadag szétválaszt egy brómhidrogén-molekulát:



Ezt követi most egy másodlagos reakció:



Úgy, hogy végeredményképen a következőt tapasztaljuk:



Hasonlóképen áll a dolog a jódhidrogén esetében is.

WARBURG eredményeit a következő kis táblázatban foglalhatjuk össze. (A λ jelenti a fény hullámhosszúságát mikronokban, n pedig egy elnyelt fényadagra eső szétváló molekulák számát.)

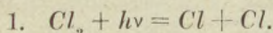
	λ	n		λ	n
HBr	0,207	2,10	HJ	0,207	1,98
	0,253	2,00		0,253	2,08
				0,282	2,10

A megegyezés kielégítő.

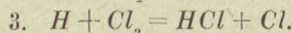
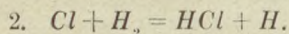
EGGERT és NODDACK fényképezőlemezeken azt találták, hogy amíg a megvilágítás nem túlságosan erős, a szétbontott brómezüst-molekulák, tehát a kivált ezüst-atómok száma nagyjában egyenlő az elnyelt fénykvantumokéval. De erősebb megvilágítás mellett 50%-os eltérések is felléptek, sőt az említett kutatók további méréseiben még sokkal nagyobbak is előfordultak.

Kísérletileg szigorúan igazoltnak nem tekinthető a fotolízis fentebbi törvénye; a tapasztalat csak annyit mond, hogy minden molekula szétválásztására vagy minden atóm ionizálására szükséges egy bizonyos energiamennyiség s természetesen a szétválasztott molekulák számát közelítőleg megkapjuk, ha ennek a közelítő értékével elosztjuk az elnyelt energiamennyiséget.

A fotoszintézis alkalmával a fénykvantumok hatása csak primér jelenség. Itt a fény katalizátor szerepét játssza, amennyiben az egész folyamatot megindítja, pl. a H és Cl fotoszintézise alkalmával. Ez esetben a fénynek közvetlen hatása egyik felfogásmód szerint a klóratómok disszociációjában nyilvánul:

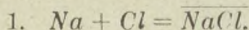


A szekundér jelenség, mely sósavgáz keletkezésében áll, már kémiai reakció:

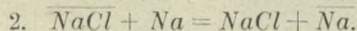


Ezután a H- és Cl-atómok körében a 2. és 3. reakció tovább folytatódik magától úgy, hogy csekély fénymennyiség hatására óriási számú HCl-molekula keletkezik. Megáll azonban a reakció, ha 2—2 H-, vagy Cl-atóm egymásra talál s belőlük inaktív H_2 , illetve Cl_2 -molekula képződik.

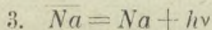
Az eddigiek arról szóltak, miképen lehet fénnel befolyást gyakorolni a kémiai reakciókra. A jelenség megfordítása abban áll, hogy kémiai reakciók közben fénykibocsátás történik. Ez a jelenség jól ismeretes a magas hőmérséklet mellett lejátszódó reakciók közben. De előfordul máskor is. Így pl. ha nátriumgőzt és klórgázt alkalmas módon vegyülni engedünk, élénken fellép a sárga nátriumláng, jóllehet a hőmérséklet 500°C -nál nem magasabb. Fontos a nátriumklorid-molekulák és a nátriumatómok együttes jelenléte. A jelenség lefolyása úgy képzelhető el, hogy a keletkező nátriumklorid-molekulák egy ideig megtartják az egyesüléssel járó energiát, majd ezt a nátriumatómoknak adják át, minek jeléül ezeknek az elektronjai külső pályákra jutnak, majd ismét a normálpályára visszatérve kisugározzák a nátriumvonalat. Tehát a NaCl -molekulák a keletkezés után bizonyos gerjesztett állapotban maradnak, melyet a felső vízszintes vonal jelez.



Majd ezek átadják a reakcióval járó energiájukat a nátrium-atomoknak s ezeket gerjesztik:



Ezután a gerjesztett atom normális állapotba jut:



s fellép a sárga színű láng, mely a nátriumot jellemzi.

16. Kémiai affinitás. Vegyületek. A Bohr-féle elméletnek s így egyúttal a kvantumelméletnek is egyik nagyjelentőségű eredménye, hogy számot tud adni a kémiai affinitásról, így a vegyületek, sőt a molekulák keletkezéséről is.

BERZELIUS a kémiai rokonság lényegét az atomok elektromos töltésében kereste. A pozitív töltésű atomok könnyen kapcsolatba léptek a negatív töltésűekkel, mikor is az elektromos vonzóerő szolgált összekötő kapocs gyanánt. De az egész feltevés megdőlt, mihelyt számot kellett adni egy hidrogén-molekuláról, melyben két teljesen megegyező atom kapcsolódik egymással; vagy még inkább az ozon-molekula esetében, melyben még három megegyező töltésű oxigén-atom fordul elő.

A Bohr-féle elmélet rávilágít BERZELIUS alapgondolatának a helyességére, melynek lényege tulajdonképen az, hogy az atomokat összetartó erő az elektromos erő. Ugyanis rögtön eltűnnek a nehézségek, ha az atomot nem egyetlen, elektromos töltéssel ellátott kis testnek gondoljuk, hanem BOHR nyomán egy egész rendszernek. Egyes elemek pozitív természete itt azt jelenti, hogy ezek könnyen megválnak egy vagy több elektronjuktól, melyek laza kötelékben állanak a rendszerrel; a negatív elemek meg szívesen vesznek föl elektronokat. Mi irányítja itt az elektronok fölvételét vagy leadását? Egyszerűen az a törekvés, hogy a külső elektronburok olyan legyen, mint egy nemes gázé, melyben nyolc elektron van s amely egy stabilis, vegyülésre nem igen hajlandó rendszert képez. Minden elem atomja ilyen biztos révbe akar jutni, ha van rá alkalom. Ha tehát olyan atomok kerülnek egymás közelébe, amelyek között könnyen bekövetkezik az, hogy bizonyos elektronok átadása által mindegyik nemesgáz jelleget vesz föl (pl. Na és Cl), akkor ezek nagy vonzódást, nagy affinitást mutatnak egymással szemben. Kémiaileg rokonok azok az elemek, ame-

lyeknek atómjai bizonyos elektronok átadása által nemesgáz-jellegűvé válnak.

A kémiai egyesülés (heteropolaris vegyülés) már most úgy történik, hogy előbb az egymás közelébe jutó atomok az elektronok átugrása alkalmával ellentétes töltésűekké válnak s akkor azután a fellépő vonzóerők összetartják őket. KOSSEL szerint az egész vegyülésben egy sajátságos paradoxon észlelhető: a vegyülni készülő atomok először nemesgáz-jelleget öltenek — jóllehet a nemesgázok kémiai rokonságot nem mutatnak — s azután egyesülnek. Így pl. $NaCl$ esetében

a Na átad egy elektront, lesz neon-jellegű.

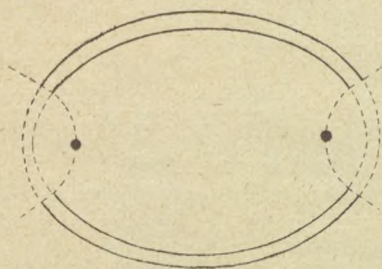
a Cl átvesz egy elektront, lesz argon-jellegű.

Az AlO_3 esetében

egy Al -atóm átad három elektront s lesz neon-jellegű,

egy O -atóm meg átvesz két elektront s lesz neon-jellegű.

De még ha nem is választjuk azt vezető gondolat gyanánt, hogy a vegyülő elemek atómjai nemesgáz-jellegűek lesznek, akkor is elgondolhatjuk az egész vegyülési folyamatot úgy, hogy a két vagy több atómmag olyan helyzetet foglal el, hogy a körülöttük keringő elektronokkal együtt egy stabilis rendszert alkotnak, bár a magok helyzetét és a pályák alakját meghatározni nem tudjuk.



20. rajz. Az egyszerűen ionizált hidrogén-molekula elektronja forgási ellipszoidok között mozog, melyeknek keresztmetszete vastagon van rajzolva.

Ugyanilyen felfogás alapján elgondolhatjuk a homöopolaris vegyületek, a molekulák keletkezését is. A magok elfoglalnak valamilyen helyzetet s egymást taszítják, de a körülöttük keringő elektronok meg ellensúlyozzák ezt a taszítást. Így pl. az egyszerűen ionizált hidrogén-molekulát úgy képzelhetjük el, hogy egy ellipszis két gyújtópontjában van a két atómmag, melyek körül kering egy elektron valamilyen szeszélyes térbeli pályán. Ez a pálya azonban mindig két közeli forgási ellipszoid közé eső, tojásbéljűhöz hasonló tartományban van; de az ellipszoid két végébe nem juthat az elektron, mert ekkor a molekula stabilitása megszűnnék (20. rajz).

Még sok olyan területe van a fizikának és kémiának, melyekre a kvantumelmélet egy-egy világító fényesóvát vetett. Ezekre azonban nem terjeszkedhetünk ki, csak azt említjük meg, hogy a híres Eötvös-féle törvényt is, mely első pillanatra meglehetősen távol esik az itt érintett jelenségektől, sikerült a kvantumelmélet alapján levezetni.

17. A kvantumelmélet újabb haladása. Bár az egész kvantumelmélet még csak egy negyedszázadot élt, mégis van új és legújabb hajtása. Az új HEISENBERG, BORN és JORDANTÓL származik s meglehetősen bonyolult, nagy matematikai apparátust kíván. Erre nem terjeszkedhetünk ki. A legújabb kvantumelméletet SCHRÖDINGER fejtette ki, még pedig DE BROGLIE alapvető gondolataira támaszkodva.

a) DE BROGLIE a mozgó anyagi ponthoz hullámot rendelt hozzá, ami érdekes és nagyjelentőségű kísérleteket keltett életre. A hozzárendelés gondolat-

menetét a következőleg vázolhatjuk. Egy fénykvantum energiája a korábbiak szerint

$$E = h\nu.$$

Másrészről a relativitás elmélete szerint minden energiának megvan a maga tömeg egyenértéke és fordítva, tehát minden, a fény sebességével repülő fénykvantumnak is bizonyos tömeget tulajdoníthatunk, mely természetesen rendkívül kicsiny, még pedig

$$m = \frac{E}{c^2},$$

ha E a fénykvantum energiája. Ebből

$$E = mc^2,$$

vagyis a tömeg olyan kicsiny, hogy a fénysebesség négyzetével kell szoroznunk, hogy a fénykvantumnak amúgy is kicsiny energiáját megkapjuk.

A fenti egyenletekből

$$mc^2 = h\nu \text{ és } \frac{c}{v} = \frac{h}{mc}.$$

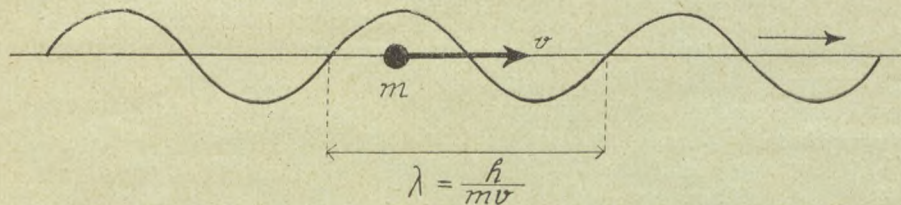
De mivel a fény terjedési sebességének és rezgésszámának a hányadosa a hullámhosszával egyenlő $\left(\frac{c}{v} = \lambda\right)$, egy fénykvantumnak megfelelő hullámhosszáig a hozzárendelt tömeggel így fejezhető ki:

$$\lambda = \frac{h}{mc}.$$

DE BROGLIE ezt az összefüggést — mely eddig csak a fénykvantumokra vonatkozik — általánosította. Még pedig a v sebességgel egyenletesen mozgó m tömeghez (elektronhoz is) olyan hullámot rendelt hozzá, melynek hullámhosszája

$$\lambda = \frac{h}{mv},$$

a hullám terjedési irányára nézve pedig föltette, hogy az megegyezik a mozgás irányával (21. rajz).

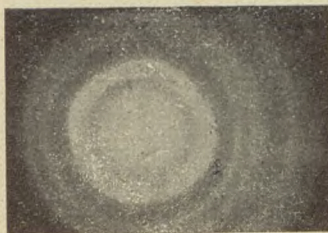


21. rajz. Az egyenletesen mozgó anyagi pont és a hozzá rendelt hullám.

b) Ez a gondolat különösen az elektronokra bizonyult termékenynek. Ugyanis kiderült, hogy az elektronokkal olyan természetű kísérletek állíthatók elő, mint a fény- és Röntgen-hullámokkal. Így DAVISSON és GERMER amerikai fizikusok elektronnyalábot nikkellemezre ejtettek, mely a mai nézeteink szerint kicsiny kristályokból van fölépítve, s azt tapasztalták, hogy csak meghatározott irányokban kapnak visszaverődő elektronokat, míg a közbeeső irányokban az elektronok egymást „lerontják“, akárcsak az interferencia esetén a hullámok. A kísérleti adatokból kiszámították, hogy ha az elektronokat hullámokkal helyettesítik, milyen hosszúságú hullámokra van szükség, hogy az észlelt tapasztalati eredményeket kapják: kiderült, hogy a de Broglie-féle összefüggés helyes. Szóval az elektron úgy viselkedik, mint az egyenlet által meghatározott hullám. E kísérleteket általánosították, G. P.

THOMSON igen vékony, kb. tizedmikron vastagságú fémhártyákon küldött át elektronsugárnyalábokat s a másik oldalon a fényképező lemezen gyönyörű gyűrűrendszert kapott, mely a Newton-féle gyűrűkhöz hasonlít egyszínű fény esetében: az elektronok itt elhajlási és interferencia jelenséget mutatnak, akárcsak a hullámok (22. rajz). Ha az elhajlított elektronnyalábot mágneses tér hatásának tette ki, a gyűrűk alakja megváltozott, tehát nem másodlagos Röntgen-sugarak okozták a jelenséget. A kiszámított hullámhosszúság megfelel a de Broglie-féle egyenletnek. — Betetőzte az elektronok hullámtermészetére vonatkozó kísérleteket Rupp, aki kísérleteihez a fénytannban már régóta használatos fémrácsot vett. Tükröző fémfelület ez, melyen igen sűrűn vannak finom, szabad szemmel láthatatlan karcolások. Ha egyszínű fényt ejtünk ilyen fémrácsra, a visszaverődéskor váltakozó világos és sötét csíkokat látunk. Ugyanezt tapasztalta Rupp a fényképező lemezen, ha elektronok estek a fémrácsra. Kiszámítva a hullámhosszúságot, ugyanesak érvényesnek találta De Broglie egyenletét.

E kísérletekből kiderül, hogy az anyag (elektronok) néha hullámjellegű, máskor meg a hullám úgy viselkedik, mintha anyagi jellege volna. (Compton-féle jelenség.) De Broglie érdeme, hogy számszerűleg fejezte ki a kapcsolatot.



22. rajz. Az elektronokkal előállított elhajlási jelenség.

c) Amint láttuk, a kvantumelmélet tulajdonképpen a kvantumintegrálokon nyugszik. Ezek az integrálok szabnak korlátot az atom, elektron mozgására vonatkozólag. Ezeknek a segítségével lehet kiszámítani a lehetséges pályák adatait s az energia értékeit e pályákon. Bár rámutattunk arra, hogy ezek a kvantumintegrálok miképpen fejlődtek ki az energiakvantumok gondolatából, mégis be kell vallanunk hogy általuk önkényes és meglehetősen idegenszerű korlátokat állítottunk föl a mikrokozmoszban. Magával a kvantumelmélettel egyidejűleg fejlődött a vágy, hogy az egész elméletet valamiképpen közelebb hozzák a klasszikus fizikához; ez másszóval azt jelenti, hogy a kvantumintegrálokat helyettesítsük olyan matematikai formulával, amely közelebb áll a folytonos fizikai felfogásmódhoz. Ebben a szellemben tett egy lépést SCHRÖDINGER.

Ismeretes, hogy a fizikusok a jelenségek matematikai leírására a differenciálegyenletet használják. Így pl. a pont rezgő mozgására nézve igaz az, hogy a fellépő rugalmas erő, mely itt a mozgató erő, arányos az elmozdulással, de azzal ellenkező irányú. Írjuk ezt matematikai alakban. Az erő egyenlő a pont tömegének és a gyorsulásnak a szorzatával: m és a . A gyorsulás pedig itt az elmozdulásnak a második differenciálhányadosa: $\frac{d^2q}{dt^2}$, hol q az elmozdulás és t a folyó idő. Így tehát az erő:

$$m \frac{d^2q}{dt^2} = -kq,$$

hol k az arányossági tényező, a minusz jel pedig azt fejezi ki, hogy az erő ellenkező irányú, mint az elmozdulás. Ez egy differenciálegyenlet. Ha itt még megadunk bizonyos kezdő feltételeket, pl. azt, hogy mekkora lesz a legnagyobb kirezgés (az amplitudo), akkor a differenciálegyenlet megoldása tel-

jesen tájékoztat bennünket a mozgás egész lefolyásáról, a sebességről, gyorsulásról, stb. A klasszikus fizika tárgyalási módja tulajdonképpen az, hogy megkeresi a differenciálegyenletet, melyben a jelenség összes lényeges tulajdonságai burkoltan benne vannak és ebből igyekszik kihámozni a jelenség lefolyását.

SCHRÖDINGERnek az a szerencsés gondolata támadt, hogy talán lehetne a kvantumintegrálokat is egy differenciál-egyenlettel helyettesíteni. Sőt De Broglie gondolatai alapján meg is találta ezt a differenciál-egyenletet.

Eljárásának lényege a következő. Az egyenletesen mozgó anyagi pont-hoz rendelt hullám matematikailag így fejezhető ki:

$$\psi = a \cos 2\pi\nu \left(t - \frac{x}{\lambda\nu} \right),$$

hol a a hullám amplitudóját, t az időt, x pedig a terjedés irányát jelenti. Ez egyenlőség fizikai tartalma nagyon egyszerű: gondoljuk, hogy egy kifeszített kötélen hullámok haladnak végig; a ψ a kötélen egy tetszőszerinti pontjának (a végétől x távolságban) egy tetszőszerinti időpontban való kirezdülését jelenti.

Ha kiszámítjuk a ψ -nek második differenciálhányadosát x szerint,¹ meggyőződhetünk róla, hogy a ψ eleget tesz a következő differenciálegyenletnek

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0,$$

mely az ú. n. „hullámegyenlet” speciális alakja.

Azonban DE BROGLIE szerint $\frac{1}{\lambda^2} = \frac{m^2 v^2}{h^2}$.

Továbbá

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 \text{ és } 2m E_{kin} = m^2 v^2,$$

tehát

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{2m E_{kin}}{h^2}.$$

Behelyettesítve ezt a hullámegyenletbe:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E_{kin} \psi = 0.$$

Ez az egyenlet eddig csak egyenesvonalban egyenletesen mozgó anyagi pontra vonatkozik. SCHRÖDINGER föltette, hogy ez az egyenlet akkor is érvényes, ha a kinetikai energia mellett még helyzeti (potenciális) is van (pl. lineáris oszcillátor). Ekkor

$$E_{kin} = E_{teljes} - E_{pot} = E - V.$$

Így azután a Schrödinger-féle egyenlet a következő alakú lesz:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0.$$

Alkalmazzuk ezt a rezgő anyagi pontra (lineáris oszcillátorra). Itt a ψ egy ismeretlen függvénye a q -nak, a kirezgésnek. Ha az energiára nézve bizonyos értéket megadunk és beírjuk a helyzeti energia kifejezését

$$E_h = 2\pi^2 \nu^2 m q^2,$$

akkor meg lehet keresni azt a $\psi(q)$ függvényt, mely a differenciál-egyenletet

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= \frac{d}{dx} \left[a \cos \left(2\pi\nu t - \frac{2\pi}{\lambda} x \right) \right] = -a \frac{2\pi}{\lambda} \sin \left(2\pi\nu t - \frac{2\pi}{\lambda} x \right) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= -a \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cos 2\pi\nu \left(t - \frac{x}{\lambda\nu} \right) \end{aligned}$$

kielégíti, vagyis behelyettesítve a bal oldalt zérussá teszi. A ψ függvény alakja természetesen függeni fog attól, hogy az E értéke milyen. SCHRÖDINGER most a következő kérdést vetette föl: Vajjon milyen energia (E)-értékek mellett található olyan ψ függvény, amely a differenciál-egyenletet kielégíti, s amely q -nak akár milyen értéke mellett folytonos görbével ábrázolható egy koordinata-rendszerben; a q végtelen nagy értéke mellett pedig zérus lesz. Kiderült, hogy ilyen megoldás csak akkor található, ha E a következő értékű:

$$\frac{1}{2} h\nu, \left(1 + \frac{1}{2}\right) h\nu, \left(2 + \frac{1}{2}\right) h\nu, \dots \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu,$$

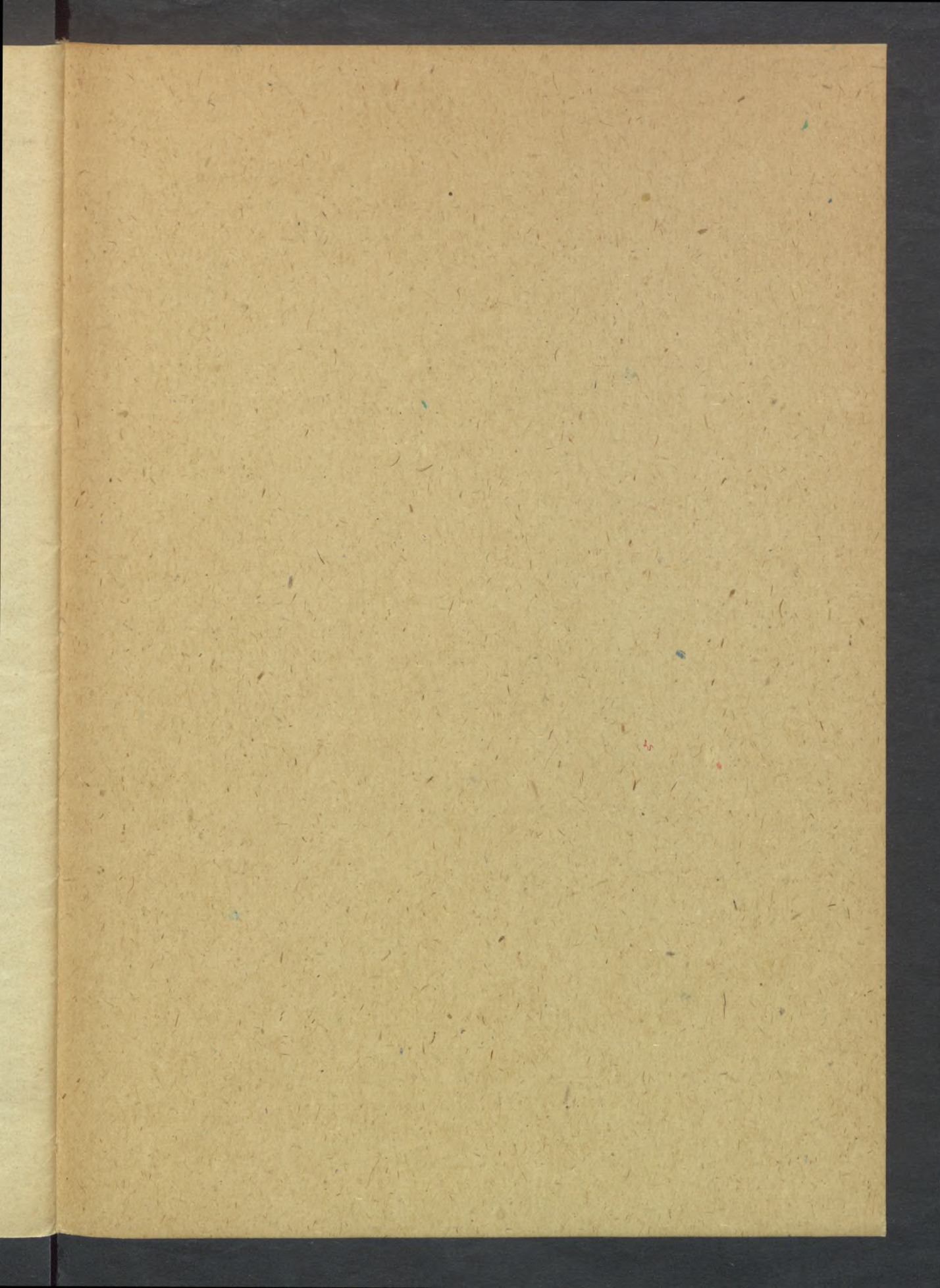
hol n egy pozitív egész szám. Íme viszontlátjuk az energiakvantumokat! Azonban a rezgő pont energiája nem egész számú többszöröse a $h\nu$ -nek, hanem még $\frac{h\nu}{2}$ hozzájárul. Ennyiben eltér az új eredmény a régitől. Az azonban most is fennáll, hogy az energia pillanatnyilag csak $h\nu = \epsilon$ -nal változhatik. A felsorolt E -értékeket nevezik az E jellemző értékeinek (Eigenwert). Míg tehát előbb a kvantumintegrál segítségével számíthattuk ki a rezgő pont kvantumelméleti energia-értékeit, addig most egy differenciál-egyenletben szereplő állandó jellemző értékeit kell kiszámítanunk. Sajnos, a ψ megoldás fizikai jelentése nincs eléggé tisztázva.

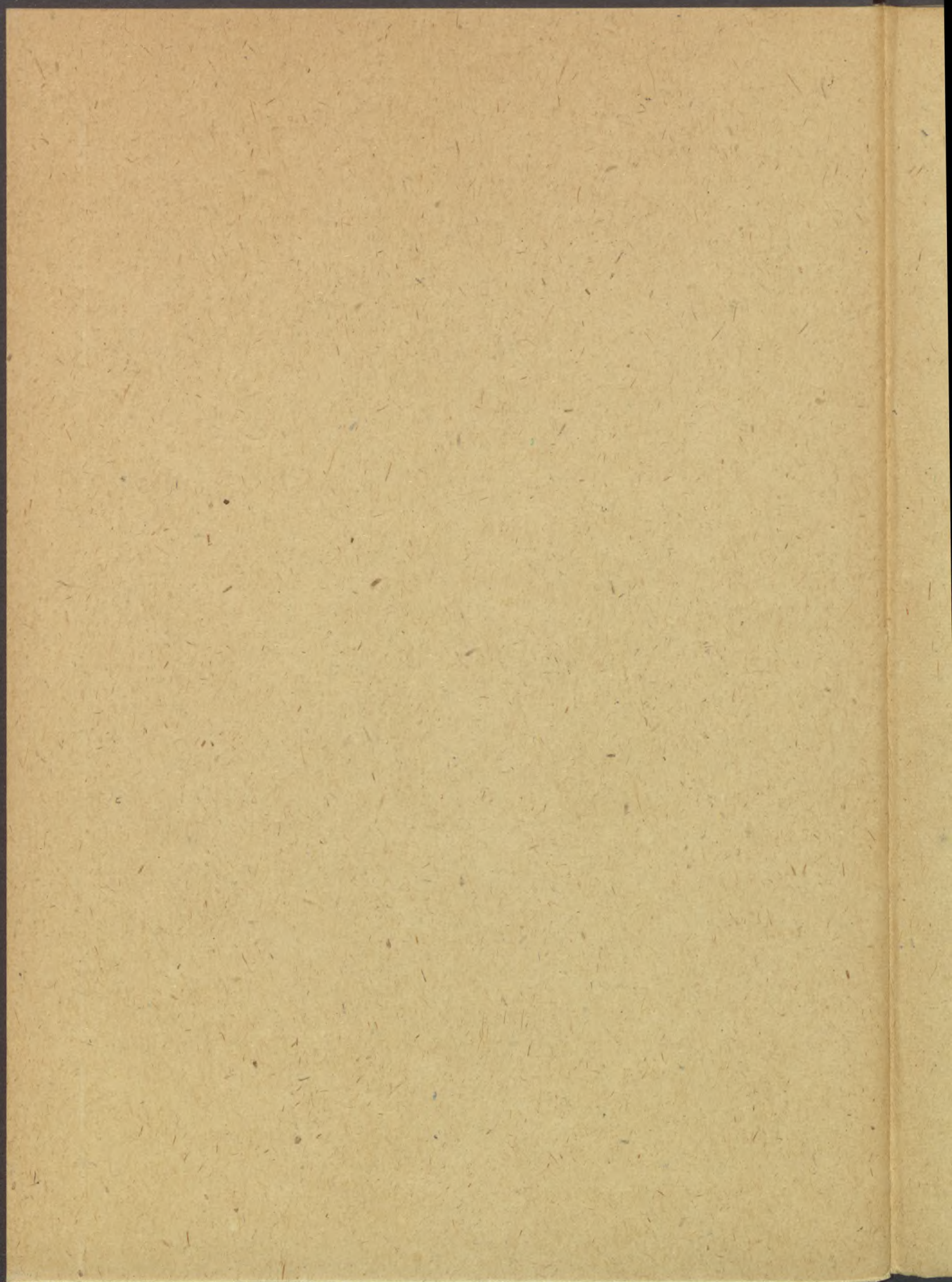
SCHRÖDINGER e lépésének még az az előnye is megvan, hogy a kvantumolás kérdését egységesítette. Ugyanis láttuk, hogy az ellipszispályán keringő elektron esetében már két kvantumintegrál volt, most azonban az előbbihez teljesen hasonló szerkezetű egyetlen differenciál-egyenlet szolgáltatja a probléma megoldását, csak a helyzeti energia értékét és a fellépő újabb helyzeti koordinátákat kell figyelembe venni. Tagadhatatlan azonban, hogy a differenciál-egyenletben szereplő E jellemző értékeinek meghatározása matematikailag jóval nehezebb feladat, mint a kvantumintegrálokkal való számolás.

A Schrödinger-féle differenciál-egyenlet nyomán az elektronra, az anyagi pontra vonatkozólag egy új fizikai felfogásmód alakult ki, melyben a hullám fogalmának igen fontos szerep jut. Az egész elméletet „hullámmechanikának” is nevezik. Erre nem terjeszkedünk ki. Ügyszintén nem térhetünk rá azokra az eredményekre sem, melyeket ez az új elmélet a vegyértékre vonatkozólag felszínre hozott.

Vázoltuk egy fejlődésben lévő elmélet alapvonalait. Hangsúlyozzuk, hogy azok a feltevések, melyek sok esetben gyökeresen szakítanak a klasszikus fizikai felfogásmóddal, csak föltevések, korántsem tekintendők kémiai vagy fizikai valóságnak. Annyi bizonyos, hogy sok jelenség elméletileg értelmezhető segítségükkel, sőt egyenesen kívánják a jelenségek a kvantumfeltevéseket, viszont más területeken meg hiányok mutatkoznak. Cél a föltevéseket, az egész elméletet úgy kifejleszteni, hogy annak minél nagyobb átfogó ereje legyen, hogy a jelenségeknek minél nagyobb halmaza találjon egységes értelmezést, s hogy az emberi elme minél teljesebb megnyugvást találjon az elméletben. A haladásnak ezen az útján természetesen egyetlen vezető elv lehet: a való tapasztalat! A kvantumelmélet is csak akkor fog egészséges irányban fejlődni, ha azt tapasztalathoz szabják, s helytelen irányban halad, ha tetszetős elméleti gondolatokért vagy matematikai formulákért feláldozzák az élő valóságot.

Dr. Császár Elemér.





1972 SEP 25

