



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

**Kvantumfizika alapjai**

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

# Kvantumfizika alapjai



# Hullámfüggvény

Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az  
atomban

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



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- **Hullámfüggvény**
- Dobozba zárt elektron
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az  
atomban

# Hullámfüggvény

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

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

● Hullámfüggvény

● Dobozba zárt elektron

● Alagút-effektus

Az elektron állapotai az  
atomban

## Hullámfüggvény

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

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye

$|\Psi|^2 dV$  annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a  $t$  időpillanatban az  $\underline{r}$  helyvektorral jellemzett  $dV$  térfogatban található.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

● Hullámfüggvény

● Dobozba zárt elektron

● Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

## Hullámfüggvény

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

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye  
 $|\Psi|^2 dV$  annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a  $t$  időpillanatban az  $\underline{r}$  helyvektorral jellemzett  $dV$  térfogatban található.

A hullámfüggvény normálási feltétele:

$$\int_{(V)} |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV = 1$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

● **Hullámfüggvény**

● Dobozba zárt elektron

● Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

## Hullámfüggvény

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

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye  
 $|\Psi|^2 dV$  annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a  $t$  időpillanatban az  $\underline{r}$  helyvektorral jellemzett  $dV$  térfogatban található.

A hullámfüggvény normálási feltétele:

$$\int_{(V)} |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV = 1$$

Az állapotfüggvény időbeli fejlődését a **Schrödinger-egyenlet** írja le.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

● Hullámfüggvény

● Dobozba zárt elektron

● Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

## Hullámfüggvény

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

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye  
 $|\Psi|^2 dV$  annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a  $t$  időpillanatban az  $\underline{r}$  helyvektorral jellemzett  $dV$  térfogatban található.

A hullámfüggvény normálási feltétele:

$$\int_{(V)} |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV = 1$$

Az állapotfüggvény időbeli fejlődését a **Schrödinger-egyenlet** írja le.

Stacionárius esetben mindig felírható:

$$\Psi(\underline{r}, t) = \varphi(\underline{r}) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az  
atomban

## Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy  $a$  hosszúságú szakaszra korlátozzuk.





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az  
atomban

## Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy  $a$  hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapottfüggvény tértől függő  $\varphi(x)$  része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

## Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy  $a$  hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő  $\varphi(x)$  része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

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



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

## Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy  $a$  hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő  $\varphi(x)$  része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

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

Felhasználva a  $\lambda = \frac{h}{p}$  de-Broglie féle összefüggést  $k = \frac{p}{\hbar}$ . Az elektron energiája ezekután:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

## Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy  $a$  hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő  $\varphi(x)$  része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

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

Felhasználva a  $\lambda = \frac{h}{p}$  de-Broglie féle összefüggést  $k = \frac{p}{\hbar}$ . Az elektron energiája ezekután:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}.$$

A probléma egydimenziós stacionárius Schrödinger egyenlete:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az  
atomban

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a  $\varphi(0) = 0$  és  $\varphi(a) = 0$ .



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a  $\varphi(0) = 0$  és  $\varphi(a) = 0$ .

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel, valamint a körfrekvencia helyére a hullámszám írandó. Megoldása is harmonikus függvény.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a  $\varphi(0) = 0$  és  $\varphi(a) = 0$ .

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel, valamint a körfrekvencia helyére a hullámszám írandó. Megoldása is harmonikus függvény.

$$\varphi(x) = A \sin(kx + \phi)$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a  $\varphi(0) = 0$  és  $\varphi(a) = 0$ .

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel, valamint a körfrekvencia helyére a hullámszám írandó. Megoldása is harmonikus függvény.

$$\varphi(x) = A \sin(kx + \phi)$$

Figyelembe véve a peremfeltételeket:  $\phi = 0$  és  $k = \frac{n\pi}{a}$ , ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a  $\varphi(0) = 0$  és  $\varphi(a) = 0$ .

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel, valamint a körfrekvencia helyére a hullámszám írandó. Megoldása is harmonikus függvény.

$$\varphi(x) = A \sin(kx + \phi)$$

Figyelembe véve a peremfeltételeket:  $\phi = 0$  és  $k = \frac{n\pi}{a}$ , ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$

A hullámszám kifejezhető az elektron energiájával:

$$k^2 = \frac{n^2 \pi^2}{a^2} = \frac{2mE}{\hbar^2},$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a  $\varphi(0) = 0$  és  $\varphi(a) = 0$ .

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel, valamint a körfrekvencia helyére a hullámszám írandó. Megoldása is harmonikus függvény.

$$\varphi(x) = A \sin(kx + \phi)$$

Figyelembe véve a peremfeltételeket:  $\phi = 0$  és  $k = \frac{n\pi}{a}$ , ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$

A hullámszám kifejezhető az elektron energiájával:

$$k^2 = \frac{n^2 \pi^2}{a^2} = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

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



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az  
atomban

Mivel:

$$\int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = 1.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Mivel:

$$\int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = 1.$$

Ennek alapján  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ .



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Mivel:

$$\int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = 1.$$

Ennek alapján  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ .

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- **Dobozba zárt elektron**
- Alagút-effektus

Az elektron állapotai az atomban

Mivel:

$$\int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = 1.$$

Ennek alapján  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ .

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

Általánosan igaz, ha egy mikroobjektum mozgását térben korlátozzuk, akkor energiája csak diszkrét energiaértékeket vehet fel.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

## Alagút-effektus

Egy elektron valamilyen meghatározott  $E_k$  mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz  $E < V$ .



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

## Alagút-effektus

Egy elektron valamilyen meghatározott  $E_k$  mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz  $E < V$ .

$$E_p(x) \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V = \text{konstans}, & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

## Alagút-effektus

Egy elektron valamilyen meghatározott  $E_k$  mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz  $E < V$ .

$$E_p(x) \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V = \text{konstans}, & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$

Ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy makroszkopikus test nem hatolhat be abba a térrészbe, ahol nagyobb lenne potenciális energiája, mint az a mozgási energia, amivel közeledik ehhez a térrészhez.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

## Alagút-effektus

Egy elektron valamilyen meghatározott  $E_k$  mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz  $E < V$ .

$$E_p(x) \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V = \text{konstans}, & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$

Ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy makroszkopikus test nem hatolhat be abba a térrészbe, ahol nagyobb lenne potenciális energiája, mint az a mozgási energia, amivel közeledik ehhez a térrészhez.

A kvantummechanikai eredmény azonban mást mutat.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az  
atomban

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Fejezzük ki a  $k$  hullámszám négyzetét az energia segítségével:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p)$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Fejezzük ki a  $k$  hullámszám négyzetét az energia segítségével:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p)$$

A probléma Schrödinger-egyenlete:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - E_p)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Fejezzük ki a  $k$  hullámszám négyzetét az energia segítségével:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p)$$

A probléma Schrödinger-egyenlete:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - E_p)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

A potenciál origóbeli ugrása miatt az  $x$ -tengely negatív és pozitív oldalán külön-külön meg kell oldani az egyenletet.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az  
atomban

$x < 0$ ,  $E_p = 0$ . Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

$x < 0$ ,  $E_p = 0$ . Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$

Legyen  $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ . Ekkor

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + k_0^2 \varphi_n(x) = 0.$$





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

$x < 0$ ,  $E_p = 0$ . Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$

Legyen  $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ . Ekkor

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + k_0^2 \varphi_n(x) = 0.$$

Keressük ennek az egyenletnek a megoldását a következő alakban:

$$\varphi_n(x) = e^{ik_0 x} + A e^{-ik_0 x}.$$

Itt  $i = \sqrt{-1}$  a képzetes egység.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

$x < 0$ ,  $E_p = 0$ . Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$

Legyen  $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ . Ekkor

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + k_0^2 \varphi_n(x) = 0.$$

Keressük ennek az egyenletnek a megoldását a következő alakban:

$$\varphi_n(x) = e^{ik_0 x} + A e^{-ik_0 x}.$$

Itt  $i = \sqrt{-1}$  a képzetes egység.

Fizikai jelentés: egységnyi amplitúdójú síkhullám közelít a potenciállépcsőhöz + visszaverődés után egy  $A$  amplitúdójú visszavert síkhullám is hozzájárul a megoldáshoz.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az  
atomban

$x \geq 0, E_p = V$ . A megoldandó egyenlet:

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



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

$x \geq 0, E_p = V$ . A megoldandó egyenlet:

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

Ez esetben az  $\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}$  kifejezés negatív, mivel  $E < V$ .



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

$x \geq 0, E_p = V$ . A megoldandó egyenlet:

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

Ez esetben az  $\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$  kifejezés negatív, mivel  $E < V$ .

Vezessük be a  $-K^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$  jelölést. Az egyenlet a következő alakot ölti:

$$\frac{d^2 \varphi_p(x)}{dx^2} - K^2 \varphi_p(x) = 0,$$

vagy ami ugyanaz:

$$\frac{d^2 \varphi_p(x)}{dx^2} = K^2 \varphi_p(x).$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az  
atomban

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = C e^{-Kx} + D e^{Kx}.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az  
atomban

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = C e^{-Kx} + D e^{Kx}.$$

Mivel a megoldás normálható kell legyen, így:  $D = 0$ .



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = C e^{-Kx} + D e^{Kx}.$$

Mivel a megoldás normálható kell legyen, így:  $D = 0$ .  
Így

$$\varphi_p(x) = C e^{-Kx}.$$





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = C e^{-Kx} + D e^{Kx}.$$

Mivel a megoldás normálható kell legyen, így:  $D = 0$ .  
Így

$$\varphi_p(x) = C e^{-Kx}.$$

A potenciállépcső magassága az  $x = 0$  pontban véges, a kapott megoldásoknak és azok első deriváltjainak az  $x = 0$  pontban azonosaknak kell lenniük. Ezért:

$$1 + A = C$$

$$ik_0(1 - A) = -KC$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

Megoldva ezt az egyenletrendszert azt kapjuk, hogy:

$$A = \frac{ik_0 + K}{ik_0 - K},$$

és

$$C = \frac{2ik_0}{ik_0 - K}.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

Megoldva ezt az egyenletrendszert azt kapjuk, hogy:

$$A = \frac{ik_0 + K}{ik_0 - K},$$

és

$$C = \frac{2ik_0}{ik_0 - K}.$$

A megoldásban az a meglepő, hogy az elektront leíró  $\varphi_p(x)$  nem lesz nulla a potenciállépcsőben sem.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban

Megoldva ezt az egyenletrendszert azt kapjuk, hogy:

$$A = \frac{ik_0 + K}{ik_0 - K},$$

és

$$C = \frac{2ik_0}{ik_0 - K}.$$

A megoldásban az a meglepő, hogy az elektront leíró  $\varphi_p(x)$  nem lesz nulla a potenciállépcsőben sem.

Azt mondhatjuk, hogy az elektron behatol a számára klasszikus értelemben elérhetetlen térrészbe is.



Bevezetés

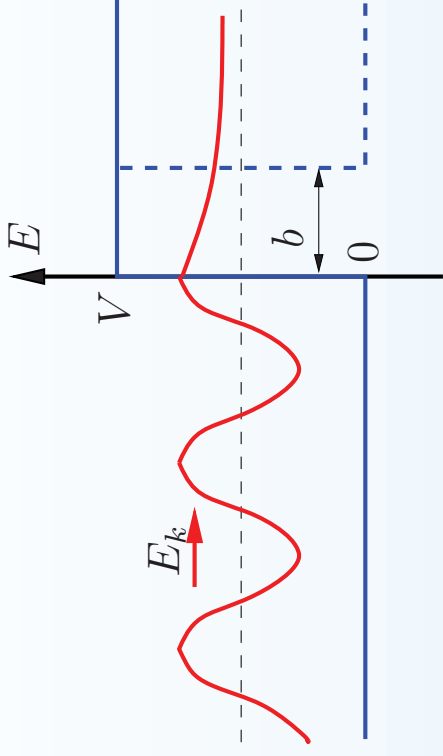
Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az  
atomban





Bevezetés

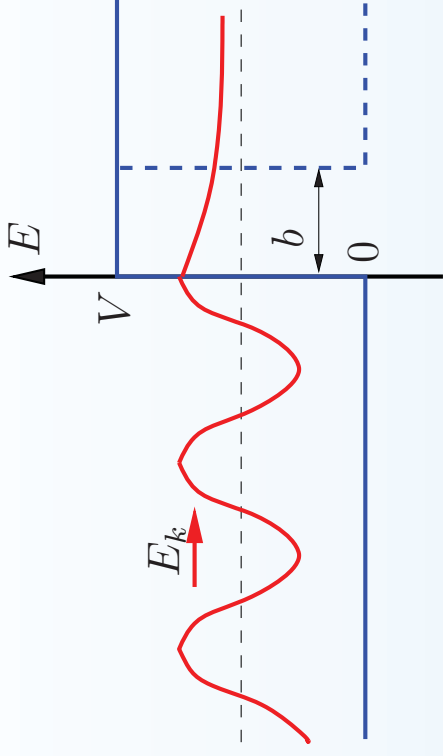
Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban



Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége ( $T$ ) a következő mennyiséggel arányos:

$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$



Bevezetés

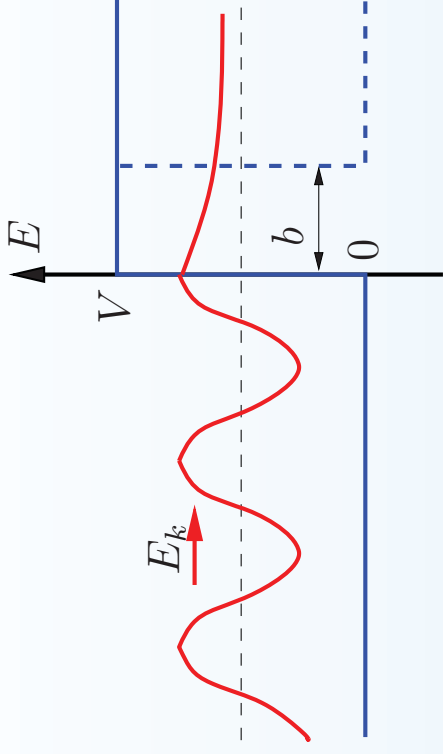
Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban



Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége ( $T$ ) a következő mennyiséggel arányos:

$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$

$T$  csökken ha  $b$  nő, vagy ha  $V - E$  növekszik.



Bevezetés

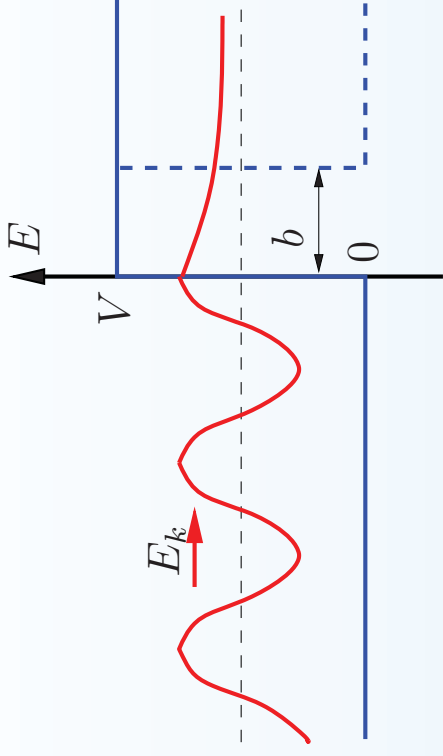
Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban



Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége ( $T$ ) a következő mennyiséggel arányos:

$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$

$T$  csökken ha  $b$  nő, vagy ha  $V - E$  növekszik.  
A jelenség neve **alagút-effektusnak**.





Bevezetés

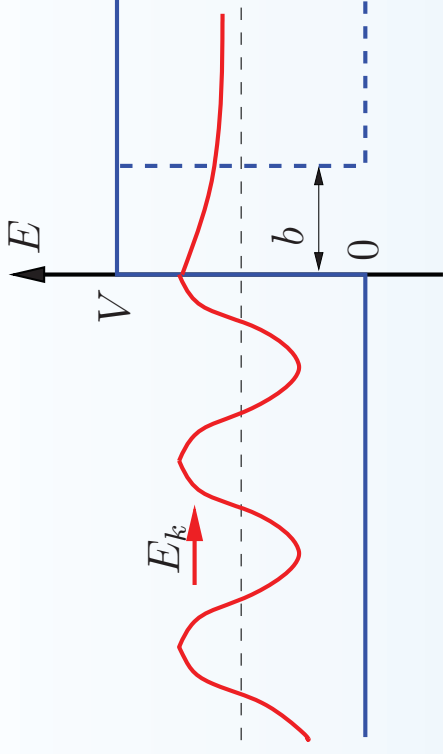
Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

- Hullámfüggvény
- Dobozba zárt elektron
- **Alagút-effektus**

Az elektron állapotai az atomban



Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége ( $T$ ) a következő mennyiséggel arányos:

$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$

$T$  csökken ha  $b$  nő, vagy ha  $V - E$  növekszik.  
A jelenség neve **alagút-effektusnak**.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

**Az elektron állapotai az atomban**

- A hidrogénatombeli elektron
- Heisenberg-féle határozatlansági relációk
- A többelektronos atomok
- Röntgensugárzás

# Az elektron állapotai az atomban



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

## A hidrogénatombeli elektron

Az elektron potenciális energiája az atommag elektromos terében:

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

ahol  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ .



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

## A hidrogénatombeli elektron

Az elektron potenciális energiája az atommag elektromos terében:

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

ahol  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ .

Mivel  $k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_p)$ , a stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$\Delta\varphi(\underline{r}) + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_p)\varphi(\underline{r}) = 0.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

## A hidrogénatombeli elektron

Az elektron potenciális energiája az atommag elektromos terében:

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

ahol  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ .

Mivel  $k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_p)$ , a stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$\Delta\varphi(\underline{r}) + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_p)\varphi(\underline{r}) = 0.$$

Mivel az atommag elektromos tere gömbszimmetrikus, keressük az egyenlet egy  $F(r)$  gömbszimmetrikus megoldását:

$$\varphi(\underline{r}) = F(r).$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

Ekkor a Schrödinger-egyenlet alakja:

$$\frac{d^2 F(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF(r)}{dr} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) F(r) = 0.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

Ekkor a Schrödinger-egyenlet alakja:

$$\frac{d^2 F(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF(r)}{dr} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) F(r) = 0.$$

A megoldást a következő alakban kapjuk:

$$F(r) = N e^{-\lambda r}$$

ahol  $N = \frac{\lambda^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}$  és  $\lambda = \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$ .



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

Ekkor a Schrödinger-egyenlet alakja:

$$\frac{d^2 F(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF(r)}{dr} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) F(r) = 0.$$

A megoldást a következő alakban kapjuk:

$$F(r) = N e^{-\lambda r}$$

ahol  $N = \frac{\lambda^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}$  és  $\lambda = \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$ .

Az elektron energiája ebben a gömbszimmetrikus állapotban:

$$E = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = -13,605 \text{ eV}.$$





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

Ekkor a Schrödinger-egyenlet alakja:

$$\frac{d^2 F(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF(r)}{dr} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) F(r) = 0.$$

A megoldást a következő alakban kapjuk:

$$F(r) = N e^{-\lambda r}$$

ahol  $N = \frac{\lambda^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}$  és  $\lambda = \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$ .

Az elektron energiája ebben a gömbszimmetrikus állapotban:

$$E = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = -13,605 \text{ eV}.$$

A Bohr-modellből számított  $n = 1$  kvantumszámmal jellemzett állapot energiáját kaptuk!



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

Vizsgáljuk meg a fenti elektron előfordulási valószínűségét ( $dP$ ) a  $dV = 4\pi r^2 dr$  elemi térfogatban.

$$dP = |F(r)|^2 dV = \frac{\lambda^3}{\pi} e^{-2\lambda r} 4\pi r^2 dr$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás

Vizsgáljuk meg a fenti elektron előfordulási valószínűségét ( $dP$ ) a  $dV = 4\pi r^2 dr$  elemi térfogatban.

$$dP = |F(r)|^2 dV = \frac{\lambda^3}{\pi} e^{-2\lambda r} 4\pi r^2 dr$$

Ebből kifejezhető, az elektron előfordulásának sugár szerinti eloszlása ( $p(r)$ ):

$$p(r) = \frac{dP}{dr} = 4\lambda^3 r^2 e^{-2\lambda r}.$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

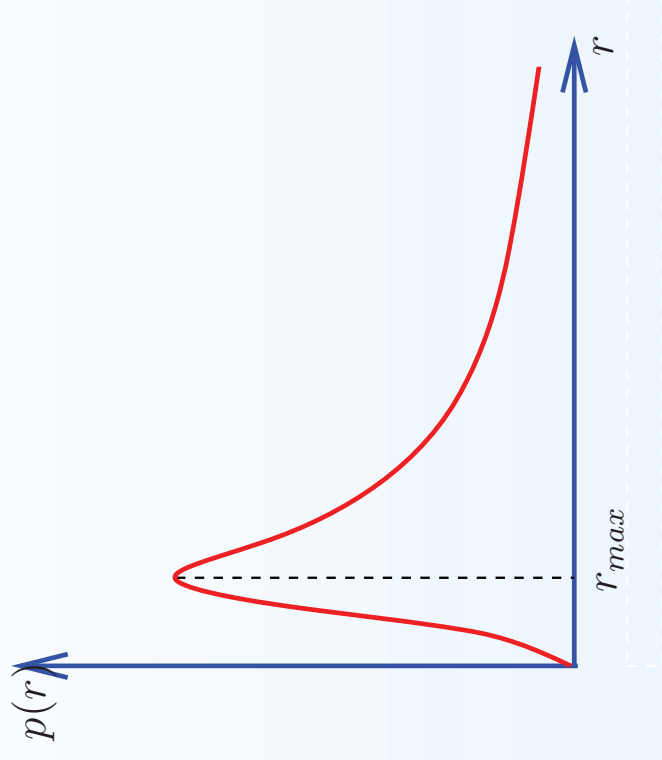
Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

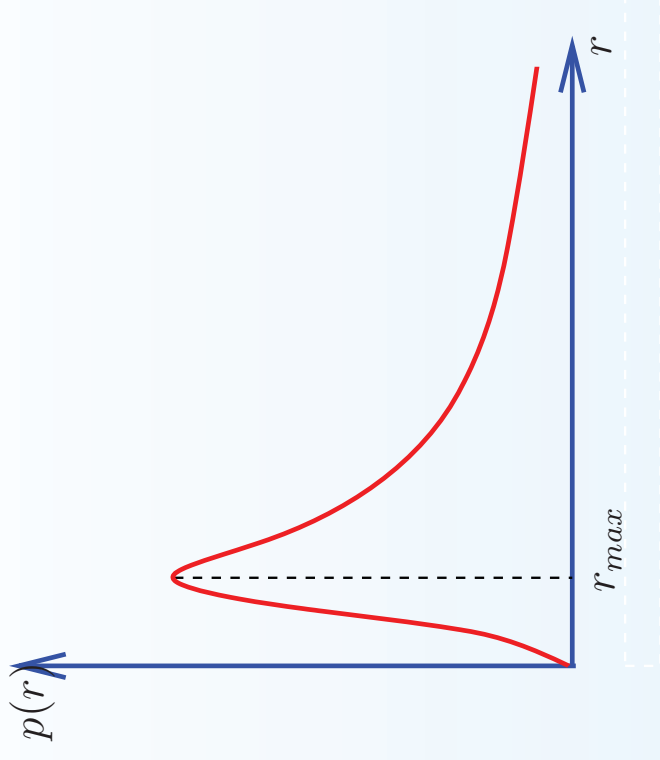
Az elektron állapotai az atomban

● A hidrogénatombeli elektron

● Heisenberg-féle határozatlansági relációk

● A többelektronos atomok

● Röntgensugárzás



Látható, hogy a  $p(r)$  valószínűségnek maximuma van az  $r_{max}$  helyen.

$$r_{max} = \frac{1}{\lambda} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m_e} = 0,54 \cdot 10^{-10} \text{ m.}$$

Ez éppen az első Bohr-sugár.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A többelektronos atomok

- Röntgensugárzás

## Heisenberg-féle határozatlansági relációk

Az elektron az atomokban úgy viselkedik mint egy bezárt hullám,  
azaz **hullámcsomag!**



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A többelektronos

atomok

- Röntgensugárzás

## Heisenberg-féle határozatlansági relációk

Az elektron az atomokban úgy viselkedik mint egy bezárt hullám, azaz **hullámcsomag!**

Minden hullámra igaz a határozatlansági összefüggés:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

- elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A többelektronos

- atomok

- Röntgensugárzás

## Heisenberg-féle határozatlansági relációk

Az elektron az atomokban úgy viselkedik mint egy bezárt hullám, azaz **hullámcsomag!**

Minden hullámra igaz a határozatlansági összefüggés:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

Mivel

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

így:

$$\Delta p = \hbar \Delta k$$





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A többelektronos

atomok

- Röntgensugárzás

## Heisenberg-féle határozatlansági relációk

Az elektron az atomokban úgy viselkedik mint egy bezárt hullám, azaz **hullámcsomag!**

Minden hullámra igaz a határozatlansági összefüggés:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

Mivel

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

így:

$$\Delta p = \hbar \Delta k$$

Fentieket figyelembe véve a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggést kapjuk:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A többelektronos atomok

- Röntgensugárzás

Az összefüggés azt jelenti, hogy a mikrovilágban bizonyos fizikai mennyiségek nem mérhetőek egyszerre tetszőleges pontossággal.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A többelektronos atomok

- Röntgensugárzás

Az összefüggés azt jelenti, hogy a mikrovilágban bizonyos fizikai mennyiségek nem mérhetőek egyszerre tetszőleges pontossággal. Hasonló határozatlansági összefüggés érvényes a mikroobjektumok energiaszintjeinek átlagos élettartama ( $\tau$ ) és az energianívók energiájának bizonytalansága ( $\Delta E$ ) között is.

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- **Heisenberg-féle határozatlansági relációk**

- A többelektronos atomok

- Röntgensugárzás

Az összefüggés azt jelenti, hogy a mikrovilágban bizonyos fizikai mennyiségek nem mérhetőek egyszerre tetszőleges pontossággal. Hasonló határozatlansági összefüggés érvényes a mikroobjektumok energiaszintjeinek átlagos élettartama ( $\tau$ ) és az energianívók energiájának bizonytalansága ( $\Delta E$ ) között is.

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$

Ezzel magyarázható a *spektrumvonalak természetes kiszélesedése*.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

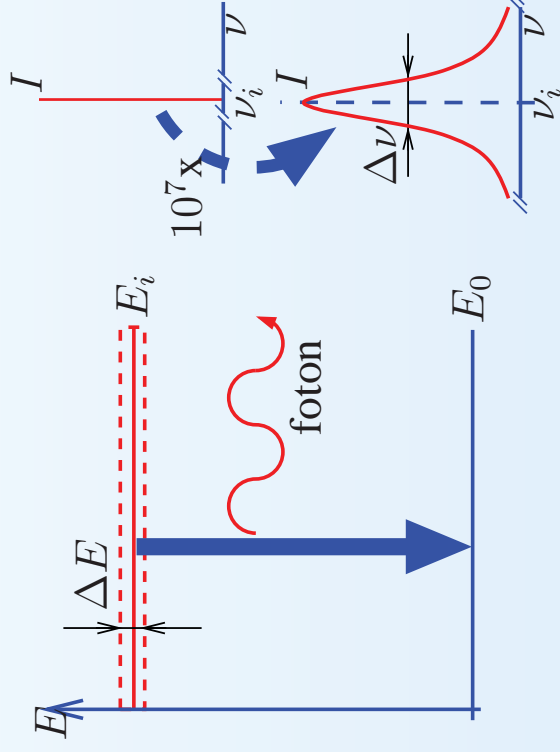
- A többelektronos atomok

- Röntgensugárzás

Az összefüggés azt jelenti, hogy a mikrovilágban bizonyos fizikai mennyiségek nem mérhetőek egyszerre tetszőleges pontossággal. Hasonló határozatlansági összefüggés érvényes a mikroobjektumok energiaszintjeinek átlagos élettartama ( $\tau$ ) és az energianívók energiájának bizonytalansága ( $\Delta E$ ) között is.

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$

Ezzel magyarázható a spektrumvonalak természetes kiszélesedése.





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

## A többelektronos atomok

A komoly matematikai nehézségek a többelektronos rendszereknél lépnek fel.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

## A többelektronos atomok

A komoly matematikai nehézségek a többelektronos rendszereknél lépnek fel.

Először is azt kell tisztáznunk, mely fizikai mennyiségek meghatározása a legfontosabb. Azokra leszünk kíváncsiak, amelyek mérésénél a Heisenberg-féle relációk nem jelentenek korlátozást.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

## A többelelektronos atomok

A komoly matematikai nehézségek a többelelektronos rendszereknél lépnek fel.

Először is azt kell tisztáznunk, mely fizikai mennyiségek meghatározása a legfontosabb. Azokra leszünk kíváncsiak, amelyek mérésénél a Heisenberg-féle relációk nem jelentenek korlátozást.

Az atomok esetében az *energia*, a *perdület nagysága*, a *perdület egyik vetülete* és egy tipikusan kvantumos mennyiség a *spin* értékei mérhetőek egyszerre tetszőleges pontossággal.





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

## A többelelektronos atomok

A komoly matematikai nehézségek a többelelektronos rendszereknél lépnek fel.

Először is azt kell tisztáznunk, mely fizikai mennyiségek meghatározása a legfontosabb. Azokra leszünk kíváncsiak, amelyek mérésénél a Heisenberg-féle relációk nem jelentenek korlátozást.

Az atomok esetében az *energia*, a *perdület nagysága*, a *perdület egyik vetülete* és egy tipikusan kvantumos mennyiség a *spin* értékei mérhetőek egyszerre tetszőleges pontossággal.

A kvantummechanika további következménye, hogy a mikrorészecskék perdülete sem vehet fel tetszőleges értékeket, hanem csak a  $\hbar$  egység meghatározott többszörösét.

$$L^2 = l(l + 1)\hbar^2,$$

ahol  $L$ -a perdület nagysága,  $l$ -a mellékkvantumszám. (mindig természetes szám, vagy nulla).



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

Ha meghatározunk egy tetszőleges irányt a térben (pl. külső mágneses tér iránya), akkor a vektormennyiségeknek az erre az irányra vett vetületei csak a  $\hbar$  egység egész számú többszörösei lehetnek.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle

határozatlansági

relációk

- A **többelektronos**

**atomok**

- Röntgensugárzás

Ha meghatározunk egy tetszőleges irányt a térben (pl. külső mágneses tér iránya), akkor a vektormennyiségeknek az erre az irányra vett vetületei csak a  $\hbar$  egység egész számú többszörösei lehetnek.

Ilyen vektormennyiség a perdület is. Ennek adott irányra–legyen ez a  $z$ -irány–való vetülete:

$$L_z = m\hbar$$

ahol  $m$ -egész szám.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

• A hidrogénatombeli

elektron

• Heisenberg-féle

határozatlansági

relációk

• A **többelektromos**

**atomok**

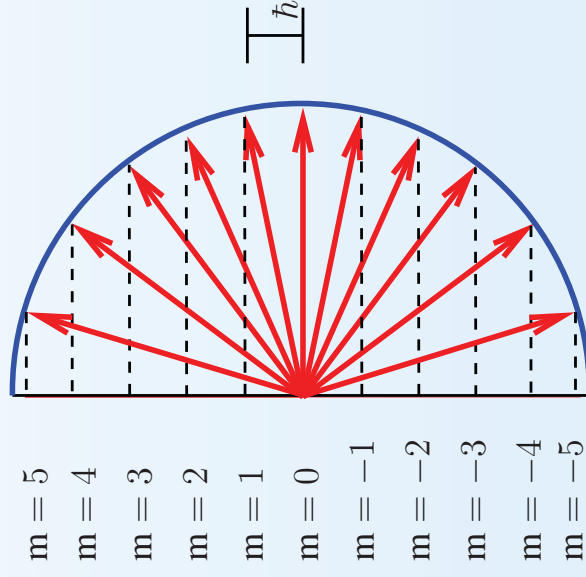
• Röntgensugárzás

Ha meghatározunk egy tetszőleges irányt a térben (pl. külső mágneses tér iránya), akkor a vektormennyiségeknek az erre az irányra vett vetületei csak a  $\hbar$  egység egész számú többszörösei lehetnek.

Ilyen vektormennyiség a perdület is. Ennek adott irányra–legyen ez a  $z$ -irány–való vetülete:

$$L_z = m\hbar$$

ahol  $m$ -egész szám.





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle

határozatlansági

relációk

- A **többelektronos**

**atomok**

- Röntgensugárzás

Láttuk, hogy az elektronnak kvantált perldülete van, amely mozgásából származik.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

Láttuk, hogy az elektronnak kvantált perdjülete van, amely mozgásából származik.

Az elektron rendelkezik az előbb említett pályaperdjületen kívül még más jellegű perdjülettel is, amely nem kapcsolható össze semmiféle mozgással.  $\Rightarrow$  **Spin, vagy sajátperdjület.**



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

Láttuk, hogy az elektronnak kvantált perdülete van, amely mozgásából származik.

Az elektron rendelkezik az előbb említett pályaperdületen kívül még más jellegű perdülettel is, amely nem kapcsolható össze semmiféle mozgással.  $\Rightarrow$  **Spin, vagy sajátperdület.**

A spin is kvantált mennyiség. Egy kiválasztott irányra az elektron esetében két vetülete lehet.

$$S_z = s_z \hbar,$$

ahol  $S_z$ -az elektronspin vetülete,  $s_z$ -pedig az un. spinkvantumszám, értéke  $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$  ( $s_z$  nem egész szám!).



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

Láttuk, hogy az elektronnak kvantált perdülete van, amely mozgásából származik.

Az elektron rendelkezik az előbb említett pályaperdületen kívül még más jellegű perdülettel is, amely nem kapcsolható össze semmiféle mozgással.  $\Rightarrow$  **Spin, vagy sajátperdület.**

A spin is kvantált mennyiség. Egy kiválasztott irányra az elektron esetében két vetülete lehet.

$$S_z = s_z \hbar,$$

ahol  $S_z$ -az elektronspin vetülete,  $s_z$ -pedig az un. spinkvantumszám, értéke  $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$  ( $s_z$  nem egész szám!).





Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

Az atomokban egy elektronállapot jellemzéséhez négy kvantumszámmra van szükség.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron
- Heisenberg-féle határozatlansági relációk
- A **többelektronos atomok**
- Röntgensugárzás

Az atomokban egy elektronállapot jellemzéséhez négy kvantumszámmra van szükség.

- $n$  - főkvantumszám - az energiát határozza meg  
( $n = 1, 2, 3, \dots$ )



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli elektron

- Heisenberg-féle határozatlansági relációk

- A **többelektronos atomok**

- Röntgensugárzás

Az atomokban egy elektronállapot jellemzéséhez négy kvantumszámmra van szükség.

- $n$  - főkvantumszám - az energiát határozza meg  
( $n = 1, 2, 3, \dots$ )
- $l$  - mellékkvantumszám - a perdületet határozza meg  
( $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ )



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle

határozatlansági

relációk

- A **többelektronos**

**atomok**

- Röntgensugárzás

Az atomokban egy elektronállapot jellemzéséhez négy kvantumszámmra van szükség.

- $n$  - főkvantumszám - az energiát határozza meg  
( $n = 1, 2, 3, \dots$ )
- $l$  - mellékkvantumszám - a perdületet határozza meg  
( $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ )
- $m$  - mágneses kvantumszám - a perdület egy kitüntetett irányra  
(pl. külső mágneses tér) való vetületét határozza meg  
( $m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ )



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle

határozatlansági

relációk

- A **többelektronos**

atomok

- Röntgensugárzás

Az atomokban egy elektronállapot jellemzéséhez négy kvantumszámmra van szükség.

- $n$  - főkvantumszám - az energiát határozza meg  
( $n = 1, 2, 3, \dots$ )
- $l$  - mellékkvantumszám - a perdületet határozza meg  
( $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ )
- $m$  - mágneses kvantumszám - a perdület egy kitüntetett irányra  
(pl. külső mágneses tér) való vetületét határozza meg  
( $m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ )
- $s_z$  - spin kvantumszám - a sajátperdület egy kitüntetett irányra  
való vetületét határozza meg ( $s_z = -1/2, +1/2$ )



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle

határozatlansági

relációk

- A **többelektromos**

**atomok**

- Röntgensugárzás

Az atomokban egy elektronállapot jellemzéséhez négy kvantumszámmra van szükség.

- $n$  - főkvantumszám - az energiát határozza meg  
( $n = 1, 2, 3, \dots$ )
- $l$  - mellékkvantumszám - a perdületet határozza meg  
( $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ )
- $m$  - mágneses kvantumszám - a perdület egy kitüntetett irányra  
(pl. külső mágneses tér) való vetületét határozza meg  
( $m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ )
- $s_z$  - spin kvantumszám - a sajátperdület egy kitüntetett irányra  
való vetületét határozza meg ( $s_z = -1/2, +1/2$ )

Pauli-elv: Két, vagy több feles spinű részecske, vagy fermion sohasem lehet ugyanabban a kvantumállapotban.



Bevezetés

Kísérleti tények

Atommodellek

Kvantumfizika alapjai

Az elektron állapotai az atomban

- A hidrogénatombeli

elektron

- Heisenberg-féle

határozatlansági

relációk

- A **többelektronos**

atomok

- Röntgensugárzás

Az atomokban egy elektronállapot jellemzéséhez négy kvantumszámmra van szükség.

- $n$  - főkvantumszám - az energiát határozza meg  
( $n = 1, 2, 3, \dots$ )
- $l$  - mellékkvantumszám - a perdületet határozza meg  
( $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ )
- $m$  - mágneses kvantumszám - a perdület egy kitüntetett irányra (pl. külső mágneses tér) való vetületét határozza meg  
( $m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ )
- $s_z$  - spin kvantumszám - a sajátperdület egy kitüntetett irányra való vetületét határozza meg ( $s_z = -1/2, +1/2$ )

**Pauli-elv: Két, vagy több feles spinű részecske, vagy fermion sohasem lehet ugyanabban a kvantumállapotban.**

Az energiaminimum elve, valamint a Pauli-elv képezik az alapját a periódusos rendszer kvantumfizikai értelmezésének.