

Fizikatörténet

A kvantummechanika története

Horváth András
SZE, Fizika és Kémia Tsz.

v 1.0

A 19. század fizikája

AFKT 5.1.1

A 19. század végén a fizika beteljesedni látszott.

Fő területek:

- klasszikus mechanika
- elektromos és mágneses terek elmélete
- optika
- termodinamika, statisztikus fizika

A 19. század fizikája

AFKT 5.1.1

A 19. század végén a fizika beteljesedni látszott.

Fő területek:

- klasszikus mechanika
- elektromos és mágneses terek elmélete
- optika
- termodinamika, statisztikus fizika

Az első 3-ról, illetve a kombinációjukból adódó relativitáselméletről már tanultunk.

Termodinamika és statisztikus fizika: időhiány miatt nem vettük. (Szorgalmi: AFKT 4.5)

Az anyag szerkezetének megismerése

AFKT 4.6.1–4.6.2

Atomokkal kapcsolatos tudás:

- A legkisebb építőkövek (atomok) gondolata a görögöknél merül fel, de nincs kísérleti bizonyítékuk.

Az anyag szerkezetének megismerése

AFKT 4.6.1–4.6.2

Atomokkal kapcsolatos tudás:

- A legkisebb építőkövek (atomok) gondolata a görögöknél merül fel, de nincs kísérleti bizonyítékuk.
- 18-19. század fordulója, Lavoisier és Proust: állandó súlyviszonyok törvénye. Az elemek csak meghatározott arányokban vegyülnek, ami legegyszerűbben az atomok léteével magyarázható.

Az anyag szerkezetének megismerése

AFKT 4.6.1–4.6.2

Atomokkal kapcsolatos tudás:

- A **legkisebb építőkövek (atomok)** gondolata a görögöknél merül fel, de nincs kísérleti bizonyítékuk.
- 18-19. század fordulója, **Lavoisier és Proust: állandó súlyviszonyok törvénye.**
Az elemek csak meghatározott arányokban vegyülnek, ami legegyszerűbben az atomok létevel magyarázható.
- Hővel vagy elektromossággal **kis, negatív töltésű részecskék, elektronok szakíthatók ki belőlük.**
Sok sikertelen próba után az 1880-as években J.J. Thomson igazolja, hogy kis részecskékről van szó.

Az anyag szerkezetének megismerése

AFKT 4.6.1–4.6.2

Atomokkal kapcsolatos tudás:

- A **legkisebb építőkövek (atomok)** gondolata a görögöknél merül fel, de nincs kísérleti bizonyítékuk.
- 18-19. század fordulója, **Lavoisier és Proust: állandó súlyviszonyok törvénye.**
Az elemek csak meghatározott arányokban vegyülnek, ami legegyszerűbben az atomok létevel magyarázható.
- Hővel vagy elektromossággal **kis, negatív töltésű részecskék, elektronok szakíthatók ki belőlük.**
Sok sikertelen próba után az 1880-as években J.J. Thomson igazolja, hogy kis részecskékről van szó.
- Az atomokat és molekulákat kis golyóknak tekintve **a statisztikus fizika eszközeivel sok termodinamikai jelenség megmagyarázható.**

Pár szó a statisztikus fizikáról

19. század: atomok és molekulák mozgása a newtoni fizika alapján. Gond: igen nagy a részecskeszám. (12 g szénben 1 mól = $6 \cdot 10^{23}$ részecske!)

⇒ Kialakul a „statisztikus fizika”, ami a sok részecskéből álló rendszereket írja le.

Két legjelentősebb kutató: **J.C. Maxwell** és **Ludwig Boltzmann** (1844-1906).

Legfontosabb eredmények:

- Gáztörvények leírása a molekulák mozgása alapján.
- Megfeleltetés a mikroszkopikus mennyiségek (molekulák száma, tömege, sebessége, ...) és a makroszkopikusak között (nyomás, belső energia, entrópia, ...)



Pár szó a statisztikus fizikáról

Kulcsfontosságú eredmények a 19. században:

Ekvipartíció tétel: hőmérsékleti egyensúlyban a részecskék szabadsági fokaira átlagosan $1/2 \cdot kT$ energia jut, ahol $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K, a Boltzmann-állandó, T a hőmérséklet kelvinben.

Pár szó a statisztikus fizikáról

Kulcsfontosságú eredmények a 19. században:

Ekvipartíció tétele: hőmérsékleti egyensúlyban a részecskék szabadsági fokaira átlagosan $1/2 \cdot kT$ energia jut, ahol $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K, a Boltzmann-állandó, T a hőmérséklet kelvinben.

Az entrópia statisztikus értelmezése: Az entrópia egy elvont fogalom, ami hasznosnak bizonyult a hőerőgépek értelmezésében.

Boltzmann megtalálja a statisztikus fizikai jelentését: Ha egy makroszkopikus állapotot W darab mikroszkopikus állapot valósít meg, akkor az entrópia: $S = k \cdot \ln W$.

Pár szó a statisztikus fizikáról

Kulcsfontosságú eredmények a 19. században:

Ekvipartíció tétel: hőmérsékleti egyensúlyban a részecskék szabadsági fokaira átlagosan $1/2 \cdot kT$ energia jut, ahol $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K, a Boltzmann-állandó, T a hőmérséklet kelvinben.

Az entrópia statisztikus értelmezése: Az entrópia egy elvont fogalom, ami hasznosnak bizonyult a hőerőgépek értelmezésében.

Boltzmann megtalálja a statisztikus fizikai jelentését: Ha egy makroszkopikus állapotot W darab mikroszkopikus állapot valósít meg, akkor az entrópia: $S = k \cdot \ln W$.

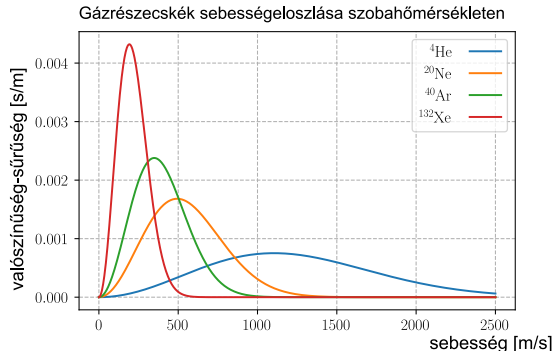
Fajhő és hőkapacitás számítások:

- Gázok esetén jól működik.
- Szilárd testek fajhőjét nem mindig sikerül jól leírni.

A molekulák sebesség szerinti eloszlása gázokban

Maxwell és Boltzmann nemcsak a molekulák átlagenergiáját fejezi ki, hanem megadja a **sebesség szerinti eloszlást** is.

- Egy adott gáznak egy adott hőmérsékleten van egy sebesség-értéke, ahol az eloszlás maximuma van és megadott függvény szerint kétoldalt lecseng a görbe.
- Nagyobb hőmérsékleten a csúcs nagyobb sebességek felé tolódik el.
- Nagyobb molekulatömegnél kisebb sebességnél van a csúcs.



Kísérleti ellenőrzés: gáztartályba fűrt kis lyukon kirepülő részecskék vizsgálatával.

Nyitott kérdések

A 19. század végének néhány nyitott kérdése:

- Hogyan keletkezik a fény az izzított testek esetén?
- Miért vonalas az atomok színeképe?
- Mi van az atomok belsejében?
- Mi tartja egybe a szilárd testeket?

A korábbi sikerek miatt **azt hitték, hogy a klasszikus mechanika, a maxwelli elektrodinamika és a statisztikus fizika ügyes kombinációja mindenre választ ad majd.**

Nyitott kérdések

A 19. század végének néhány nyitott kérdése:

- Hogyan keletkezik a fény az izzított testek esetén?
- Miért vonalas az atomok színeképe?
- Mi van az atomok belsejében?
- Mi tartja egybe a szilárd testeket?

A korábbi sikerek miatt **azt hitték, hogy a klasszikus mechanika, a maxwelli elektrodinamika és a statisztikus fizika ügyes kombinációja mindenre választ ad majd.**

A következőkben meglátjuk, hogy az ezekre adott válasz teljesen más irányba vitte a fizikát.

Az izzított testek sugárzása

AFKT 5.3.1–5.3.3

(a levezetések nélkül)

Régről ismert: a forró testek sugároznak.
(pl. izzó vasdarab).

Kísérletileg vizsgált kérdések a
19. szd-ban:

- Mitől függ a kibocsátott össz energia?
- Hogyan oszlik el hullámhossz szerint a sugárzás?



Voltak korábbi tapasztalatok: pl. 500°C körül mélyvörös a szín, 1000°C körül vörös, 2000°C körül narancsos.

Hiányzott a pontos kísérleti leírás és az elméleti magyarázat.

A sugárzási Kirchhoff-törvény

Kirchoff, 1859-60: Tanulmányozza, hogyan függ a hőmérsékleti sugárzás a tárgy saját színétől.

Fontos tény: a folyamat során a testek el is nyelnek és sugároznak is fényt.

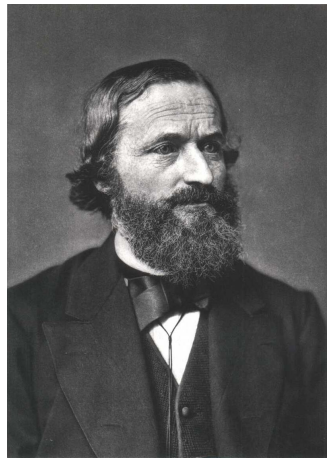
- Kibocsátóképesség: $e(\lambda)$. (e=emisszió)
- Elnyelőképesség: $a(\lambda)$. (a=abszorpció)

Kirchhoff törvénye: $e(\lambda)/a(\lambda)$ független az anyagtól és a hőmérséklettől.

$$\frac{e_1(\lambda)}{a_1(\lambda)} = \frac{e_2(\lambda)}{a_2(\lambda)} = \dots$$

Ha egy hullámhosszon a test jól lenyeli a sugárzást, akkor izzításakor azon a hullámhosszon erősen fog sugározni.

Elméleti bizonyítás: termodinamikával.



Gustav Robert Kirchhoff
(1824–1887)

A feketetest-sugárzás

Abszolút fekete test: $a_{fekete}(\lambda) = 1$

Fekete = Nem ver vissza semmit a beeső fényekből, de maga sugározhat!

A Kirchhoff-törvény miatt:

$$\frac{e_1(\lambda)}{a_1(\lambda)} = \frac{e_2(\lambda)}{a_2(\lambda)} = \dots = \frac{e_{fekete}(\lambda)}{1} = e_{fekete}(\lambda)$$

$\Rightarrow e_{fekete}(\lambda)$ ismert, akkor $a_1(\lambda)$ megmérésével $e_1(\lambda)$ is kiszámolható.

A feketetest-sugárzás

Abszolút fekete test: $a_{fekete}(\lambda) = 1$

Fekete = Nem ver vissza semmit a beeső fényekből, de maga sugározhat!

A Kirchoff-törvény miatt:

$$\frac{e_1(\lambda)}{a_1(\lambda)} = \frac{e_2(\lambda)}{a_2(\lambda)} = \dots = \frac{e_{fekete}(\lambda)}{1} = e_{fekete}(\lambda)$$

$\Rightarrow e_{fekete}(\lambda)$ ismert, akkor $a_1(\lambda)$ megmérésével $e_1(\lambda)$ is kiszámolható.

Ezért tanulmányozták kiemelten a feketetest-sugárzást a 19. században.

A feketetest-sugárzás: kísérleti eszköz

Hogyan állítsunk elő tökéletesen fekete testet?

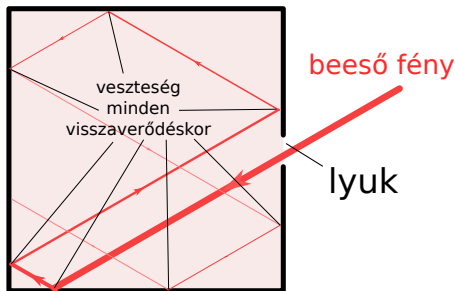
- Fessük feketére! Korlátos pontosság: $a \approx 0,9$.
- Kormozzuk be! Kicsit jobb: $a \approx 0,95$.
- Vizsgáljuk egy **üreg sugárzását**: $a \approx 0,99999$.

A feketetest-sugárzás: kísérleti eszköz

Hogyan állítsunk elő tökéletesen fekete testet?

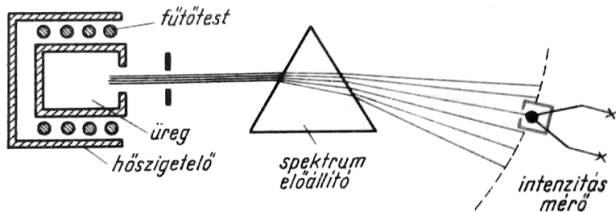
- Fessük feketére! Korlátos pontosság: $a \approx 0,9$.
- Kormozzuk be! Kicsit jobb: $a \approx 0,95$.
- Vizsgáljuk egy **üreg sugárzását**: $a \approx 0,99999$.

Miért fekete egy üreg nyílása? Mert benne **sokszor verődik ide-oda a fény, mielőtt ki tud jönni.**



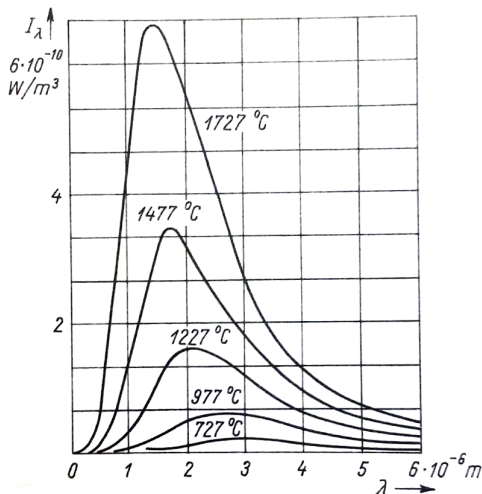
A feketetest-sugárzás: kísérleti eredmények

19. szd: Sok mérés 600–2000 K közt.
Sugárzás nagyrészt az infravörös tartományban.



Görbe alatti terület: arányos a kisugárzott össz teljesítménnyel. (P)

Görbék maximuma: λ_m -nél.



A feketetest-sugárzás: tapasztalati törvények

Az előző mérésekre alapozva:

Stefan-Boltzmann törvény:

Egy A felületű, T hőmérsékletű abszolút fekete test össz kisugárzott teljesítménye:

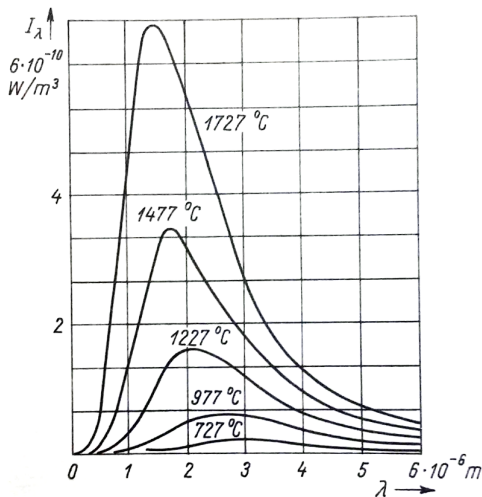
$$P = \sigma AT^4,$$

ahol $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$, a Stefan-Boltzmann állandó.

Wien-féle eltolódási törvény:

Ha a feketetest sugárzási maximumának hullámhossza λ_m , akkor

$$\lambda_m T = \text{állandó}$$



A feketetest-sugárzás: a magyarázat keresése

Magyarázat keresése: **termodinamikai és statisztikus fizikai módszerek.**
(Mivel ezt nem tanultuk, ezért a könyvbeli stat.fiz. levezetések nem kell érteni.)

Alapgondolatok:

- Az üregbe bezárt elektromágneses tér hasonlóan írható le, mint az edénybe zárt gázok.
- A hullámhossz-szerinti eloszlás görbéje hasonló jellegű, mint a gáZRészecskék energiaeloszlása a tartályban.

Úgy tűnt, nem lesz gond a magyarázat.

A feketetest-sugárzás: a magyarázat keresése

Magyarázat keresése: **termodinamikai és statisztikus fizikai módszerek.**
(Mivel ezt nem tanultuk, ezért a könyvbeli stat.fiz. levezetések nem kell érteni.)

Alapgondolatok:

- Az üregbe bezárt elektromágneses tér hasonlóan írható le, mint az edénybe zárt gázok.
- A hullámhossz-szerinti eloszlás görbéje hasonló jellegű, mint a gáZRészecskék energiaeloszlása a tartályban.

Úgy tűnt, nem lesz gond a magyarázat.

Probléma: **Mindegyik elméleti modell csak rész-sikereket hozott.**
Egyik csak a magas, másik csak az alacsony frekvenciákra volt jó közelítés.

A feketetest-sugárzás: a magyarázat nehézségei

Alapvető probléma: nem ismerték az atomok belső szerkezetét, nem tudhatták, hogyan hatnak kölcsön a fénnel.

A feketetest-sugárzás: a magyarázat nehézségei

Alapvető probléma: nem ismerték az atomok belső szerkezetét, nem tudhatták, hogyan hatnak kölcsön a fénnel.

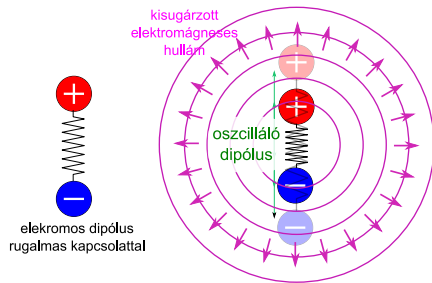
Egyszerű modell: töltött részecskékből álló oszcillátor.

Maxwell és Hertz munkássága nyomán ezt le tudták írni:

Emisszió: rezgő töltés \Rightarrow változó elektromos tér \Rightarrow változó mágneses tér \Rightarrow elektromágneses sugárzás.

Abszorpció: bejövő e.m. sugárzás \Rightarrow gerjesztett rezgés az oszcillátoron \Rightarrow az energia egy részének elnyelése.

Newtoni mechanika + Maxwell-egyenletek: elméleti leírás.



A feketetest-sugárzás: Max Planck modellje



Max Planck (1858–1947)

Modell: **Az üreg fala egyszerű „oszcillátorokból” áll.**

(Az atomok szerkezetét nem ismerték, de tudták, hogy $e_{fekete}(\lambda)$ úgyis anyagfüggetlen.)

A feketetest-sugárzás: Max Planck modellje



Max Planck (1858–1947)

Modell: **Az üreg fala egyszerű „oszcillátorokból” áll.**

(Az atomok szerkezetét nem ismerték, de tudták, hogy $e_{fekete}(\lambda)$ úgyis anyagfüggetlen.)

Planck: termodinamikai modell az oszcillátor-sugárzás kölcsönhatásra.

Fura eredmény: **Megmagyarázhatók a kísérleti eredmények, ha feltesszük, hogy az oszcillátorok energiája csak darabokban, kvantumokban változhat meg.**

Az oszcillátor-energia darabos változása nélkül nem jöttek ki a mérési eredmények!

A feketetest-sugárzás: az energia kvantáltsága

Planck kiszámolta: az energia-darabok (energia-kvantumok) értéke:

$$E = hf$$

ahol $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ Js, f a frekvencia.

A feketetest-sugárzás: az energia kvantáltsága

Planck kiszámolta: az energia-darabok (energia-kvantumok) értéke:

$$E = hf$$

ahol $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ Js, f a frekvencia.

Mit is jelent ez?

Planck modellje: valami okból a sugárzást gerjesztő oszcillátorok energiája „darabokban” változhat csak meg.

Nem következett ebből, hogy maga a sugárzási tér is darabos!

A feketetest-sugárzás: az energia kvantáltsága

Planck kiszámolta: az energia-darabok (energia-kvantumok) értéke:

$$E = hf$$

ahol $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ Js, f a frekvencia.

Mit is jelent ez?

Planck modellje: valami okból a sugárzást gerjesztő oszcillátorok energiája „darabokban” változhat csak meg.

Nem következett ebből, hogy maga a sugárzási tér is darabos!

Planck leírása sikeres: $e_{fekete}(\lambda)$, Wien-féle eltolódási törvény, Stefan-Boltzmann-törvény megmagyarázása.

Elnevezés: $e_{fekete}(\lambda)$: Planck-görbe, h : Planck-állandó.

A feketetest-sugárzás: az energia kvantáltsága

Planck kiszámolta: az energia-darabok (energia-kvantumok) értéke:

$$E = hf$$

ahol $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ Js, f a frekvencia.

Mit is jelent ez?

Planck modellje: valami okból a sugárzást gerjesztő oszcillátorok energiája „darabokban” változhat csak meg.

Nem következett ebből, hogy maga a sugárzási tér is darabos!

Planck leírása sikeres: $e_{fekete}(\lambda)$, Wien-féle eltolódási törvény, Stefan-Boltzmann-törvény megmagyarázása.

Elnevezés: $e_{fekete}(\lambda)$: Planck-görbe, h : Planck-állandó.

De mi is a kvantálás magyarázata? Planck se tudta...

Fontosságát érezte, de még nem látta világosan a jelentését.

A fotoeffektus

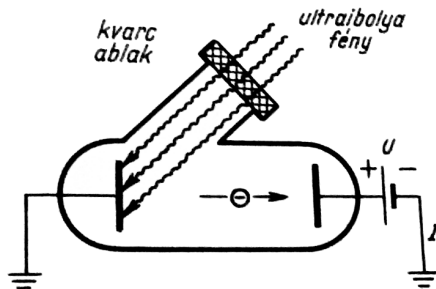
A jelenséget a 19. században fedezik fel: **fény hatására bizonyos körülmények közt elektronok lépnek ki a fémekből.**

Kísérleti eszköz: vákuumcsőben

- a negatív pólusra kötni a fémot,
- a pozitívra egy nagy felületű elektródát,
- mérni a generált gyenge áramot.

Változtatjuk: bejövő fény hullámhossza (λ), teljesítménye (P).

Mérjük: lezárási feszültség (U_{max}), áramerősség (I).



A fotoeffektus

A jelenséget a 19. században fedezik fel: **fény hatására bizonyos körülmények közt elektronok lépnek ki a fémekből.**

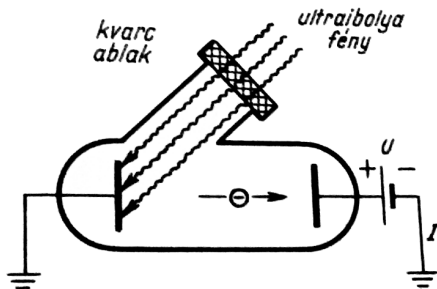
Kísérleti eszköz: vákuumcsőben

- a negatív pólusra kötni a fémeket,
- a pozitívra egy nagy felületű elektródát,
- mérni a generált gyenge áramot.

Változtatjuk: bejövő fény hullámhossza (λ), teljesítménye (P).

Mérjük: lezárási feszültség (U_{max}), áramerősség (I).

Számoljuk: U_{max} -ból az elektronok sebességét (v), I -ből az elektronok darabszámát időegységenként (N).



A fotoeffektus

Klasszikus fizikai leírás: A bejövő elektromágneses hullám energiát közöl a fémbeli elektronokkal és ha elegendő összegyűlik, akkor egy elektron kirepül.

Mérések és elmélet ellentmondása:

Klasszikus fizika szerint

P nő (λ állandó) $\Rightarrow \nu$ nő

λ nő (P állandó) \Rightarrow nincs változás

$\lambda > \lambda_0 \Rightarrow$ semmi különös

Kilépés ideje: másodperc nagyságrend.

Mérések

P nő (λ állandó) $\Rightarrow \nu$ állandó, N nő

λ nő (P állandó) $\Rightarrow \nu$ csökken

$\lambda > \lambda_0 \Rightarrow N = 0$

Kilépés ideje: kimérhetetlenül kicsi.

Nincs klasszikus fizikai magyarázat!

A fotoeffektus magyarázata

Albert Einstein, 1905: **A fény elnyelése $E = hf$ darabokban történik!**

Mivel $f = c/\lambda$, ezért $E = hc/\lambda$, azaz a kisebb hullámhossz nagyobb energiát jelent.

Az elektronok nem „gyűjtögetik” az energiát a bejövő hullámtól, hanem **vagy kapnak $E = hc/\lambda$ energiát vagy sem.**

$$E = \frac{hc}{\lambda} = E_{ki} + E_{mozg}$$

E_{ki} : elektron fémből való kiszakításához szükséges energia.

E_{mozg} : elektron mozgási energiája.

A fotoeffektus magyarázata

Albert Einstein, 1905: **A fény elnyelése $E = hf$ darabokban történik!**

Mivel $f = c/\lambda$, ezért $E = hc/\lambda$, azaz a kisebb hullámhossz nagyobb energiát jelent.

Az elektronok nem „gyűjtögetik” az energiát a bejövő hullámtól, hanem **vagy kapnak $E = hc/\lambda$ energiát vagy sem.**

$$E = \frac{hc}{\lambda} = E_{ki} + E_{mozg}$$

E_{ki} : elektron fémből való kiszakításához szükséges energia.

E_{mozg} : elektron mozgási energiája.

Az ebből számolható ν , N megegyezett a mérésekkel!

⇒ **Einstein szerint a fény elnyelődése is kvantumosan történik.**

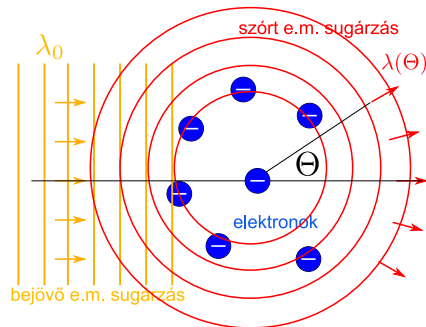
Elnevezés: **foton: a fény részecskéje.**

Einstein: 1 foton 1 elektronnal lép kapcsolatba a fotoeffektus során.

A fotonok paraméterei

Compton-effektus: ha röntgen-sugarak szóródnak elektronokon, csökken a frekvenciájuk.

$$\lambda(\Theta) - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \Theta)$$



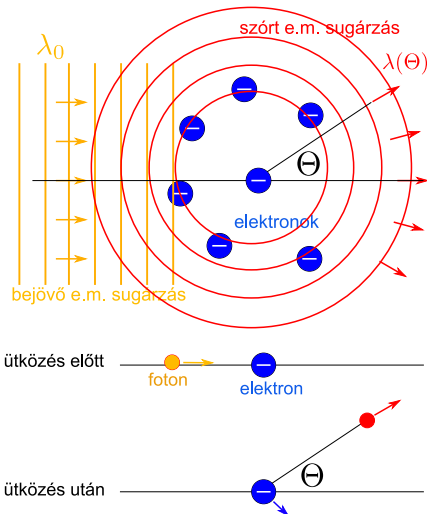
A fotonok paraméterei

Compton-effektus: ha röntgen-sugarak szóródnak elektronokon, csökken a frekvenciájuk.

$$\lambda(\Theta) - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \Theta)$$

Elméleti magyarázat: a fény olyan darabokból áll, mely az elektronokkal golyóként ütközik és

- energiája $E = hf = hc/\lambda$
- lendülete $p = h/\lambda$
- tömege $m = E/c^2 = hc^2 f = h/(\lambda c)$



A fotonok paraméterei

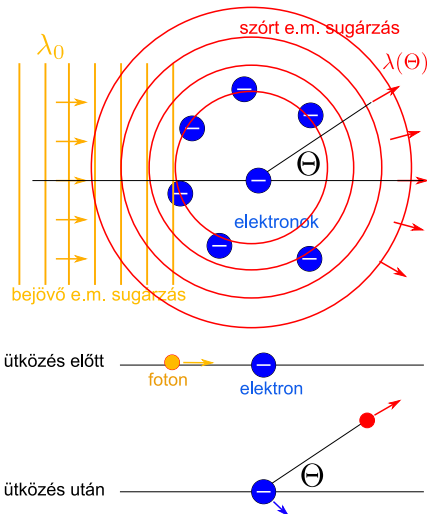
Compton-effektus: ha röntgen-sugarak szóródnak elektronokon, csökken a frekvenciájuk.

$$\lambda(\Theta) - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \Theta)$$

Elméleti magyarázat: a fény olyan darabokból áll, mely az elektronokkal golyóként ütközik és

- energiája $E = hf = hc/\lambda$
- lendülete $p = h/\lambda$
- tömege $m = E/c^2 = hc^2 f = h/(\lambda c)$

Több más mérés is vezetett hasonló eredményre.

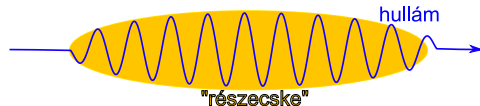


A túsugar-elmélet

Hogy lehet a fény egyszerre hullám és részecske is?

Einstein ötlete: A fény kis, rezgő vonalakból,
„túsugarakból” áll.

A fotonok az egyes túsugarak, hullámzásukból
adódik a fény hullámtermészete.



A tűsugar-elmélet

Hogy lehet a fény egyszerre hullám és részecske is?

Einstein ötlete: A fény kis, rezgő vonalakból, „tűsugarakból” áll.

A fotonok az egyes tűsugarak, hullámmozgásukból adódik a fény hullámtermészete.



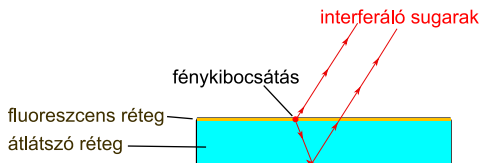
Kísérleti cáfolat: Selényi Pál (1884–1954)

Nagy szögben kiinduló két fénysugar is képes interferálni!

Ez a tűsugar-elméletben nem lehetséges, mert a távoli szögben induló tűsugarak közt van véletlenszerű fázisugrás.

Több, hasonló elképzelés: mind ellentmond bizonyos kísérleteknek.

Nem hozható össze a fény részecske és hullámtermészete a klasszikus fizika kis módosításaival.



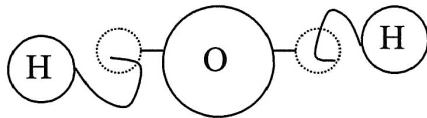
Az atomok vizsgálatának kezdetei

18. szd. vége: Sejtik, hogy van legkisebb építőkö:
atom.

Közvetett bizonyíték: Vegyületképzés szabályai.

Modell: az atomokon horgok és lyukacsok
vannak, ezek alakja határozza meg a lehetséges
kapcsolatokat, vegyületeket.

Mechanikai magyarázat keresése az anyag szerkezetére.



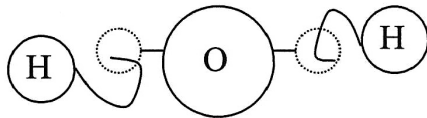
Az atomok vizsgálatának kezdetei

18. szd. vége: Sejtik, hogy van legkisebb építőkö:
atom.

Közvetett bizonyíték: Vegyületképzés szabályai.

Modell: az atomokon horgok és lyukacsok
vannak, ezek alakja határozza meg a lehetséges
kapcsolatokat, vegyületeket.

Mechanikai magyarázat keresése az anyag szerkezetére.



19. szd. vége: *újabb közvetett bizonyítékok.*

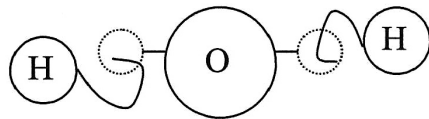
- Statisztikus fizika: magyarázat a gázok viselkedésére, diffúzióra (szagok terjedése).
- Vákuumcsöves kísérletek: elektronok gyorsítása, eltérítése; ionok felfedezése.

Az atomok vizsgálatának kezdetei

18. szd. vége: Sejtik, hogy van legkisebb építőkö:
atom.

Közvetett bizonyíték: Vegyületképzés szabályai.

Modell: az atomokon horgok és lyukacsok
vannak, ezek alakja határozza meg a lehetséges
kapcsolatokat, vegyületeket.



Mechanikai magyarázat keresése az anyag szerkezetére.

19. szd. vége: *újabb közvetett bizonyítékok.*

- Statisztikus fizika: magyarázat a gázok viselkedésére, diffúzióra (szagok terjedése).
- Vákuumcsöves kísérletek: elektronok gyorsítása, eltérítése; ionok felfedezése.

Méret: 10^{-10} m nagyságrendű.

Ez sokkal kisebb, mint a fény hullámhossza, ezért **nem lehet őket mikroszkóppal látni.**

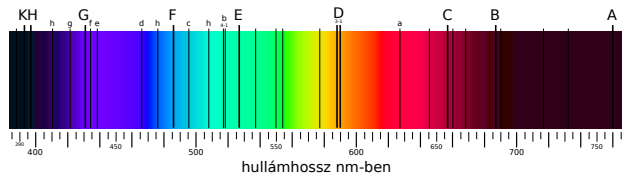
Az atomok színeképe

A szilárd testek színeképét a feketetest-sugárzással lehet leírni.
Hogyan sugároznak az önálló atomok?

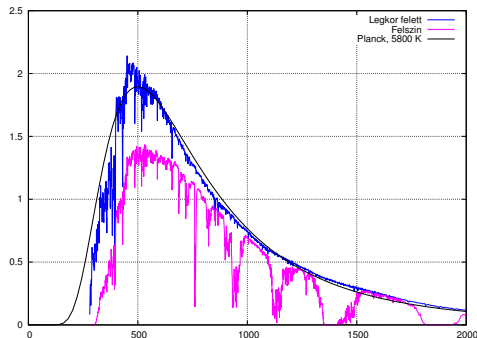
Az atomok színe

A szilárd testek színeképét a feketetest-sugárzással lehet leírni.
Hogyan sugároznak az önálló atomok?

Joseph von Fraunhofer, 1814: Nap színeképének tanulmányozása



Sok száz sötét vonal leírása.
Ok: ismeretlen.



Nap színeképe: közel feketetest-színkép, amiből hiányoznak bizonyos hullámhosszak.

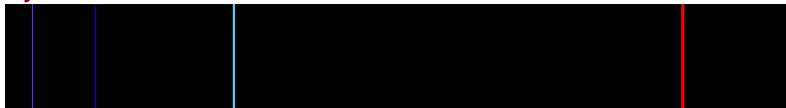
Az atomok színeképe

AFKT 4.6.5

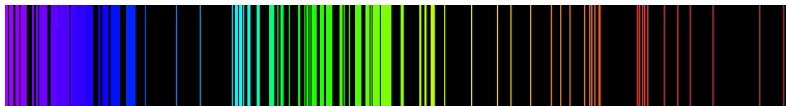
Robert W. Bunsen és Gustav R. Kirchhoff, 1850-es évek:

Izzított gázok színeképe: fényes vonalak.

Hidrogén:



Vas:



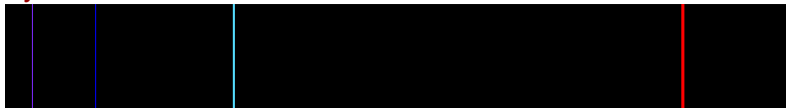
Az atomok színeke

AFKT 4.6.5

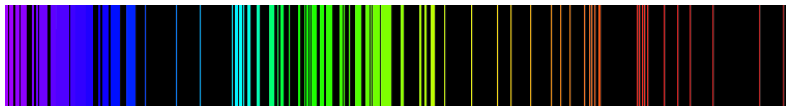
Robert W. Bunsen és Gustav R. Kirchhoff, 1850-es évek:

Izzított gázok színeke: fényes vonalak.

Hidrogén:



Vas:



Minden kémiai elem rá jellemző spektrumú \Rightarrow színekepből kémiai összetétel mérhető.

Kémiai, kohászati, csillagászati alkalmazások.

De miért vonalas az atomok színeke?

Valószínűleg ez elárul valamit a szerkezetükről.

Az atomok színeképe: első elméletek

Legegyszerűbb atom: hidrogén.

(Legkönnyebb atom: felvetik, hogy hidrogénből állítható össze a többi atom is.)

1800-as évek vége: **a H-atom színeképe több sorozatra bontható, melyek egyszerű formulával felírhatók.**

⇒ Valami egyszerű magyarázat kell legyen a háttérben...

Az atomok színe: első elméletek

Legegyszerűbb atom: hidrogén.

(Legkönnyebb atom: felvetik, hogy hidrogénből állítható össze a többi atom is.)

1800-as évek vége: **a H-atom színe több sorozatra bontható, melyek egyszerű formulával felírhatók.**

⇒ Valami egyszerű magyarázat kell legyen a háttérben...

Thomson-féle atommodell (1904) („mazsolás puding modell”)

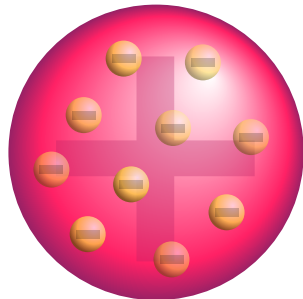
Az atomot kitölti egy pozitív töltésű „massza” és a negatív elektronok ebben „úszkálnak”.

Alapállapot: elektronok a legkisebb energiájú állapotban.

Fény kibocsátás és elnyelés: elektronok rezgésével.

(A Plancknál is említett elektromos oszcillátor.)

Nem sikerül levezetni a H-atom színekét sem!



Az atommag felfedezése

Ernst Rutherford, 1911: kísérlet: az atomon belül a pozitív töltés egy 10^{-15} m méretű helyre van koncentrálna! (részletek később a magfizika történetében)

Az atommag felfedezése

Ernst Rutherford, 1911: **kísérlet: az atomon belül a pozitív töltés egy 10^{-15} m méretű helyre van koncentrálna!**
(részletek később a magfizika történetében)

Planetáris atommodell: az elektronok úgy keringenek a mag körül, mint a bolygók a Nap körül.

Probléma: a keringő elektron sugároz, de ...

- a sugárzás színekepe folytonos
- nagy az energiaveszteség: 10^{-8} s körüli idő alatt a magba zuhannának

Rutherford egyből látja, hogy az elmélet így nem jó: ki kell egészíteni!

Érdekesség: bár hamar kiderült, hogy az elmélet rossz, az atomot azóta is eszerint a modell szerint rajzoljuk le.



Az atom Bohr-féle modellje

AFKT 5.3.5.

Bohr-modell, 1913.

Planck, Einstein: Klasszikus fizika + „darabosság” megoldani látszott a fény természetét.

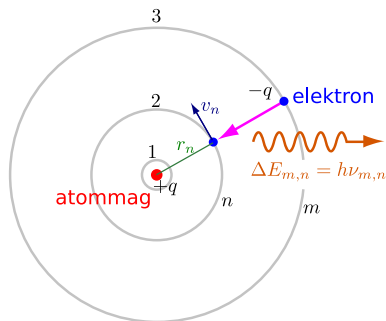
Bohr: **Adjunk a planetáris atommodellhez plusz feltételeket.**

1. Az elektron bizonyos stabil pályákon úgy keringhet, hogy közben nem sugároz.
2. A stabil pályákon a perdület egész számú többszöröse $h/(2\pi)$ -nek.
3. Két stabil pálya közti átmenetben az energiakülönbséget foton formájában kisugározza vagy elnyeli az atom.



Niels Bohr (1885–1962)

Az atom Bohr-féle modellje



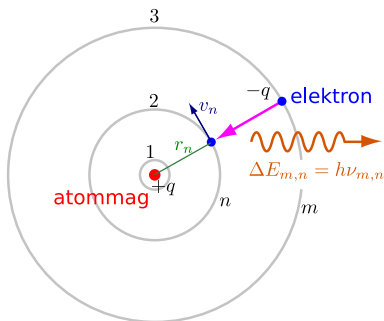
Megengedett pályák: $mv_nr_n = n \cdot \frac{h}{2\pi}$, (n : poz. egész)

Newton II.+Coloumb-tv.: $m \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r_n^2}$

Foton energia m -ről n . szintre ugráskor:

$$E_{\text{foton}} = E_m - E_n = h\nu_{m,n}, \quad (\nu: \text{frekvencia})$$

Az atom Bohr-féle modellje



Megengedett pályák: $mv_n r_n = n \cdot \frac{h}{2\pi}$, (n : poz. egész)

Newton II.+Coloumb-tv.: $m \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r_n^2}$

Foton energia m -ről n . szintre ugráskor:

$$E_{foton} = E_m - E_n = h\nu_{m,n}, \quad (\nu: \text{frekvencia})$$

- **Siker:** $E_n = -E_0/n^2$, E_0 kifejezése az egyéb állandókkal
 \Rightarrow H-atom színeképének pontos leírása.
- **Kudarac:** többelektronos atomok leírása nem sikerül.
- **Nyitott kérdés:** mi is az eredete a Bohr-féle kvantumfeltételeknek?

A Heisenberg-féle mátrix-mechanika (1925)



Werner Heisenberg (1901–1976)

Kiindulás: az atomokról szerezhető információk nagy része frekvencia-adatokat (színképvonal) jelentett akkoriban.

A frekvenciák 2 dimenziós táblázatba, mátrixba rendezhetők:
Pl. a H-atom esetén: $\nu_{n,m} = E_0/h(1/m^2 - 1/n^2)$.

A Heisenberg-féle mátrix-mechanika (1925)



Werner Heisenberg (1901–1976)

Kiindulás: az atomokról szerezhető információk nagy része frekvencia-adatokat (színképvonal) jelentett akkoriban.

A frekvenciák 2 dimenziós táblázatba, mátrixba rendezhetők:
Pl. a H-atom esetén: $\nu_{n,m} = E_0/h(1/m^2 - 1/n^2)$.

Heisenberg: adjuk fel a szemléletességet!

Leírható az elektron állapota és lendülete is mátrixokkal?

$$\text{Állapot: } X = \begin{bmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & X_{1,3} & \cdots \\ X_{2,1} & X_{2,2} & X_{2,3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\text{Lendület: } (XP)_{j,k} = \sum_{l=0}^{\infty} P_{j,l} X_{l,k}$$

$$\text{„Mozgásegyenlet:” } X_{j,k}(t) = e^{2\pi i(E_j - E_k)t/h} X_{j,k}(0)$$

...

A Heisenberg-féle mátrix-mechanika (1925)



Werner Heisenberg (1901–1976)

Kiindulás: az atomokról szerezhető információk nagy része frekvencia-adatokat (színkép vonal) jelentett akkoriban.

A frekvenciák 2 dimenziós táblázatba, mátrixba rendezhetők:
Pl. a H-atom esetén: $\nu_{n,m} = E_0/h(1/m^2 - 1/n^2)$.

Heisenberg: adjuk fel a szemléletességet!

Leírható az elektron állapota és lendülete is mátrixokkal?

$$\text{Állapot: } X = \begin{bmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & X_{1,3} & \cdots \\ X_{2,1} & X_{2,2} & X_{2,3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\text{Lendület: } (XP)_{j,k} = \sum_{l=0}^{\infty} P_{j,l} X_{l,k}$$

$$\text{„Mozgásegyenlet:” } X_{j,k}(t) = e^{2\pi i(E_j - E_k)t/h} X_{j,k}(0)$$

...

Ő is levezeti a H-atom színképét! (és pár más esetet is kiszámol)

A Heisenberg-féle mátrix-mechanika

Heisenberg alapelve: **Mivel maguk az elemi részek nem észlelhetők, a kiadott frekvenciák viszont igen, ezért ha ezek közt matematikai modellt találunk, az tökéletes leírás.**

Hivatkozik arra is, hogy hasonló elvek alapján mondjuk azt, hogy nincs éter.
Heisenberg szerint a fizika nem tud jobbat mondani a mátrix-mechanikánál.

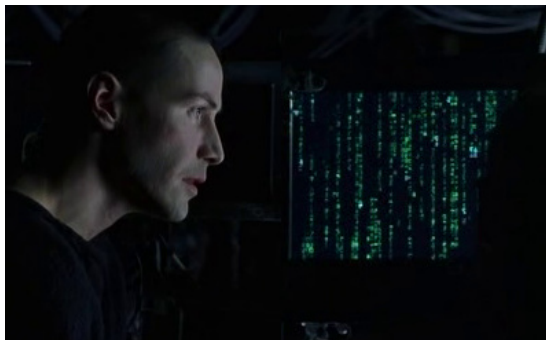
A Heisenberg-féle mátrix-mechanika

Heisenberg alapelve: **Mivel maguk az elemi részek nem észlelhetők, a kiadott frekvenciák viszont igen, ezért ha ezek közt matematikai modellt találunk, az tökéletes leírás.**

Hivatkozik arra is, hogy hasonló elvek alapján mondjuk azt, hogy nincs éter. Heisenberg szerint a fizika nem tud jobbat mondani a mátrix-mechanikánál.

Heisenberg elméletének fogadtatása:

- Kevesen követik a matematikai részleteit.
- A többség elutasítja a szemléletesség teljes feladását. (Pl. Einstein is.)
- A gondolat, hogy a valóság mögött valami absztrakt matematikai objektumok állnak, megmarad.



A Heisenberg-féle mátrix-mechanika

A fizikai elméletek próbaköve: jósol-e meg valamit, amit más elmélet nem jósolt meg és igaznak bizonyul?

- A H-nál bonyolultabb atomokra nem sikerül végigszámolni.
- **Heisenberg-féle határozatlanság:** A hely és a lendület nem határozható meg egyszerre pontosan.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Fura következtetés, de később igazolják!

A Heisenberg-féle mátrix-mechanika

A fizikai elméletek próbaköve: jósol-e meg valamit, amit más elmélet nem jósolt meg és igaznak bizonyul?

- A H-nál bonyolultabb atomokra nem sikerül végigszámolni.
- **Heisenberg-féle határozatlanság:** A hely és a lendület nem határozható meg egyszerre pontosan.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Fura következtetés, de később igazolják!

A szemléletesség hiánya miatt az elmélet nem népszerű, de megmutatja, hogy:

- Atomi szinten **gyökeresen új törvények kellenek:** nem elég a newtoni mechanikát toldozni-foldozni.
- **A természet korlátokat állít a megismerhetőség elé.**

(Később meglátjuk, hogy megtalálják a mátrix-tagok jelentését.)

Kapcsolat a Bohr-modellel

Rendezzük át a Bohr-féle feltételt:

$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad 2\pi r_n = n \frac{h}{mv_n}$$

Kapcsolat a Bohr-modellel

Rendezzük át a Bohr-féle feltételt:

$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow 2\pi r_n = n \frac{h}{mv_n}$$

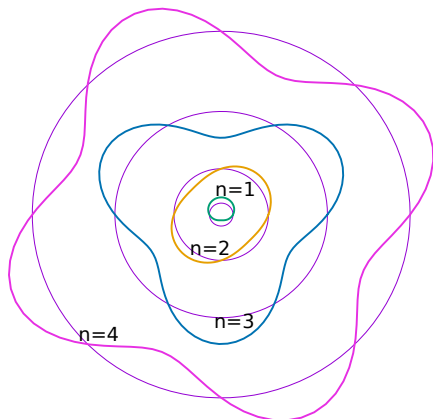
$$\Rightarrow \text{kerület} = n \cdot \lambda$$

Szemléletes jelentés:

A Bohr-féle stabil pályák kerületébe egész számúszor fér bele a de Broglie-hullámhossz.

Következtetés:

- A részecskéket (pl. az elektronokat) hullámként kell megpróbálni leírni.
- A stabil állapotoknak az állóhullámok felelnek meg.



elektron állóhullám-állapotai

A Schrödinger-féle hullámmechanika



Erwin Schrödinger
(1878–1961)

Schrödinger kiindulása:

- A de Broglie-hipotézis igazolva lett.
- Az atomban diszkrét energiaszintek vannak, amik állóhullámhoz hasonlóan viselkednek.
- A hullámoptika nagy méretű tárgyak esetén fénysugarak optikájával közelíthető.

Lehet, hogy a newtoni mechanika csak egy mikroszkopikus hullámmechanika közelítése nagy méretekben?

1926: hullám-mechanika alapegyenletei.

A Schrödinger-féle hullámmechanika

Schrödinger kiindulása:

- A de Broglie-hipotézis igazolva lett.
- Az atomban diszkrét energiaszintek vannak, amik állóhullámhoz hasonlóan viselkednek.
- A hullámoptika nagy méretű tárgyak esetén fénysugarak optikájával közelíthető.

Lehet, hogy a newtoni mechanika csak egy mikroszkopikus hullámmechanika közelítése nagy méretekben?

1926: hullám-mechanika alapegyenletei.

Megjegyzés: a „hullám-mechanika” itt az anyag mikroszkopikus viselkedésének hullám-alapú megoldását takarja, nem a klasszikus hullám-elméleteket!

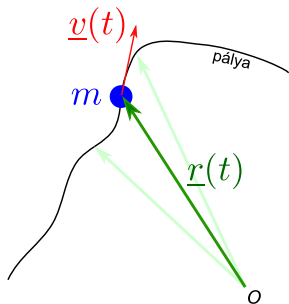


Erwin Schrödinger
(1878–1961)

A klasszikus mechanika mozgástörvénye (ismétlés)

Egy részecske leírása:

- **mozgás:** $\underline{r}(t)$ hely-idő függvény
- **saját tulajdonság:** m tömeg
- **sebesség, gyorsulás:**
 $\underline{v}(t) = d\underline{r}/dt$, $\underline{a}(t) = d\underline{v}/dt$
- **lendület:** $\underline{p} = m \cdot d\underline{r}/dt$
- **mozgásegyenlet:**
 $\underline{F} = m\underline{a} = d\underline{p}/dt$



$$\underline{v}(t) = \frac{d\underline{r}}{dt} \quad \underline{a}(t) = \frac{d^2\underline{r}}{dt^2}$$

$$\underline{p} = m \cdot \underline{v}$$

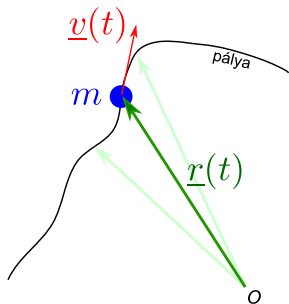
$$\begin{array}{ccc} \underline{r}(t_0) & \xrightarrow{\underline{F} = m \cdot \underline{a}} & \underline{r}(t) \\ \underline{v}(t_0) & \xrightarrow{\text{Newton-törvények}} & \underline{v}(t) \end{array}$$

Hely, lendület, stb.: pontos értékek minden időpontban.
Időbeli fejlődés: determinisztikus egyenletek.

A klasszikus mechanika mozgástörvénye (ismétlés)

Egy részecske leírása:

- **mozgás:** $\underline{r}(t)$ hely-idő függvény
- **saját tulajdonság:** m tömeg
- **sebesség, gyorsulás:**
 $\underline{v}(t) = d\underline{r}/dt$, $\underline{a}(t) = d\underline{v}/dt$
- **lendület:** $\underline{p} = m \cdot d\underline{r}/dt$
- **mozgásegyenlet:**
 $\underline{F} = m\underline{a} = d\underline{p}/dt$



$$\underline{v}(t) = \frac{d\underline{r}}{dt} \quad \underline{a}(t) = \frac{d^2\underline{r}}{dt^2}$$

$$\underline{p} = m \cdot \underline{v}$$

$$\begin{array}{ccc} \underline{r}(t_0) & \xrightarrow{\underline{F} = m \cdot \underline{a}} & \underline{r}(t) \\ \underline{v}(t_0) & \xrightarrow{\text{Newton-törvények}} & \underline{v}(t) \end{array}$$

Hely, lendület, stb.: pontos értékek minden időpontban.
Időbeli fejlődés: determinisztikus egyenletek.

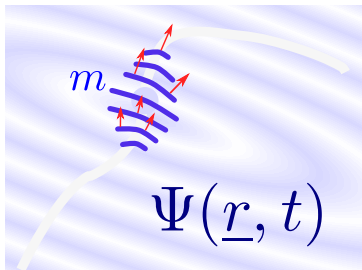
A relativitáselmélet szemlélete is hasonlóan determinisztikus.

A Schrödinger-féle hullámmechanika mozgástörvénye

Egy részecske leírása:

- **mozgás:** $\Psi(\underline{r}, t)$ hullámfüggvény
- **saját tulajdonság:** m tömeg
- **lendület:** $p_x = -i\hbar/(2\pi) \cdot \partial\Psi/\partial x$
- **mozgásegyenlet:** $\partial\Psi/\partial t = i2\pi/\hbar \cdot \hat{H}\Psi$ (Schrödinger-egyenlet)

\hat{H} : **Hamilton-operátor:** Ez írja le a rendszert, a klasszikus fizika hamiltoni tárgyalásából merítve az ötletet.



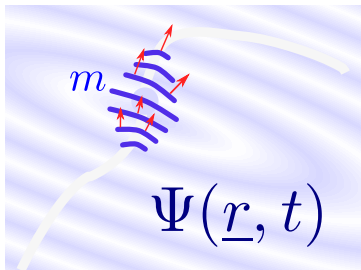
$|\Psi(\underline{r}, t)|^2$
megtalálási valószínűség

$\underline{v}(\underline{r}, t) = \frac{1}{m} \frac{d\Psi}{d\underline{r}}$
sebesség-eloszlás

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{2\pi i}{\hbar} \cdot \hat{H}\Psi$$

$\Psi(\underline{r}, t_0)$ Schrödinger-egyenlet $\Psi(\underline{r}, t)$

A Schrödinger-féle hullámmechanika fogalmai



$$|\Psi(\underline{r}, t)|^2$$

megtalálási valószínűség

$$\underline{v}(\underline{r}, t) = \frac{1}{m} \frac{d\Psi}{dr}$$

sebesség-eloszlás

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{2\pi i}{h} \cdot \hat{H} \Psi$$

$$\Psi(\underline{r}, t_0)$$

Schrödinger-egyenlet

$$\Psi(\underline{r}, t)$$

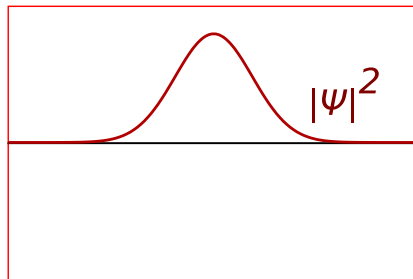
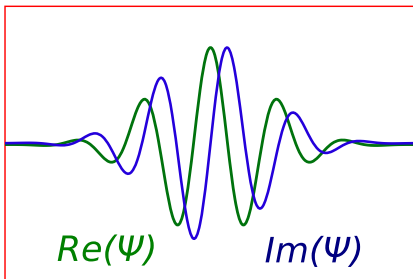
Fura, nem természetes sajátosságok: (részletekbe nem tudunk belemenni)

- Ψ értékei komplex számok
- a Schrödinger-egyenlet determinisztikus: $\Psi(\underline{r}, t_0)$ ismeretében egy későbbi időpontra $\Psi(\underline{r}, t)$ kiszámítható.
- amikor megmérjük a rendszer egy paraméterét, Ψ „összeomlik”, majd újra a Schrödinger-egyenlet szerint fejlődik tovább.

Példa hullámfüggvényre: hullámcsomag

Egyenes mentén mozgó részecske: Nincs határozott hely, kicsit el van kenődve.

$$\psi(\underline{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(\underline{r}-\underline{r}_0)^2/(2\sigma^2)} \cdot e^{-i\omega t} e^{ik\underline{r}}$$



Ha megmérjük a részecske helyét, bárhol lehet, de az esély $|\psi|^2$ -tel arányos.

A fizikai értékek bizonytalansága

A testeknek nincs helyük, csak megtalálási valószínűségük.

Megtalálási valószínűség egy kis térfogatban: $P = |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV$

A fizikai értékek bizonytalansága

A testeknek nincs helyük, csak megtalálási valószínűségük.

Megtalálási valószínűség egy kis térfogatban: $P = |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV$

A többi mennyiség értéke sem határozott. Pl. a lendület:

$$\underline{p} = -i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{r}}.$$

Ez is csak egy eloszlás: helyről helyre változik.

A fizikai értékek bizonytalansága

A testeknek nincs helyük, csak megtalálási valószínűségük.

Megtalálási valószínűség egy kis térfogatban: $P = |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV$

A többi mennyiség értéke sem határozott. Pl. a lendület:

$$\underline{p} = -i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{r}}.$$

Ez is csak egy eloszlás: helyről helyre változik.

A Heisenberg-féle határozatlansági relációk levezethetők a Schr-egyenletből!

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}, \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

(Δ : „bizonytalanság”. Pontosabban: a megengedett értékek szórása.)

Kvalitatív magyarázat: kis helyre beszorított Ψ -nek nagyok lesznek a deriváltjai.

(lendület \propto derivált)

A korrespondencia-elv

Nagy méretű testekre alkalmazva a kvantummechanika vissza kell, hogy adjon a klasszikus fizika eredményeit.

A korrespondencia-elv

Nagy méretű testekre alkalmazva a kvantummechanika vissza kell, hogy adjon a klasszikus fizika eredményeit.

Ez igaz a hullámmechanikára!

Schrödinger bebizonyítja: Ha a részecskére ható potenciális energia csak kicsit változik akkora térrészben, ahol $|\Psi|^2$ jelentős értékű, akkor visszakapjuk a Newton-törvényeket!

Ilyenkor a hullámcsomag közepe úgy mozog, ahogy azt az $\underline{F} = m \cdot \underline{a}$ leírja!

De ekkor is hullám! Ha kis dolgokkal találkozik, akkor ez megnyilvánul.

A korrespondencia-elv

Nagy méretű testekre alkalmazva a kvantummechanika vissza kell, hogy adjon a klasszikus fizika eredményeit.

Ez igaz a hullámmechanikára!

Schrödinger bebizonyítja: Ha a részecskére ható potenciális energia csak kicsit változik akkora térrészben, ahol $|\Psi|^2$ jelentős értékű, akkor visszkapjuk a Newton-törvényeket!

Ilyenkor a hullámcsomag közepe úgy mozog, ahogy azt az $\underline{F} = m \cdot \underline{a}$ leírja!

De ekkor is hullám! Ha kis dolgokkal találkozik, akkor ez megnyilvánul.

Példa:

- A katódsugárcsőben az elektron egy hullámcsomag, melynek méretei sokkal kisebbek a megtett távolságoknál.
- Kristályrácsra eső elektronnyalábnak „előjön a hullámtulajdonsága”, amikor a kristállyal hat kölcsön.

Néhány animáció

A következő videók jelölései:

- Ψ_1 és Ψ_2 : a hullámfüggvény valós és képzetes része
- V : potenciális energia. Ez írja le a környezet hatását. ($F = -dV/dx$)
- E : a részecske össz energiája

A mértékegységek át vannak skálázva normál számtartományba.

Néhány animáció

A következő videók jelölései:

- Ψ_1 és Ψ_2 : a hullámfüggvény valós és képzetes része
- V : potenciális energia. Ez írja le a környezet hatását. ($F = -dV/dx$)
- E : a részecske össz energiája

A mértékegységek át vannak skálázva normál számtartományba.

Részecske falak közt: $[\nu = 0, m = 1]$, $[\nu = 0, m = 25]$, $[\nu = 0.5, m = 1]$, $[\nu = 0.5, m = 25]$.
 Harmonikus rezgés: $[m = 1]$, $[m = 25]$.

A hullámmechanika fejlődése

Kiderült: a hullámmechanika keretein belül, de korrigálva a Schrödinger-egyenletet, sok fizikai hatás beépíthető.

Dirac-egyenlet (1928):

- Speciális relativitáselmélet beépítése.
- Elektromágneses terek figyelembe vétele.

Módszer: tiszta matematikai trükközés.

Eredmények:

- Ψ nem komplex, hanem 4 komponensű (kvaternió).
- Egyesíti a kvantum- és a speciális relativitáselméletet.
- Fura szimmetria-tulajdonságok \Rightarrow a részecskének lehet „anti-részecske” párja?

Az elektron anti-részecske párját 1932-ben meg is találják! (Pozitron.)



Paul Dirac (1902–1984)

A hullámmechanika sikerei

Minden furcsasága ellenére az elmélet sikeres.

- Megmagyarázza a „kettős természetet” az elektronok, de a fény esetén is.
- Jól adja meg a H és bonyolultabb atomok energia szintjeit.
- Megmagyarázza a periódusos rendszer szerkezetét.
- Megmagyarázza az atommag folyamatait, segít a nukleáris energetika megteremtésében.
-
- Mára a mikroprocesszorok, a Q-LED-es kijelzők, a kvantumszámítógépek tervezésében sikerrel használják.

A hullámmechanika sikerei

Minden furcsasága ellenére az elmélet sikeres.

- Megmagyarázza a „kettős természetet” az elektronok, de a fény esetén is.
- Jól adja meg a H és bonyolultabb atomok energia szintjeit.
- Megmagyarázza a periódusos rendszer szerkezetét.
- Megmagyarázza az atommag folyamatait, segít a nukleáris energetika megteremtésében.
-
- Mára a mikroprocesszorok, a Q-LED-es kijelzők, a kvantumszámítógépek tervezésében sikerrel használják.

A Schrödinger-egyenlet pontosított változatai eddig minden olyan esetben jól írták le a mérhető paramétereket, amikor sikerült őket megoldani.

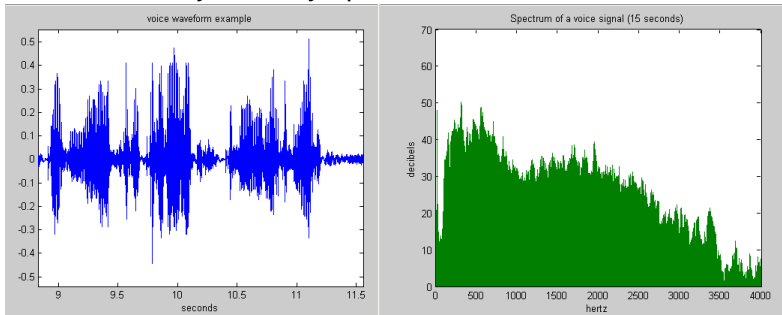
Ennek ellenére: a mai napig fennálló értelmezési nehézségek vannak!

Mátrix vagy hullám?

Neumann János és Marshall Stone: a mátrix-mechanika és a hullám-mechanika egyenértékű!

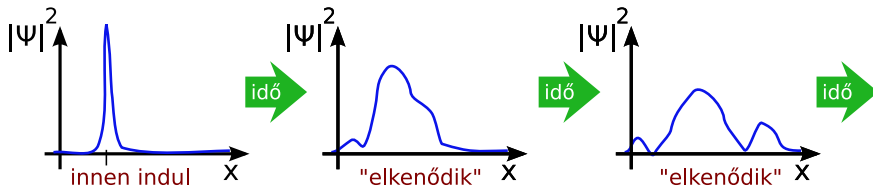
A mátrixok komponensei a hullámok különböző frekvenciájú részeinek súlyfaktorai.
Kicsit precízebben: a Heisenberg-mátrixokban a Schrödinger-féle hullámok Fourier-komponensei találhatók.

Hasonlat: zene és annak teljesítmény-spektruma:



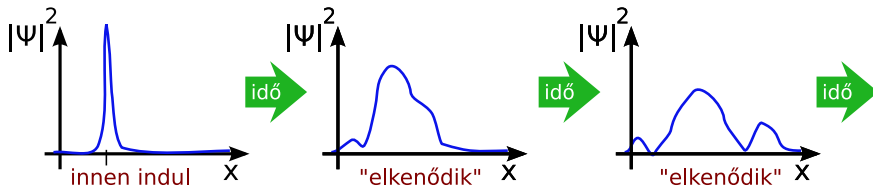
Állapotfüggvény-redukció

Fent csak megemlítettük, hogy mérésekkor Ψ hirtelen megváltozik: összeomlik.



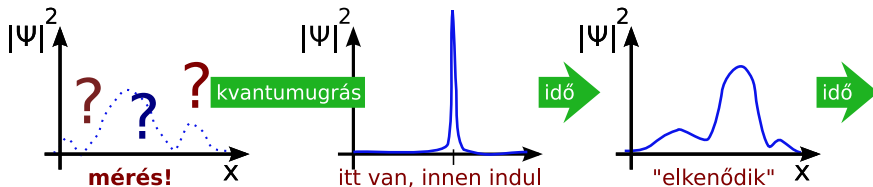
Állapotfüggvény-redukció

Fent csak megemlítettük, hogy mérésekkor Ψ hirtelen megváltozik: összeomlik.



Ha megmérjük a test helyét, ami értéket kapunk, oda „beugrik”.

Ψ fejlődése az új, határozott helyről fog folytatódni!

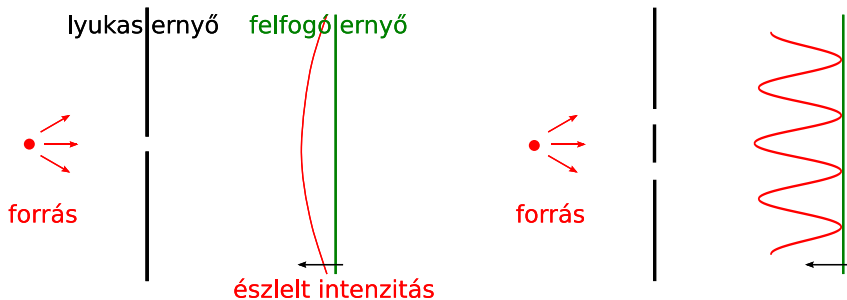


Ez a kvantummechanika máig legfurcsább, legérthetetlenebb része!

A kétrés-kísérlet

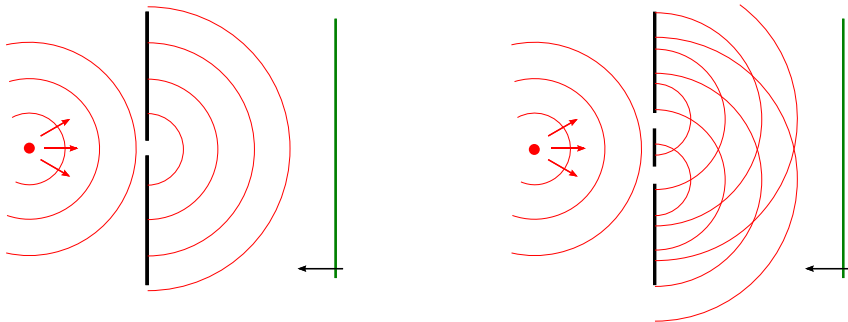
Klasszikus kísérlet, melyet **fénnyel 1801-ben** végzett el Young.
Hasonlót végzett el **elektronokkal 1925-27-ben** Davisson és Germer.

Jelenség:



A kétrés-kísérlet

Klasszikus kísérlet, melyet **fénnyel 1801-ben** végzett el Young.
Hasonlót végzett el **elektronokkal 1925-27-ben** Davisson és Germer.
Magyarázat:



A kétrés-kísérlet (folyt.)

Magyarázat: a fény és az elektronnyaláb is **hullámként viselkedik**.
A résen átjutó hullámok interferenciájával a jelenség pontosan leírható.

A kétrés-kísérlet (folyt.)

Magyarázat: a fény és az elektronnyaláb is **hullámként viselkedik**.
A résen átjutó hullámok interferenciájával a jelenség pontosan leírható.

Miért nem észlelhető ez az elektronoknál könnyen?

- kicsi hullámhossz
- azonos sebességű elektronok nyalábja kell (állandó λ)

(A fényt is sokáig a kis hullámhossza miatt hitték részecskének.)

A kétrés-kísérlet (folyt.)

Magyarázat: a fény és az elektronnyaláb is **hullámként viselkedik**.
A résen átjutó hullámok interferenciájával a jelenség pontosan leírható.

Miért nem észlelhető ez az elektronoknál könnyen?

- kicsi hullámhossz
- azonos sebességű elektronok nyalábja kell (állandó λ)

(A fényt is sokáig a kis hullámhossza miatt hitték részecskének.)

De Broglie hullámhossz: $\lambda = h/p = h/(mv)$, $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Js.
Hétköznapi tárgyakra ez kimérhetetlenül kicsi!

Nehéz kérdés: melyik résen ment át a foton (elektron)?

A fény és az elektron néha részecskeként viselkedik.

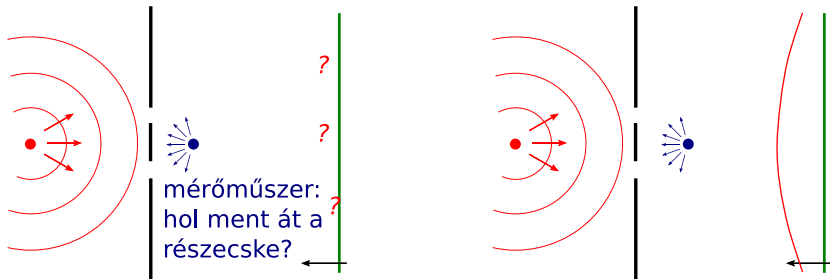
Kérdés: a kétrés-kísérletben **melyik résen megy át?**

Nehéz kérdés: melyik résen ment át a foton (elektron)?

A fény és az elektron néha részecskeként viselkedik.

Kérdés: a kétrés-kísérletben **melyik résen megy át?**

Kis mérőműszerrel figyeljük, hol haladt át:



Ha megfigyeljük, hol ment át, elvész a hullámtulajdonság! (Állapotfüggvény-redukció.)

Tanulság

Sok, hasonló kísérletet végeztek. (Pl. hogy egyszerre csak egy részecske legyen a rendszerben.) Az eredmény nem változik:

- zavarmentes környezetben minden (elektron, foton, atom, ...) hullámtulajdonságokat mutat
- a hullámtulajdonságok jól leírhatók Schrödinger egyenletével
- ha megfigyeljük a részecske helyzetét, azzal eltorzítjuk a hullámfüggvényt, és a hullámtulajdonságok megszűnnek (egy időre).

Probléma: Mi számít mérésnek?

Mi számít mérésnek? (Mikor történik állapot-redukció?) Mérés-e, ha:

- egy műszert működtetek, leolvasom és feljegyzem az értéket?
- a megfigyelő berendezést bekapcsolva hagyom, de eredményeit megnézés nélkül kidobom?
- csak véletlen arra jár egy kósza foton és kölcsönhat a kétréses hullámokkal?

Probléma: Mi számít mérésnek?

Mi számít mérésnek? (Mikor történik állapot-redukció?) Mérés-e, ha:

- egy műszert működtetek, leolvasom és feljegyzem az értéket?
- a megfigyelő berendezést bekapcsolva hagyom, de eredményeit megnézés nélkül kidobom?
- csak véletlen arra jár egy kósza foton és kölcsönhat a kétréses hullámokkal?

Úgy tűnik, az állapotfüggvény-redukció akkor működik, ha egy tudatos lény is szerepet játszik a folyamatban.

De mi az, hogy „tudatos lény” és miért számít a fizikában?!?!

A kérdéskör zavarba ejtő. Pl. Einstein sem tudta ezt elfogadni.

Azóta sincs megnyugtató válasz!



A „koppenhágai értelmezés”

Niels Bohr és társainak értelmezése: (durva vázlat)

- a természet olyan, amilyen: teljességében nem fogjuk megismerni soha
- a hullámfüggvény csak a mi agyunk terméke, egy eszköz, amivel megértjük a természetet bizonyos pontosságig
- az állapotfüggvény-redukció csak a mi agyunkban létezik
- a makroszkópikus tárgyakkal (tudatos lényekkel?) való kölcsönhatás befolyásolja a történéseket

Az értelmezés több helyen gyenge lábakon áll.

Mi dönt arról, hogy valami „tudatos” vagy „makroszkópikus”-e??

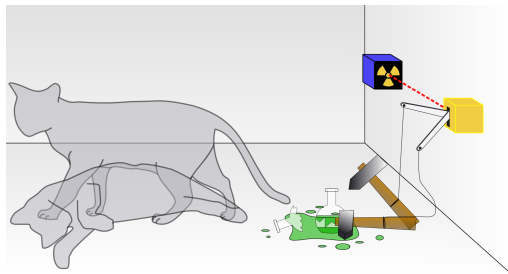
Zavarba ejtő tény: az értelmezési gondok ellenére, ha megoldjuk az egyenleteket, **pontos értékeket kapunk** a mikrovilág fizikájáról.

Schrödinger macskája

Nevezetes **gondolkísérlet**, 1935.

Adott egy szoba, benne:

- egy macska
- egy berendezés, mely ciángázt szabadít fel, ha egy adott radioaktív mag elbomlik
- esetleg egy emberi megfigyelő gázálarcban



A berendezés úgy van beállítva, hogy **1 óra alatt 50% eséllyel bekövetkezik a bomlás, a szerkezet felszabadítja a gázt és a macska elpusztul.**

A probléma gyökere: kvantumos rendszer (a bomló mag) egyszerre lehet „elbomlott” és „el nem bomlott” állapotban.

⇒ **A macska is egyszerre élő és holt, amíg nem figyelik meg, mi történt?**

Schrödinger macskája (folyt.)

A szobát lezárjuk. Várunk 1 órát. **A macska hullámfüggvénye élő vagy holt?**

Schrödinger macskája (folyt.)

A szobát lezárjuk. Várunk 1 órát. **A macska hullámfüggvénye élő vagy holt?**

Koppenhágai értelmezés:

Ha nem néztünk be (nincs mérés) a macska hullámfüggvénye **az élő és holt hullámfgv. keveréke**. Amikor benézünk, hirtelen „beugrik” egy állapotba és a macska elpusztul vagy él, de nem kevert állapotban lesz.

Schrödinger macskája (folyt.)

A szobát lezárjuk. Várunk 1 órát. **A macska hullámfüggvénye élő vagy holt?**

Koppenhágai értelmezés:

Ha nem néztünk be (nincs mérés) a macska hullámfüggvénye **az élő és holt hullámfgv. keveréke**. Amikor benézünk, hirtelen „beugrik” egy állapotba és a macska elpusztul vagy él, de nem kevert állapotban lesz.

Mi van, ha van benn egy megfigyelő, akivel nem tudok beszélni, ha zárva a szoba?
Számára a hullámfüggvény már korábban „bekattant”, nekem meg még nem??

Schrödinger macskája (folyt.)

A szobát lezárjuk. Várunk 1 órát. **A macska hullámfüggvénye élő vagy holt?**

Koppenhágai értelmezés:

Ha nem néztünk be (nincs mérés) a macska hullámfüggvénye **az élő és holt hullámfgv. keveréke**. Amikor benézünk, hirtelen „beugrik” egy állapotba és a macska elpusztul vagy él, de nem kevert állapotban lesz.

Mi van, ha van benn egy megfigyelő, akivel nem tudok beszélni, ha zárva a szoba?
Számára a hullámfüggvény már korábban „bekattant”, nekem meg még nem??

Mi van, ha van benn egy kamera, ami az időt és a macska képét rögzíti?
És ha a kamera felvételt megnézetlenül töröljük?

...

Az Everett-féle többvilág-elmélet: multiverzum

Hugh Everett (1930–1982)

Mérés = **a lehetséges alternatívák egyikéről** megtudjuk, hogy az az igaz.
(Pl. él vagy holt a macska.)

A többvilág-elmélet ötlete: a mérésekkor valójában mindegyik kimenetel egyszerre bekövetkezik, és így egymástól független „világok” keletkeznek, de a tudatos megfigyelő csak az egyiket észleli.

Pillanatokon belül univerzumok sokasága képződik: multiverzum.



Az Everett-féle többvilág-elmélet: multiverzum

Hugh Everett (1930–1982)

Mérés = **a lehetséges alternatívák egyikéről** megtudjuk, hogy az az igaz.
(Pl. él vagy holt a macska.)

A többvilág-elmélet ötlete: a mérésekkor valójában mindegyik kimenetel egyszerre bekövetkezik, és így egymástól független „világok” keletkeznek, de a tudatos megfigyelő csak az egyiket észleli.



Pillanatokon belül univerzumok sokasága képződik: multiverzum.

Igen furcsa értelmezés! De számszerűen helyes eredményeket ad.

(Sci-fi alapanyag! Lásd pl. Dűne, Kwisatz haderach képességei)

Schrödinger macskája: kifogyhatatlan fizikus mém forrás



Schrödinger macskája: tanulság

A kvantumoz rendszerek lehetnek **kevert állapotban**.

Mérés: kevert állapot megszűnik.

Sok mérés igazolta! (Nem macskák, hanem pl. elektronok esetében.)

Schrödinger macskája: tanulság

A kvantumos rendszerek lehetnek **kevert állapotban**.

Mérés: kevert állapot megszűnik.

Sok mérés igazolta! (Nem macskák, hanem pl. elektronok esetében.)

De mi számít mérésnek?

Miért nem látunk kevert állapotot makroszkopikus méretekben?

Azóta is az egyik legnagyobb nyitott kérdés.

Sok, félig-meddig sikeres próbálkozás történt.

Probléma: a tudatos és nem tudatos dolgokra más törvények vonatkoznák?

(Arisztotelész szelleme kísért...)

Még nagyobb probléma: nincs „nagy egyesítés”!

Hamar kiderült: **Az általános relativitáselmélet és a kvantummechanika külön-külön jól működik, de együtt nem alkalmazható!**

Még nagyobb probléma: nincs „nagy egyesítés”!

Hamar kiderült: **Az általános relativitáselmélet és a kvantummechanika külön-külön jól működik, de együtt nem alkalmazható!**

Egyik probléma közelítő leírása:

1. Egy kis térfogatelemet rövid ideig figyelünk meg \Rightarrow nagy lesz az energia-bizonytalansága.
2. Ez nagy tömegbizonytalanságot jelent ($E = mc^2$).
3. Minél kisebb méretet vizsgálunk, annál nagyobb „fodrozódás” a téridőben.
4. **Mindenütt miniatűr fekete lyukaknak kellene lenniük!**

Még nagyobb probléma: nincs „nagy egyesítés”!

Hamar kiderült: **Az általános relativitáselmélet és a kvantummechanika külön-külön jól működik, de együtt nem alkalmazható!**

Egyik probléma közelítő leírása:

1. Egy kis térfogatelemet rövid ideig figyelünk meg \Rightarrow nagy lesz az energia-bizonytalansága.
2. Ez nagy tömegbizonytalanságot jelent ($E = mc^2$).
3. Minél kisebb méretet vizsgálunk, annál nagyobb „fodrozódás” a téridőben.
4. **Mindenütt miniatűr fekete lyukaknak kellene lenniük!**

Hasonló problémák sora lép fel.

A kvantummechanikát és az általános relativitáselméletet magában foglaló „Nagy Egyesített Elmélet” azóta sem született meg!

(Pedig igen sokan, pl. Einstein is próbálkozott vele.)

Ennek ellenére, a maga körében a kvantummechanika sok-sok tizedesjegyre pontos!

A kvantummechanika értékelése: siker és kudarc

Siker

- az atomok leírása, energiaszintek számítása
- az anyag kémiai tulajdonságainak magyarázata
- antirészecskék leírása
- elektronmikroszkópok működése
- modern eszközök: processzorok, QLED-kijelzők, ...

Kudarc (?)

- nem tudjuk, pontosan mikor omlik össze a hullámfüggvény
- nem tudjuk, mi számít mérésnek a kvantummechanikában
- nem tudjuk összehozni az általános relativitáselmélettel
- sokakat zavar, hogy a véletlennek ilyen fontos szerepe van

A kvantummechanika értékelése: siker és kudarc

Siker

- az atomok leírása, energiaszintek számítása
- az anyag kémiai tulajdonságainak magyarázata
- antirészecskék leírása
- elektronmikroszkópok működése
- modern eszközök: processzorok, QLED-kijelzők, ...

Kudarc (?)

- nem tudjuk, pontosan mikor omlik össze a hullámfüggvény
- nem tudjuk, mi számít mérésnek a kvantummechanikában
- nem tudjuk összehozni az általános relativitáselmélettel
- sokakat zavar, hogy a véletlennek ilyen fontos szerepe van

A. Einstein véleménye: **A kvantummechanika kifejezetten impozáns. De egy belső hangocska nekem azt súgja, hogy még nem az igazi. A teória sokat elárul, de igazán nem visz minket közelebb az „őreg” titkaihoz. Mindenesetre, meggyőződésem, hogy ő nem dobál kockákat.**

A kvantummechanika értékelése: folytatás?

Az egyik nagy baj: **Az alapvető problémákat már az 1920-as évektől ismerjük!**

Kisebb előrelépések történtek pl. a kvantumos mérések értelmezésében, de nincs megnyugtató válasz...

A kvantummechanika értékelése: folytatás?

Az egyik nagy baj: **Az alapvető problémákat már az 1920-as évektől ismerjük!**

Kisebb előrelépések történtek pl. a kvantumos mérések értelmezésében, de nincs megnyugtató válasz...

... pedig:

- a maga körében a hullám-mechanika sok-sok tizedesjegyre pontosan írja le a világot
- sokan (maga Einstein is) próbálkoztak a „Nagy Egyesített Elmélet” megtalálásával

A kvantummechanika értékelése: folytatás?

Az egyik nagy baj: **Az alapvető problémákat már az 1920-as évektől ismerjük!**
Kisebb előrelépések történtek pl. a kvantumos mérések értelmezésében, de nincs megnyugtató válasz...

... pedig:

- a maga körében a hullám-mechanika sok-sok tizedesjegyre pontosan írja le a világot
- sokan (maga Einstein is) próbálkoztak a „Nagy Egyesített Elmélet” megtalálásával

Az áttöréshez valószínűleg nem lesz elég elméletileg okoskodni, hanem gyökeresen új mérések kellenek.

Ilyen kísérletek, megfigyelések folynak: nagy energiájú részecskék, az Univerzum nagy léptékű szerkezetének vizsgálata, ...

Nem tudhatjuk, mikor vezetnek sikerre...