

Modern fizika laboratórium  
Egyetemi tananyag

Szerkesztette: Koltai János  
Lektorálta: Papp Elemér

2013. április

# Fizikai állandók

$c$	fénysebesség	$2,9979 \cdot 10^8$	m/s
$e$	elemi töltés	$1,6022 \cdot 10^{-19}$	C
$h$	Planck állandó	$6,6261 \cdot 10^{-34}$	Js
$\hbar$	$h/2\pi$	$1,0546 \cdot 10^{-34}$	Js
$m_e$	elektron tömeg	$9,1094 \cdot 10^{-31}$	kg
$m_p$	proton tömeg	$1,6726 \cdot 10^{-27}$	kg
$R_\infty$	Rydberg-állandó	$1,0974 \cdot 10^7$	$m^{-1}$
$\alpha$	finomszerkezeti állandó (1/137)	$7,2974 \cdot 10^{-3}$	
$g_e$	szabad elektron g faktor	2,0023...	
$\mu_B$	Bohr-magneton	$9,2740 \cdot 10^{-24}$	J/T
$\mu_n$	magneton	$5,0508 \cdot 10^{-27}$	J/T
$k$	Boltzmann-állandó	$1,3807 \cdot 10^{-23}$	J/K
$N_A$	Avogadro-szám	$6,0221 \cdot 10^{23}$	$mol^{-1}$
$R$	gázállandó	8,3145...	J/K · mol

	eV	kcal/mol	KJ/mol	$cm^{-1}$	aJ
eV	1	23,0451	96,4853	8065,54	0,160217733
kcal/mol	0,0433931	1	4,1868	349,989	$6,95235 \cdot 10^{-3}$
KJ/mol	0,01036427	0,238845	1	83,5935	$1,66054 \cdot 10^{-3}$
$cm^{-1}$	$1,23984 \cdot 10^{-4}$	$2,85723 \cdot 10^{-3}$	0,01196266	1	$1,98645 \cdot 10^{-5}$
aJ	6,24151	143,836	602,214	50341,1	1
mm/s( $^{57}Fe$ )	$4,80799 \cdot 10^{-8}$				$7,70326 \cdot 10^{-9}$

# Előszó

A „Modern fizika laboratórium” a fizika és a matematika (tanár fizika minor szakkal) alapképzés egyik kötelező tárgya, melyet a hallgatók a 4-6. félév között vehetnek fel. A címben szereplő jelző leginkább a XX. század fizikájára utal, a mérések javarészt a fizikatörténeti modern fizika témakörből kerülnek ki. A 18 bemutatott mérés között megtalálhatóak az atomfizika alapmérései (például elemi töltés meghatározása, fotoeffektus, Franck–Hertz-kísérlet vagy Zeeman-effektus), spektroszkópia mérések (spektrofotometria, infravörös spektroszkópia, elektron spin rezonancia), magfizikai módszerek felhasználása anyagvizsgálatra (röntgenfluoreszcencia és pozitron annihiláció), vagy újabb technikák bemutatása (például holográfia vagy folyadékkristályok).

A jegyzet három függelék tartalmaz (Atomspektroszkópia, Molekulaspektroszkópia és Lézerek), ahol a laboratóriumi gyakorlatok során leggyakrabban felmerülő fogalmakat, összefüggéseket ismertetjük – röviden. Ez nem tekinthető az adott terület összefoglalásának, csupán segítséget óhajt nyújtani a kísérletek elvi hátteréül. A függelékek olvasását feltétlenül ajánljuk, a megfelelő részekre a kísérletek leírásánál utalunk.

A laboratórium a legtöbb esetben a mai korszerű kísérleti technikát nem tudja bemutatni. Esetenként csupán a jelenség megismerését tűzhetjük ki célként, finomabb vizsgálatok elvégzésére berendezéseink nem alkalmasak. Úgy gondoljuk azonban, hallgatóink későbbi pályafutásuk során – korszerű berendezéseken kutatva – hasznosíthatják a labormérések alatt megszerzett készségeket, úgy függvény-illesztésben, képfeldolgozásban, scriptírásban, mint igényes ábrák elkészítésében vagy éppen jegyzőkönyvírásban.

Egy kísérlet elvégzése három fázisból áll: elméleti felkészülés, a kísérlet lefolytatása és végül a kapott eredmények kiértékelése. Az utóbbi fázisok feltételezik az előzőket, egyiket sem szabad lebecsülni. A felkészülést segítő fejezetenként található egy-egy gyakorló kérdéssor, amely kérdéseket érdemes végiggondolni, és szükség esetén a korábbi ismereteket is felfrissíteni. A kísérletekhez a mérési feladatokat is megadjuk. Egyes kísérletekhez a helyszínen további fontos információ található.

Ezen jegyzet nagy mértékben épül a korábbi Modern Fizika Laboratóriumi jegyzetre (szerkesztette: Papp Elemér, Budapest, 1995), annak átdolgozott, felfrissített, elektronikus kiadása. A leírások több helyen erősen épülnek a korábbiakra, a változások sokszor csak a mérőberendezést érintik, az elméletek már nem nagyon változnak. A korábbiakhoz képest három mérés kikerült a laboratórium kínálatából, helyettük négy új mérés került

be: pozitron annihiláció (PET), fényelektromos hatás, granuláris anyagok és kvantumradír. Megradjuk a lehetőséget arra, hogy ehelyütt mondjunk köszönetet a korábbi jegyzet szerzőinek: Deák Ferencnek, Éber Nándornak, Fricsovszky Györgynek, Papp Elemérnek, Rajczy Péternek, Rozlosnik Noéminak és Ungvárai Jánosnak.



# Tartalomjegyzék

<b>1. Hőmérsékleti sugárzás (Kovács György)</b>	<b>2</b>
1.1. Bevezetés . . . . .	2
1.2. Az ideális feketetest sugárzási törvénye . . . . .	2
1.3. Hőmérsékletmérési módszerek . . . . .	3
1.4. Mérőberendezés . . . . .	4
1.5. Kalibrálás . . . . .	6
1.6. Gyakorló kérdések . . . . .	8
1.7. Mérési feladatok . . . . .	8
<b>2. Az elemi töltés meghatározása (Kovács György)</b>	<b>9</b>
2.1. Bevezetés . . . . .	9
2.2. Mérési elv . . . . .	9
2.3. A mérés menete . . . . .	11
2.3.1. A mérőberendezés . . . . .	11
2.3.2. A cseppek töltésének meghatározása . . . . .	12
2.3.3. Az elemi töltés meghatározása . . . . .	13
2.4. Gyakorló kérdések . . . . .	14
2.5. Mérési feladatok . . . . .	14
<b>3. Atomok gerjesztési potenciálja (Kovács György)</b>	<b>16</b>
3.1. Bevezetés . . . . .	16
3.2. A Franck–Hertz-cső . . . . .	16
3.3. A mérés menete . . . . .	19
3.4. Gyakorló kérdések . . . . .	21
3.5. Mérési feladatok . . . . .	22
<b>4. Fényelektromos jelenség (Kovács György)</b>	<b>23</b>
4.1. Bevezetés . . . . .	23
4.2. Fotocella . . . . .	24
4.3. Gyakorló kérdések . . . . .	26
4.4. Mérési feladatok . . . . .	27

<b>5. Hidrogén és alkálifémek spektruma (Kovács György)</b>	<b>29</b>
5.1. Bevezetés	29
5.2. Hidrogén atom színe	30
5.3. Alkáli atomok spektruma	31
5.4. Spektroszkópok működése	32
5.5. A mérés során alkalmazott fényforrások.	36
5.6. Gyakorló kérdések	37
5.7. Mérési feladatok	38
5.7.1. Grotrian-diagramok	38
<b>6. Zeeman-effektus (Koltai János)</b>	<b>42</b>
6.1. Bevezetés	42
6.2. A Fábry–Perot-interferométer	43
6.2.1. Az interferométeren átmenő fény intenzitása	44
6.2.2. Kísérleti alkalmazások	45
6.2.3. Spektrális jellemzők, felbontóképesség	47
6.3. A mérés menete	48
6.4. Számolási feladatok	49
6.5. Gyakorló kérdések	50
6.6. Mérési feladatok	50
<b>7. Optikai pumpálás (Szabó Bálint)</b>	<b>52</b>
7.1. Bevezetés	52
7.1.1. Optikai pumpálás Rb atomokkal	53
7.1.2. Relaxációs folyamatok	54
7.2. A mérőberendezés	56
7.3. A rezonancia átmenet és kísérleti megfigyelése	58
7.4. Gyakorló kérdések	60
7.5. Mérési feladatok	60
7.6. Ajánlott irodalom	61
<b>8. Elektronspin rezonancia (Kürti Jenő)</b>	<b>63</b>
8.1. Bevezetés	63
8.2. A mágneses rezonancia alapjai	64
8.2.1. Egyszerű kvantummechanikai kép	64
8.2.2. Energiaabszorpció, a relaxációk szerepe	67
8.3. Az ESR-spektrum néhány fontos jellemzője	69
8.3.1. A g-faktor	70
8.3.2. A hiperfinom kölcsönhatás	71
8.4. A mérőberendezés	75
8.5. Gyakorló kérdések	77

8.6. Mérési feladatok . . . . .	78
8.7. Ajánlott irodalom . . . . .	79
<b>9. Röntgenfluoreszcencia analízis (Csorba Ottó és Horváth Ákos)</b>	<b>81</b>
9.1. Bevezetés . . . . .	81
9.2. A karakterisztikus röntgensugárzás . . . . .	83
9.2.1. A karakterisztikus röntgensugárzás keltése . . . . .	83
9.2.2. A karakterisztikus röntgensugárzás energiája . . . . .	84
9.2.3. A karakterisztikus röntgensugárzás elnevezése . . . . .	85
9.2.4. A Moseley-törvény . . . . .	86
9.3. A karakterisztikus röntgenfotonok mérése . . . . .	87
9.3.1. A forrás . . . . .	87
9.3.2. A minta . . . . .	87
9.3.3. A detektor . . . . .	89
9.3.4. Az energiaspektrum . . . . .	89
9.4. A minta összetételének meghatározása . . . . .	90
9.4.1. Minőségi analízis . . . . .	90
9.4.2. Mennyiségi analízis . . . . .	91
9.5. Biztonsági előírások . . . . .	91
9.6. Gyakorló kérdések . . . . .	91
9.7. Mérési feladatok . . . . .	92
<b>10. Pozitron annihiláció vizsgálata (Pávó Gyula és Veres Gábor)</b>	<b>93</b>
10.1. Bevezetés . . . . .	93
10.2. Elméleti áttekintés . . . . .	93
10.2.1. Anyag, antianyag, pozitron . . . . .	93
10.2.2. Antianyag a természetben . . . . .	95
10.2.3. A pozitron annihilációja . . . . .	96
10.2.4. A pozitron-annihiláció orvosi alkalmazása . . . . .	98
10.3. A PET koincidencia-mérés elve . . . . .	99
10.3.1. Sugárvédelmi megfontolások . . . . .	103
10.4. A mérés menete . . . . .	104
10.5. Ellenőrző kérdések . . . . .	107
10.6. Mérési feladatok . . . . .	109
<b>11. Spektrofotometria (Czirók András)</b>	<b>111</b>
11.1. Bevezetés . . . . .	111
11.2. Egyensúlyi állandó meghatározása ekvimoláris oldatok keverékeiből . . . . .	113
11.3. Egyensúlyi állandó meghatározása eltérő töménységű oldatok keverékeiből . . . . .	114
11.4. Az egyensúlyi állandó hőmérséklet-függése . . . . .	115
11.5. Gyakorló kérdések . . . . .	118

11.6. Mérési feladatok . . . . .	119
<b>12. Infravörös spektroszkópia (Czirók András)</b>	<b>120</b>
12.1. Bevezetés . . . . .	120
12.2. A kétutas spektrométer működési elve . . . . .	121
12.2.1. A berendezés fényútja . . . . .	121
12.2.2. Fényforrás . . . . .	122
12.2.3. Monokromátor . . . . .	122
12.2.4. Detektor . . . . .	123
12.3. Kétatomos molekulák rezgési és forgási átmenetei . . . . .	123
12.3.1. Merev pörgettyű . . . . .	123
12.3.2. Rezgő pörgettyű . . . . .	124
12.4. Gyakorló kérdések . . . . .	127
12.5. Mérési feladatok . . . . .	127
12.5.1. A mérőberendezés beállításai . . . . .	128
12.5.2. Kalibráció . . . . .	128
12.5.3. Alapvonal vizsgálata . . . . .	128
12.5.4. Polisztírol fólia IR spektruma . . . . .	129
12.5.5. A $C_{60}$ fullerén molekula infravörös spektruma . . . . .	129
12.5.6. A HCl molekula IR spektrumának elemzése . . . . .	129
<b>13. Molekulamodellzés (Koltai János és Zólyomi Viktor)</b>	<b>130</b>
13.1. Bevezetés . . . . .	130
13.2. Sokelektronos rendszerek leírása . . . . .	130
13.2.1. A Schrödinger-egyenlet sokelektronos rendszerekre . . . . .	130
13.2.2. A Born–Oppenheimer-közelítés . . . . .	131
13.2.3. A variációs elv és gyakorlati alkalmazása . . . . .	132
13.2.4. Geometria optimalizálás, Hellmann–Feynman-tétel . . . . .	133
13.2.5. Pauli-elv, szinglett és tripllett spinállapotok . . . . .	134
13.2.6. Független részecske módszer, Hartree–Fock-közelítés . . . . .	135
13.2.7. Szemiempirikus módszerek és molekulamechanika . . . . .	136
13.2.8. Sűrűségfunkcionál elmélet, Hohenberg–Kohn-tételek . . . . .	137
13.3. A mérés menete . . . . .	137
13.3.1. A bázisválasztás kérdése . . . . .	138
13.3.2. Molekulák kvalitatív vizsgálata . . . . .	138
13.4. Számolási feladatok . . . . .	140
13.5. Gyakorló kérdések . . . . .	140
13.6. Mérési feladatok . . . . .	141
13.7. Ajánlott irodalom . . . . .	142

<b>14.Holográfia (Szabó Bálint)</b>	<b>144</b>
14.1. Bevezetés . . . . .	144
14.2. A holográfia alapjai és a Fresnel-lemez . . . . .	145
14.2.1. A holografikus regisztrálás és rekonstrukció . . . . .	149
14.2.2. A holografikus leképezés minősége . . . . .	151
14.3. A mérési elrendezés . . . . .	154
14.4. Gyakorló kérdések . . . . .	157
14.5. Mérési feladatok . . . . .	157
14.6. Ajánlott irodalom . . . . .	158
<b>15.Kvantumradír kísérlet (Koltai János)</b>	<b>160</b>
15.1. Bevezetés . . . . .	160
15.2. Kvantumradír . . . . .	161
15.3. Mach–Zehnder-interferométer . . . . .	162
15.3.1. Az interferencia gyűrűk eredete . . . . .	163
15.3.2. Egyfotonos Mach–Zehnder-kísérlet . . . . .	164
15.3.3. Kvantumradír kísérlet Mach–Zehnder-elrendezésben . . . . .	165
15.4. Kétfotonos kísérlet . . . . .	165
15.4.1. Parametrikus lekonvertálás . . . . .	166
15.4.2. Az útvonaljelölő . . . . .	166
15.4.3. A kvantumradír megvalósítása . . . . .	168
15.4.4. Késleltetett kvantumradír . . . . .	168
15.4.5. Felfogni a felfoghatatlant . . . . .	169
15.5. Számolási feladatok . . . . .	170
15.6. Gyakorló kérdések . . . . .	171
15.7. Mérési feladatok . . . . .	172
15.7.1. Praktikus tanácsok . . . . .	172
15.8. Ajánlott irodalom . . . . .	174
<b>16.Diffúzió (Szabó Bálint)</b>	<b>176</b>
16.1. Bevezetés . . . . .	176
16.1.1. A diffúziós együttható és mérése . . . . .	177
16.1.2. A diffúzió vizsgálata Schlieren-módszerrel . . . . .	180
16.2. A mérőberendezés és a mérés . . . . .	181
16.3. Gyakorló kérdések . . . . .	184
16.4. Mérési feladatok . . . . .	184
16.5. Ajánlott irodalom . . . . .	185
<b>17.Folyadékkristályok és folyadékkristály kijelzők (Koltai János)</b>	<b>187</b>
17.1. Bevezetés . . . . .	187
17.2. A folyadékkristályok alapvető tulajdonságai . . . . .	187

17.2.1. A folyadékkristályok története . . . . .	187
17.2.2. A folyadékkristályok szerkezete . . . . .	188
17.2.3. Molekuláris jellemzők . . . . .	190
17.2.4. Ferroelektromos folyadékkristályok . . . . .	191
17.3. Törésmutató mérése nematikus fázisban . . . . .	193
17.3.1. A minta hőmérsékletének szabályozása . . . . .	195
17.3.2. A törésmutató hőmérsékletfüggésének értelmezése . . . . .	195
17.4. Folyadékkristályok elektrooptikai vizsgálata . . . . .	196
17.4.1. A folyadékkristály-kijelzőkről általában . . . . .	197
17.4.2. A csavart nematikus kijelző . . . . .	198
17.4.3. A felületstabilizált ferroelektromos kijelző . . . . .	198
17.4.4. Mi van a lapostévében és az okostelefonban? . . . . .	201
17.5. Számolási feladat . . . . .	204
17.6. Gyakorló kérdések . . . . .	204
17.7. Mérési feladatok . . . . .	204
17.8. Ajánlott irodalom . . . . .	205
<b>18. Granuláris anyagok (Koltai János és Tegzes Pál)</b>	<b>207</b>
18.1. Bevezetés . . . . .	207
18.2. Nyugalmi állapot . . . . .	208
18.3. A nyomás mélységfüggése granuláris oszlopban . . . . .	210
18.3.1. A Janssen-modell rövid ismertetése . . . . .	211
18.3.2. A mélységfüggés-mérés menete . . . . .	211
18.4. A mikroszkopikus erőeloszlás vizsgálata . . . . .	212
18.4.1. A q-modell . . . . .	212
18.4.2. Az erőeloszlás mérés menete . . . . .	213
18.5. Számolási feladatok . . . . .	215
18.6. Gyakorló kérdések . . . . .	215
18.7. Mérési feladatok . . . . .	216
18.7.1. Praktikus tanácsok . . . . .	217
18.8. Ajánlott irodalom . . . . .	219
<b>A. Atomspektroszkópia (Kürti Jenő)</b>	<b>221</b>
A.1. Bevezetés . . . . .	221
A.2. Atomi termék jelölése . . . . .	221
A.3. Mágneses momentumok . . . . .	222
A.4. Durva szerkezet, Hund-szabályok . . . . .	223
A.5. Finomszerkezet, spin-pálya kölcsönhatás . . . . .	225
A.6. A Zeeman-effektus . . . . .	229
A.7. A hiperfinom kölcsönhatás . . . . .	232
A.8. Röntgen-termék . . . . .	237

A.9. Ajánlott irodalom . . . . .	238
<b>B. Molekulaspektroszkópia (Kürti Jenő)</b>	<b>240</b>
B.1. Bevezetés . . . . .	240
B.2. Molekulatermek jelölése . . . . .	240
B.3. Molekulatermek osztályozása . . . . .	241
B.3.1. Elektrontermek . . . . .	241
B.3.2. Rezgési termék . . . . .	242
B.3.3. Forgási termék . . . . .	243
B.3.4. Kéttatomos és lineáris molekulák rotációs termjei . . . . .	244
B.4. Elektromágneses átmenetek . . . . .	244
B.4.1. A rezgési-abszorpció klasszikus értelmezése . . . . .	245
B.4.2. A Rayleigh- és a Raman-szórás klasszikus értelmezése . . . . .	245
B.4.3. A Raman-szórás kvantummechanikai modellje . . . . .	245
B.4.4. Rezgési átmenetek . . . . .	247
B.5. Kéttatomos molekulák rezgési-forgási átmenetei . . . . .	247
B.5.1. Termrendszer . . . . .	247
B.5.2. Infravörös elnyelési színekép . . . . .	248
B.5.3. Raman-átmenetek . . . . .	249
B.5.4. A színeképvonalak relatív intenzitása . . . . .	250
B.5.5. Elektronátmenetek. A Franck–Condon elv . . . . .	250
B.5.6. Disszociáció, predisszociáció . . . . .	251
B.6. Ajánlott irodalom . . . . .	251
<b>C. Lézerek (Kürti Jenő)</b>	<b>254</b>
C.1. Bevezetés . . . . .	254
C.2. A koherencia . . . . .	254
C.3. A lézerműködés alapelve . . . . .	256
C.4. Lézertípusok . . . . .	260
C.5. Ajánlott irodalom . . . . .	265

# 1. fejezet

## Hőmérsékleti sugárzás (Kovács György)

### 1.1. Bevezetés

A XIX. század végén úgy hitték, új, nagy horderejű eredmények a fizikában már nem lesznek és csak kevés nyitott probléma van. Az egyik, még lezáratlan kérdés éppen a hőmérsékleti sugárzás volt. A kísérleti adatok interpretálását sokan megkísérelték, de a legismertebb formulák, a Rayleigh-Jeans, vagy a Wien-féle sugárzási törvény, csak korlátozott hullámhosszintervallumon adott jó egyezést a kísérleti adatokkal. Végül 1900-ban a német Max Plancknak sikerült végleges megoldást találni a feketetest sugárzás problémájára. A hőmérsékleti sugárzással kapcsolatos felfedezéséért Wien 1911-ben kapott Nobel-díjat és Planck 1918-as Nobel-díjának indoklása: „szolgálatának elismeréseképp, amiatt a hatás miatt, amit kvantumelméletével a fizika fejlődésére gyakorolt”.

### 1.2. Az ideális feketetest sugárzási törvénye

Bármilyen, az abszolút nulla foktól különböző hőmérsékletű test elektromágneses sugárzást bocsát ki. A sugárzás oka, hogy az anyag töltései a hőmozgás következtében gyorsulnak, és a gyorsuló töltések az elektrodinamika törvényeinek megfelelően elektromágneses sugárzást bocsátanak ki. A testek nemcsak kibocsátanak, hanem nyelnek is el fényt. A fekete test definíció szerint olyan tárgy, amely minden ráeső sugárzást elnyel, függetlenül annak hullámhosszától. Az ilyen test sugárzása teljesen független az anyagától, a sugárzás sajátosságait a test hőmérséklete szabja meg. Abszolút fekete test nem létezik, de jól közelíthető egy kormozott belső falú, zárt, üres dobozzal, és a test sugárzását az üreg falán vágott kis nyílásba helyezett szondával vizsgálhatjuk. Bármilyen más anyag termikus sugárzása Kirchhoff sugárzási törvénye alapján visszavezethető a fekete test sugárzására, ha ismerjük az adott test spektrális abszorpcióképességét. A számí-



tásokat, amelyek sok tankönyvben megtalálhatók, nem részletezzük, csak az eredményt közöljük. Az egységnyi felület által a felületre merőleges irányban, egységnyi térszögben és hullámhossz-intervallumban kisugárzott teljesítmény:

$$I_{\lambda}d\lambda = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{kT\lambda}} - 1} d\lambda, \quad (1.1)$$

ahol  $c$  a fénysebesség,  $h$  a Planck-állandó,  $k$  a Boltzmann-állandó,  $T$  az abszolút hőmérséklet. Ezt az összefüggést Planck-formulának is nevezik. A Planck-formula integrálásával kapjuk Stefan–Boltzmann-törvényt, ami szerint egy  $T$  abszolút hőmérsékletű fekete test egységnyi felülete által kisugárzott teljesítmény:

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

ahol

$$\sigma = \frac{4\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-8} W m^{-2} K^{-4} \quad (1.2)$$

A mérési feladat a Stefan–Boltzmann-törvény igazolása és a  $\sigma$  állandó megmérése.

### 1.3. Hőmérsékletmérési módszerek

Az előttünk álló feladatok egyik lényeges része a nagyon pontos hőmérsékletmérés. Hőmérsékletet a hagyományos higanyos, vagy alkoholos folyadékos hőmérőkön kívül, többek között ellenállás-hőmérővel, termoelemmel vagy pirométerrel mérhetünk. Az ellenállás-hőmérők anyaga alacsony hőmérséklet detektálására félvezető vagy szén, magasabb hőmérsékletre az egyik legszélesebb körben alkalmazott fémhőmérő a platina hőmérő. A vékony platina szálat hengeres vagy lapos kerámiatokba helyezik el. Mérésekben leggyakrabban  $0^{\circ}C$ -on  $100\Omega$ -os ellenállás-hőmérőt használunk. Érzékenysége kb.  $0,35 \Omega/^{\circ}C$ , és hőmérséklet-ellenállás függvénye jól közelíthető másodfokú polinommal. Pontos méréseknél az ellenállás-hőmérőket úgynevezett négy pontos elrendezésben használják, így lehet kiküszöbölni az árambevezető huzalok ellenállását. A két árambevezető kontaktus mellett közvetlenül a hőmérő lábán mérjük az ellenálláshőmérőn árammal és az ellenállással arányos feszültségét. Tehát áramgenerátort használva, a hőmérséklet a feszültséggel arányos. Az érzékenységet nem lehet az áram növelésével fokozni, mert a túl nagy áram miatt a hőmérő melegedne.

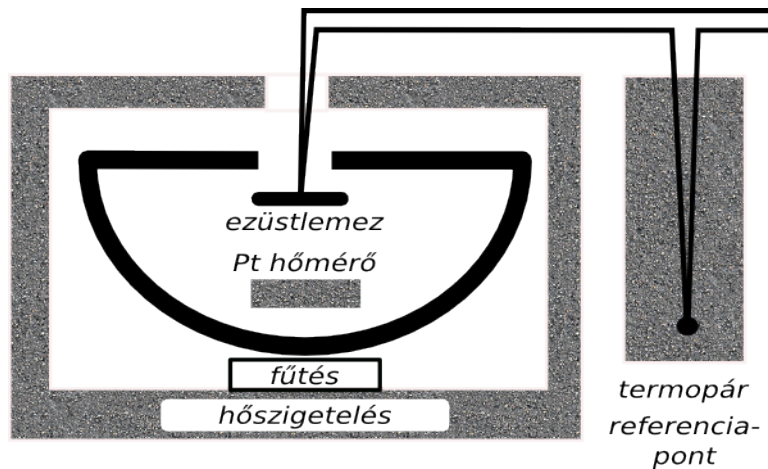
A termopár vagy termoelem két különböző anyagú fémdrót, amelyek végeit összehesztik és az egyik szálat középen elvágják. Ha a hegesztési pontok hőmérséklete különböző, akkor a vágási pontoknál a hőmérséklettel arányos feszültség keletkezik. A feszültség-hőmérsékletkülönbség függvény szintén magasabb rendű polinommal írható le. A termopárok kis tömegű anyagok hőmérsékletének mérésére különösen alkalmasak, mivel vékony drótból készíthetők, hőkapacitásuk ezért kicsi. Alkalmazásukat viszonylag

kis érzékenyséjük korlátozza, a legérzékenyebb termopárok  $50 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$  nagyságrendűek. Hangsúlyozandó, hogy az ellenállás-hőmérő abszolút hőmérsékletet mér, a termopár pedig hőmérséklet különbséget. Ezért az egyik végpontját más módszerrel megmért hőmérsékletű hőtartályba helyezik és a valódi hőmérséklet a referencia hőmérséklet és a termopár különbségi hőmérsékletének összege. A pirométerrel izzó anyagok hőmérsékletét határozhatjuk meg. Működési elve, hogy egy távcsőhöz hasonló optikai eszközt a céltárgyra irányítjuk és egy távcsőben lévő referencia szálát elektromosan úgy izzítunk fel, hogy azonos legyen a két szín. A műszer skáláján a referenciaszál hőmérséklete leolvasható. Tulajdonképp itt a referenciaszál ellenállását olvassa le a műszer. Nyilvánvaló, hogy ez a mérési mód kissé szubjektív, mert a szem nem tökéletes mérőeszköz.

## 1.4. Mérőberendezés

Először a Stefan–Boltzmann-törvény azon állítását ellenőrizzük, hogy a kisugárzott teljesítmény az abszolút hőmérséklet negyedik hatványával arányos. Vegyük fel egy wolframszál izzó feszültség-áram karakterisztikáját. Az izzószál vákuumban van, ezért a felvett elektromos teljesítmény, csak hőszugárzás formájában adódik le. Van némi hőelvezetés az izzószálhoz vezető drótokon, de ez elhanyagolható. A felvett elektromos teljesítmény  $P = UI$ , ahol  $U$  az izzó feszültsége,  $I$  az izzószál árama. Az izzó hőmérséklete az izzó  $R = U/I$  ellenállásából határozható meg. Rendelkezésünkre áll a wolfram fajlagos ellenállás-hőmérséklet függvénye, amit text-file formában a mérő számítógépből letölthető. Sajnos az izzószál geometriai mérete pontosan nem ismert ezért a következő eljárást alkalmazzuk. Előzetesen a HP multiméter négy pontos ellenállásmérés üzemmódjában megmérjük a szobahőmérsékleten közelítőleg  $4 \Omega$  ellenállású izzószál pontos ellenállását,  $R_0$ -t és a digitális hőmérővel a környezet hőmérsékletét,  $t_0$ -t. A műszer mérőárama milliamper, ami nem befolyásolja jelentősen a szál hőmérsékletét. Normálja az  $R_0$ -lal az  $R_t = U/I$  értékeit. Ezáltal van egy  $P_t = f(R_t/R_0)$  függvénye, ahol  $R/R_0$  csak a hőmérséklettől függ, mert a geometriai tényezők nem változnak. A mellékelt hőmérséklet-fajlagos-ellenállás táblázatból válassza ki, vagy interpolációval határozza meg a  $t_0$ -hoz tartozó  $\rho_0$ -t és ezzel osztva a  $\rho_t$ -t. Így rendelkezésre áll a  $\rho_t/\rho_0$  mint a hőmérséklet függvénye. Mivel minden  $t$  hőmérsékletnél  $R_t/R_0 = \rho_t/\rho_0$ , ezekkel a lépésekkel megkapja a különböző  $P$  értékekhez tartozó hőmérsékleteket. Ha ábrázolja a teljesítmény logaritmusát a kelvinben mért hőmérséklet logaritmusának függvényében, akkor a kapott egyenes meredeksége a  $T$  hatványkitevője.

$\sigma$  meghatározása az 1. ábrán látható mérőberendezéssel történhet. Kívülről hőszigetelt elektromos kályhába, kormozott belső falú zárt fémedényt teszünk, amelyen kis nyílás van. A fémedényt  $T_k$  hőmérsékletre fűtjük fel. A felfűtés után az edény belsejébe egy detektort helyezünk. A detektor kisméretű kormozott vékony fémlap, melyre termoelemet hegesztettünk. A termoelemreferencia pontja ismert hőmérsékletű hőtartályban van, ami egy olajjal töltött termosz.



1.1. ábra. A mérőberendezés

A kormozott edényt és detektort feketetestnek tekinthetjük. A  $T$  hőmérsékletű detektort az  $F$  felületével arányos  $P = F\sigma(T_k)^4$  teljesítmény melegíti, de közben sugároz is. A  $c$  fajhőjű és  $m$  tömegű detektor hőmérsékletének változását az alábbi összefüggés írja le:

$$cm \frac{dT}{dt} = F\sigma(T_k^4 - T^4) \quad (1.3)$$

A fenti összefüggés nem tartalmazza a detektor hőmérséklet változását okozó összes tényezőt. Ezek a termopár drótjainak hővezetése és a detektorral érintkező levegő hőátadása. Az előbbi arányos a drótok keresztmetszetével és a szonda és a külső környezet közti hőmérsékletkülönbséggel. A levegő hőátadási tényezője arányos a szonda felületével és a kályha levegőjének (ami közelítőleg a kályha hőmérséklete) és a szonda hőmérsékletének különbségével. Ha a detektor a sugárzási térben van, akkor ez az utóbbi tag jelentős lehet, mert a detektor hideg, így a hőmérsékletkülönbség nagy, viszont a drótok hővezetése elhanyagolható. Összességében ez azt jelenti, hogy az (1.3) egy  $T$ -vel arányos és egy konstans taggal egészül ki. Ezt figyelembe véve:

$$\sigma = \frac{1}{F(T_k^4 - T^4)} \left( mc \frac{dT}{dt} + \alpha_1 T + \alpha_0 \right) \quad (1.4)$$

ahol  $\alpha_1$  és  $\alpha_0$  egyenlőre ismeretlen állandók. Az (1.4) egyenlet szerint tehát a detektor paramétereit, tömegét, fajhőjét ismerni kell. Ejtsünk pár szót a szonda anyagáról. A szonda jó hővezető legyen és vékony, hogy a felületén és a belsejében azonos legyen a hőmérséklet, a tömege nagy legyen a termopár tömegéhez viszonyítva, és hegeszthető legyen. Ezeknek a feltételeknek jól megfelel az ezüst, esetleg réz és az alumínium, bár az utóbbira nehezen hegeszthető a termopár. A  $\sigma$  meghatározásához mérni kell a kályha hőmérsékletét és a szonda hőmérsékletét, valamint annak változását. Mivel a kályha

hőmérséklete negyedik hatványon szerepel, fontos a pontos hőmérsékletmérés. A kályha falára rögzített platinahőmérőt egy elektronika 3 mA-es árammal látja el. Az (1.4) alapján látható, hogy a kályha hőmérséklete mellett, a szonda hőmérsékletét kell mérni és nemcsak a hőmérsékletét, hanem a hőmérsékletváltozást is, hisz a hőmérséklet időbeli deriváltjára van szükségünk. A megfelelő mérőeszköz kiválasztása előtt végezzünk előzetes kalkulációt. Ha detektornak egy  $1 \text{ cm}^2$  felületű, 1 gramm tömegű ezüst lapkát választunk és a kályha  $400 \text{ }^\circ\text{C}$  hőmérsékletű, akkor az első másodpercekben a detektor hőmérsékletváltozása  $10 \text{ }^\circ\text{C/s}$  nagyságrendbe esik. Ezért a mintavétel sebessége század-másodperc kell, hogy legyen. Ennyi idő alatt, a hőmérsékletváltozás kisebb, mint  $0,1 \text{ }^\circ\text{C}$ , ami azt jelenti, hogy a termopár feszültségváltozása vas-konstantán termopárt használva összességében  $5 \text{ mV}$  nagyságrendű, de mikrovolt nagyságú jelváltozásokat kell mérnünk század-másodpercenként. Léteznek ilyen érzékenységgű voltmérők, de azok mérési ideje lassabb, ezen kívül legalább 1000 adatot kell tárolni. A tárolási gondot és a mintavételi sebességet megoldhatjuk egy A/D analóg-digitális konverter kártyával, ami vagy a számítógép belső kártyája, vagy külső USB, vagy egyéb csatlakozóval köthető az adatgyűjtő mérésvezérlő számítógéphez. A probléma, hogy egy 12 bites  $\pm 1 \text{ V}$  méréshatárú A/D konverter  $2 \text{ mV}$  felbontású. Ebből következik, hogy a termopár jelét erősíteni kell, azaz, legalább egy 500-szoros erősítőt kell használni. Az A/D konverter kártyáknak több feszültség bemenetük van, és általában elhelyeznek rajta D/A, azaz digitális- analóg konvertert. Ez utóbbi alkalmas lesz a kályha hőmérsékletének szabályzására is. A kályhát hálózati feszültséggel fűtjük. A fűtőteljesítmény szabályzását nem a kályhára juttatott feszültség értékének változásával, hanem az időegységre jutó fűtési idő változtatásával érjük el. Ez azt jelenti, hogy mondjuk 10 másodpercenként leolvassuk a kályha hőmérsékletét, és ettől függően a következő 10 másodpercben mondjuk 3 mp-ig fűtünk és 7 mp-ig kikapcsoljuk a fűtést. A fűtési/kikapcsolási idő arányát szoftveresen vagy analóg módon határozhatjuk meg. A mérésben a mérésvezető megadja, hogy milyen hőmérsékletre állítsák be a kályhát. Ehhez a mellékelt platina hőmérséklet-ellenállás táblázatból számítsák ki a kályha üzemi hőmérsékletén a platina ellenállását. Mivel a platinát 3 mA-es áramgenerátor hajtja, kiszámítható, hogy mennyi a platinán lévő feszültség, amikor a kályha épp eléri a kívánt hőmérsékletet. Elektronikai szempontok miatt ennek a feszültségnek az ötszörösét használjuk a szilárdtestrelét vezérlő komparátor egyik bemenetén, ugyanis a hálózati feszültséget a kályhára egy szilárdtest relének nevezett eszköz kapcsolja, amit digitális jellel vezérelnek. Ezt a feszültséget kell beadni a komparátor másik bemenetére referencia értéként. A program digitekben kéri ennek a feszültségnek megfelelő digitszámot. A D/A konverter 5 V-os 12 bites.

## 1.5. Kalibrálás

Mivel kis feszültségeket erősítve és pontosan kell mérni, ezért mérés előtt kalibrálni kell az erősítőt és az A/D konvertert. A HP multiméter nagyon pontos, de azért érdemes

ellenőrizni. E célból kösse a feszültségbemenetére mindkét polaritással a mellékelt Weston normálemet. A normálem standardnak tekinthető feszültsége 1,018 V, a további jegyek a hőmérsékletétől függenek, de számunkra elegendő ez a pontosság. Rövidzárban is ellenőrizze a 0 értéket. Az erősítő bemenetére kapcsolja a mellékelt kifestültségű kalibráló tápegységet, mérje meg a HP-vel a bementeti és egy másik, szintén a normálemmel ellenőrzött multiméterrel az erősítő kimenetének jeleit. Ez lesz az első kalibráció, az erősítés jól közelíthető olyan lineáris függvénnyel, ami nem az origón megy át. Második kalibrációs feladat az A/D konverter kalibrálása. Ehhez az A/D konverter megfelelő bemenetét kösse  $\pm 1$  V változtatható feszültségű tápegységre és különböző bemeneti értékekhez tartozó digitális értéket a számítógép kijelzi. Minkét méréshez van a vezérlő számítógépben segédprogram. Ezzel rendelkezésre áll egy feszültség-digitális érték kalibráció, ami szintén lineáris lesz. A következő lépés a kályha hőmérsékletének beállítása a D/A konverter segítségével. A monitoron ellenőrizni tudja a kályha hőmérsékletét. A kályha hőmérséklete nem állandó, hanem egy kicsit hullámzik a beállítandó hőmérséklet körül. Mikor már közelítőleg stabil, olvassa le a maximális és minimális hőmérsékleteket. Ezek átlaga a kályha hőmérséklete és a hiba az átlagtól való eltérés. Természetesen a hőmérséklet digitekben jelenik meg, ugyanis a A/D konverter méri a platina hőmérő feszültségét. Ezt a második kalibrációval feszültséggé alakítja és elosztva a 3mA-rel, megkapja a platinaellenállás értékét. Készítsen legalább másodfokú polinom illesztést a platina hőmérséklet-ellenállás értékeire és ebből tudja meghatározni a kályha hőmérsékletét. A mérőprogrammal most már fel lehet venni a szonda hőmérséklet változását. Ne feledje el az erősítő bemenetére rákapcsolni a detektor kivezetését. Indítsa el a mérőprogramot és a hangjelzés után tegye be a szondát a kályha nyílásába. 5 másodperc mérés effektív mérésre van szüksége, de a be- és kivételre összességében 30 másodperce van, tehát nem kell sietni, viszont óvatosan kezelje a szondát, mert letörhet. Most egy file-ban van tárolva a szonda hőmérsékletváltozása az idő függvényében, másodperc és digitszám van a két oszlopban. Első lépésként válassza ki azt az intervallumot, amit elemezni akar. A második kalibráció segítségével a digitek alakítsa át feszültséggé. Ez az erősített termopár feszültség, amit az első kalibráció segítségével visszaalakít valódi termofeszültséggé. A vas-konstantán táblázat segítségével alakítsa át ez utóbbit hőmérsékletté. Ehhez hozzáadva a referencia hőmérsékletet és 273 K-t, minden  $t$  időpillanathoz megvan a hozzátartozó  $T$  hőmérséklet Kelvin fokban számolva. A következő lépés a numerikus deriválás. Itt képezheti az egymás melletti hőmérséklet-különbségeket, osztva az időkülönbséggel, de ez nem lesz sima függvény. Jobb polinomot illeszteni a  $t - T$  párokra, majd ezt a függvényt analitikusan deriválni. Ezzel bármilyen  $T$ -hez megkapja a hozzátartozó derivált értékét. Most már megkapható  $\sigma$  az (1.4) alapján. Vagy három ismeretlenes egyenletet oldunk meg  $\sigma, \alpha_1, \alpha_0$  ismeretlenekre kiválasztva három tetszőleges  $T - dT/dt$  párt, de megpróbálkozhatunk függvényillesztéssel is. Utóbbinál az (1.4) alapján

$$\frac{dT}{dt} = \sigma \cdot T^4 + p_2 \cdot T + p_1$$

három paraméteres illesztést végezzen!

## 1.6. Gyakorló kérdések

1. Feszültség- vagy áramgenerátorral hajtáná meg az izzót?
2. Az izzó feszültség-áram karakterisztikájánál vagy az áramot vagy a feszültséget méri pontatlanul. Mikor követ el kisebb hibát?
3. Hogy tudja meghatározni az izzó hőmérsékletét?
4. Mi az előnye és hátránya a platina és a termopár hőmérőknek?
5. Milyen hőhatások érik a szondát és mennyire elhanyagolhatók ezek a hatások?
6. Hogy méri meg a Stefan–Boltzmann-állandót?
7. Miért nem kell kalibrálni a D/A konvertert?
8. Mit jelent, ha egy konverter 12-bites?
9. Milyen adatok kellenek a szondáról?
10. Milyen módon lehetne kiküszöbölni a levegő hatását?

## 1.7. Mérési feladatok

- Illesszen megfelelő függvényt a wolfram fajlagos ellenállás-hőmérséklet kapcsolatra!
- Illesszen megfelelő függvényt a platinahőmérő ellenállás-hőmérséklet kapcsolatra!
- Illesszen megfelelő függvényt a vas-konstantán termofeszültség-hőmérséklet kapcsolatra! Vizsgálja meg, miért nem jó a másodfokú polinom illesztés!
- Mérje meg az izzószál feszültség-áram karakterisztikáját és ellenőrizze a Stefan–Boltzmann-törvényt!
- Kalibrálja az erősítőt és az A/D konvertert!
- Határozza meg legalább 3 kályhahőmérsékleten  $\sigma$ -t!
- Becsülje meg, ha a levegő hőátadási tényezője 50, milyen lenne vákuumban a  $t - T$  görbe megfelelő szakasza!

## 2. fejezet

# Az elemi töltés meghatározása (Kovács György)

### 2.1. Bevezetés

Egyes elektromos jelenségeket már az ókorban is ismertek, de az elektromossággal kapcsolatos igazán tudományos eredmények inkább a 18-19. századra jellemzők. Az elektrolízis tanulmányozása vezetett arra a következtetésre, hogy az atomok töltött részecskékből állnak. A töltéssel rendelkező ionok az elektródákon leadva a töltésüket, semlegessé válva távoznak. Faraday törvényei szerint bármilyen ion grammegyenérték súlynyi mennyiségének semlegesítéséhez ugyanannyi töltésmennyiség szükséges, számértékben 96500 C és az Avogadro törvény alapján, miszerint bármilyen egy vegyértékű anyag grammegyenérték súlynyi mennyiségében ugyanannyi atom van ( $N_A = 6 \cdot 10^{23}$ ) következik, hogy az elektromosságnak létezik egy elemi egysége, ami épp az elektrontöltéssel egyezik meg. Az elektrolízis alapján kiszámított elemi töltést sok ion töltésének átlagából kapták, és ezért fontos volt, hogy egy-egy atom egyedi töltéséből határozzák meg az elemi töltést. Az elektron felfedezése Thomson nevéhez fűződik, de az elemi töltés megmérése és így az elektron töltésének pontos meghatározását Robert Millikan 1910-ben elvégzett kísérlete adta. Millikan többek közt ezért a kísérletéért kapott 1923-ban Nobel-díjat. Gyakorlatilag mi is ezt a mérést fogjuk követni, hogy meghatározzuk az elemi töltést.

### 2.2. Mérési elv

Homogén, de változtatható nagyságú elektromos térbe töltött olajcseppet juttatunk. A cseppek mozgását megfigyelve, azaz a sebességét mérve, meghatározható az olajcsepp töltése. Bármilyen legyen is az olajcseppek töltésének előjele, be fogjuk látni, hogy az egy elemi töltésmennyiségnek egész számú többszöröse. Legyen egy kis olajcsepp tömege  $m$ . Feltételezzük, hogy a kis cseppünk a felületi feszültség miatt gömb alakú.

Ha kikapcsoljuk az elektromos teret, a mozgó olajcseppre a gravitációs erő, a levegő felhajtó ereje és a súrlódási erő hat. Ez utóbbit a mozgó cseppnek a levegő molekuláival való ütközés okozza. Ha a csepp mérete jóval nagyobb, mint a levegő molekulák szabad úthossza, a súrlódási erő a Stokes-féle fékezőerőből határozható meg, ami

$$F = 6\pi\eta r v, \quad (2.1)$$

ahol  $\eta$  a belső súrlódási együttható,  $v$  a sebesség és  $r$  a sugár. A sebességgel arányos fékezőerő miatt a csepp egy idő után csak függőlegesen mozog egyenletes sebességgel. A nehézségi erővel egyensúlyt tart a levegő felhajtóereje és a súrlódási erő. Az olaj illetve levegő sűrűségét  $\rho_o$ -val illetve  $\rho_l$ -lel jelölve, fennáll

$$4/3\pi r^3(\rho_o - \rho_l)g = 6\pi\eta r v_0,$$

amiből meghatározható a csepp sugara:

$$r = \sqrt{\frac{9}{2} \frac{\eta v_0}{(\rho_o - \rho_l)g}}. \quad (2.2)$$

Ha az egymástól  $d$  távolságra lévő lemezekre akkora  $U$  feszültséget kapcsolunk, hogy a cseppek lebegjenek, akkor az elektromos térerősség a  $q$  töltésű cseppre  $qU/d$  erőt fejt ki és ez az erő tart egyensúlyt a nehézségi erővel és a felhajtó erővel. Ilyenkor nincs súrlódási erő, a

$$4/3\pi r^3(\rho_o - \rho_l)g = qU/d$$

összefüggésből  $r$  behelyettesítésével kapjuk, hogy

$$q = \frac{1}{U} d \frac{4}{3} \pi \left( \frac{9}{2} \eta v_0 \right)^{\frac{3}{2}} [(\rho_o - \rho_l)g]^{-\frac{1}{2}}.$$

A gyakorlatban elég nehéz úgy beállítani a térerősséget, hogy a töltés nem mozog, ezért inkább a dinamikus módszert alkalmazzák, ahol a csepp vagy a gravitációs térrel ellentétes irányba mozog  $v_{fel}$ , vagy a gravitációs tér irányába  $v_{le}$  állandó sebességgel. Csak azokat a töltéseket kell tekinteni, amelyekre ható gravitációs erő kisebb mint  $qU/d$ , ellenkező esetben ugyanis rövid idő alatt kifutnak a megfigyelő mikroszkóp látóteréből. A megfelelő

$$qU/d = 4/3\pi r^3(\rho_o - \rho_l)g + 6\pi\eta r v_{fel}$$

$$qU/d = -4/3\pi r^3(\rho_o - \rho_l)g + 6\pi\eta r v_{le}$$

összefüggésekbe  $r$ -t behelyettesítve és  $q$ -t kifejezve kapjuk a



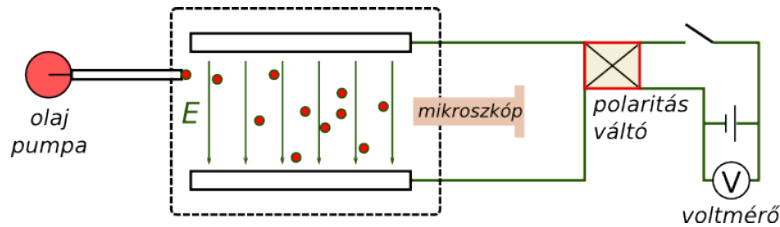
$$q = \frac{1}{U} d \frac{4}{3} \pi \left( \frac{9}{2} \eta v_0 \right)^{\frac{3}{2}} [(\rho_o - \rho_l) g]^{-\frac{1}{2}} + \frac{6\pi\eta d}{U} v_{fel} \left( \frac{9}{2} \frac{\eta v_0}{(\rho_o - \rho_l) g} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$q = -\frac{1}{U} d \frac{4}{3} \pi \left( \frac{9}{2} \eta v_0 \right)^{\frac{3}{2}} [(\rho_o - \rho_l) g]^{-\frac{1}{2}} + \frac{6\pi\eta d}{U} v_{le} \left( \frac{9}{2} \frac{\eta v_0}{(\rho_o - \rho_l) g} \right)^{\frac{1}{2}}$$

összefüggéseket.

## 2.3. A mérés menete

### 2.3.1. A mérőberendezés



2.1. ábra.

A 2.1. ábrán látható mérőberendezés két egymástól szigetelő távtartóval ellátott fémkorong gyakorlatilag egy kondenzátor, melyet átlátszó plexi kamrába helyezünk. A fémlapokat a plexi kamrán átmenő elektródákkal látjuk el, és ezeket csatlakoztatjuk a változtatható feszültségű tápegységhez. A plexi kamra oldalfalán kicsi lyuk van, amelyen keresztül egy gumipumpa segítségével permetezzük be a porlasztott olajcseppeket. A beáramló olajcseppek porlasztáskor töltötté válnak, és a mérőkamrában elvesztik kinetikus energiájukat. A cseppeket oldalról egy lámpa segítségével világítjuk meg, és szemből nézzük egy skálabeosztással ellátott mikroszkópon. Valójában a cseppeket úgy észleljük, mint amikor egy szobába besütő napfény hatására oldalról látjuk a levegőben táncoló por-szemcséket. A lámpa fényének nagy része keresztülmegy a lemezek közt, egy kis részük visszaverődik és megvilágítja a mikroszkóp skáláját. A tápegység főkapcsolóját bekapcsolva a lámpa azonnal ég, és külön kapcsolóval kapcsoljuk a kondenzátorra a nagyfeszültséget (vigyázat 600 V). A feszültség egy potenciométerrel folytonosan szabályozható és értékét a tápegységen lévő digitális kijelző mutatja. Egy másik kapcsoló a polaritás váltó, aminek segítségével a lemezekre ellentétes polaritással kapcsolhatunk feszültséget. A mikroszkóp tubusának mozgatásával különböző pontok képét állítjuk élesre, gyakorlatilag azonban minden helyzetében található jó néhány olyan csepp, aminek a képe éles. A mikroszkóp nézőkéjében a cseppek mozgásának vizsgálatára vonalbeosztás található. A vonalbeosztást viszont mindenki a saját szemére élesítse az objektív forgatásával.

A mérést a tápegység bekapcsolásával kell kezdeni. Ezután a vonalbeosztás élesítése következik, majd a porlasztó pumpájának két-háromszori pumpálásával olajcseppeket juttatunk a mérőkamrába. Ellenőrizzük, hogy a porlasztó a mérőkamra lyukánál legyen. A porlasztás után azonnal rengeteg fénylő pontot látnak, amik fokozatosan kimennek a látómezőből. Érdeemes a porlasztás után bekapcsolni a teret és kiválasztani egy nem túl gyorsan mozgó pontot, és kipróbálni, hogy a polaritás változtatásával a cseppet bent tudjuk-e tartani a látómezőben, a cseppet fel-le mozgatva a polaritás kapcsoló segítségével. Ha ez sikerült, mérjük meg a csepp sebességét tér nélkül és legalább az egyik irányú elektromos térenél. A sebességmérés vizuális megfigyelésen alapszik, ezért a mérés pontossága érdekében legalább 10 beosztás megtételéhez tartózkodó időt detektáljunk a mellékelt stopperóra segítségével. Ez a dinamikus módszer. Itt minden mérés után ellenőrizzük a lemezekre kapcsolt feszültséget, amit érdemes 600 volt körüli értéknek választani. A statikus eljárás elvben egyszerűbb, de kivitelezni nehezebb. Ott szintén meg kell mérni tér nélkül a sebességet a sugár meghatározásához, majd olyan teret kell beállítani, aminél a cseppecske áll. A könnyebbség, hogy itt nem kell sebességet mérni csak a tér értékével arányos feszültséget leolvasni, azonban a gyakorlatban nagyon nehéz eldönteni, hogy a csepp áll vagy csak lassan mozog. Itt jegyezzük meg, hogy polaritás váltáskor előfordul, hogy a cseppecske töltése megváltozik. Az első méréseket Millikan úgy végezte, hogy röntgensugárzással megváltoztatta a csepp töltését, de ez a változás csak egy-két elemi töltés volt. Mi biztonsági szempontból ezt nem követhetjük, de ma már rendelkezésünkre áll számítógépes kiértékelési lehetőség. Bár a statikus eljárás elvileg egyszerűbb, gyakorlati kivitelezése nehéz, ha lassú cseppekről van szó, ezért a cseppek töltésének dinamikus eljárással történő meghatározása javasolt. A mérési feladatunk első része tehát az, hogy meghatározzuk 25-30 csepp sebességét tér nélkül és elektromos térben.

### 2.3.2. A cseppek töltésének meghatározása

A bevezetőben ismertetett képlet szerint legalább egyik irányú térben és tér nélkül is meg kell a sebességeket határozni, de a képletben szereplő egyéb mennyiségek értéke is változhat, ami miatt kiegészítő számításokat is kell végeznünk. Mint említettük a sebességmérés relatív pontossága nő, ha a részecskék útja nagy, legalább 10 egység. A sebesség meghatározáshoz ismernünk kell az objektív skálabeosztásának értékét. A LEYBOLD készülék egy skálaegysége  $5,333 \cdot 10^{-5}$  m, amit a mellékelt etalonnal ellenőrizzen.

A térerősség  $U = Ed$  képletében szereplő  $d = 6$  mm. olaj sűrűsége:  $875 \text{ kg/m}^3$  levegő sűrűsége:  $1,29 \text{ kg/m}^3$  utóbbi relatív sűrűsége a hőmérséklettel sokkal jelentősebb mértékben változik, mint az olajé, de ezt a változást az olaj és levegő sűrűsége közti nagy különbség miatt nem fontos figyelembe venni.

A levegő  $\eta$  belső súrlódási együtthatója szintén hőmérsékletfüggő, és korrekciót kell alkalmazni.

$$\eta_T = \eta_0 \sqrt{\frac{T}{T_0} \frac{1 + \frac{C}{T_0}}{1 + \frac{C}{T}}},$$

ahol  $\eta_0 = 1,708 \cdot 10^{-5}$  Pas ,  $C = 113$  K ,  $T_0 = 273$  K és  $T$  a levegő Kelvinben mért hőmérséklete. Még egy korrekciót kell használni. Az (2.1) Stokes-féle súrlódási törvény csak akkor igaz, ha a csepp mérete nagy a közeg molekuláinak szabad úthosszához viszonyítva. Ha ez nem áll fenn, akkor (2.1) a következő képen módosul:

$$F_s = 6\pi\eta r v \frac{1}{1 + \frac{K}{pr}}, \quad (2.3)$$

ahol  $K = 8,26 \cdot 10^{-3}$  Pam és  $p$  a külső légnyomás. A korrekciót önkonzisztens módon végezzük. A (2.2)-ből meghatározott sugarat behelyettesítjük (2.3)-ba és meghatározzuk a  $F_s$  első korrekcióját. Ezt (2.2) bal oldalába helyettesítve  $r$  első korrekcióját kapjuk, amit (2.3)-ba helyettesítve  $F_s$  további korrekcióját kapjuk. Gyakorlatban elég az első korrekció a súrlódási erőhöz, magasabb korrekciót csak nagyon kis sugaraknál kell alkalmazni.

### 2.3.3. Az elemi töltés meghatározása

Ha sikerült 25-30 csepp töltését meghatározni, akkor a következő feladat meghatározni az elemi töltést. Elvileg meg kellene keresni a megmért töltések legnagyobb közös osztóját. Az egyes cseppek töltése 1-20-szeres értéke az elemi töltésnek, vannak ugyan kiugró esetek, de ezek első körben elhanyagolhatók. Ha nem lenne mérési hiba, azaz minden csepp töltését pontosan mérjük, akkor az egymáshoz közeli töltések értékeit kivonva egymásból és ezt a műveletet esetleg a különbségekkel megismételve a különbségek egy meghatározott értéknél nem lennének kisebbek, a 0-t kivéve és ez lenne az elemi töltés. A baj az, hogy mindig van mérési hiba. Millikan röntgensugárral változtatta meg a cseppek töltését, ami egy- két elektronnyi töltésváltozással járt és ezekből számolt, de mi ezt sugárvédelmi előírások miatt nem tehetjük. Előfordulhat, hogy nagyon nagy, néhány kilovoltos feszültséget kapcsolva a kondenzátorra és hirtelen irányt változtatva, a cseppekről leszakadhat töltés, de ez meg az átütés veszélye miatt nem célravezető. Ha azonban némi ügyeskedéssel és kitartással sikerül legalább 25 csepp töltését megmérni, rendelkezésre áll 25 adat ami az elemi töltés egészszámú többszörösének és egy véletlenszerű hibának az összege. Ezekből az adatokból meghatározható a legnagyobb közös osztó, azaz az elemi töltés értéke a következő módon. Legyen  $q_i$  a mért töltés és  $e$  az egyenlőre ismeretlen elemi töltés. Képezzük a következő függvényt.

$$f(x) = \sum_{i=1}^N \sin^2 \left( \pi \frac{q_i}{x} \right).$$

Ha  $q_i$ -k pontosan egész számú többszöröse lennének  $e$ -nek, akkor a függvény  $e$ -re és  $e$  bármely egész számmal osztott értékére 0-t adna, a szumma minden tagja zérus. Ha a

valóságos esetet nézzük ott  $q_i/e$  közelítőleg egészek némi hibával, így a függvény az  $x = e$  helyen helyi minimumokkal rendelkezik. Ugyancsak minimumot kapunk  $e/2, e/3, \dots$  helyeken és a minimumhelyek közül a legnagyobb lesz az elemi töltés.

## 2.4. Gyakorló kérdések

1. A Faraday-törvényekből, hogy határozható meg az elemi töltés?
2. Mi a Stokes-féle súrlódási törvény?
3. Mi a Stokes-féle súrlódási törvény érvényességének feltétele?
4. Hogyan méri meg a porlasztott olaj cseppek sugarát?
5. Mi a statikus és dinamikus módszer a cseppek töltésének meghatározására?
6. Miért kell a hőmérsékletet és a nyomást megmérni?
7. Miért és hogyan kell a cseppek sugarát pontosabban meghatározni?
8. Miért nem lehet két különböző irányú térben mért sebességből meghatározni a csepp töltését?
9. Hogyan tudná meghatározni az elemi töltést a cseppek töltéséből?
10. Milyen  $q/m$  fajlagos töltésű cseppeket tud nehezen detektálni?

## 2.5. Mérési feladatok

1. Kalibrálja a mikroszkóp nagyítását!
2. Mérje meg legalább 25 csepp sebességét tér nélkül és térben!
3. Határozza meg a cseppek sugarát!
4. Számítsa ki az önkonzisztens módszerrel második rendig a cseppek korrigált sugarát és a korrigált súrlódási erőt!
5. Becsülje meg, hogy milyen értéknél kell a cseppek sugarának nagyobbnak lenni 1%-os illetve 0,1%-os pontosság eléréséhez első és második korrekciót alkalmazva!
6. Számolja ki a cseppek töltéseit!
7. A kiszámolt értékeket helyezze el egy számegyenesen demonstrálva, hogy a töltések a hibán belül csak diszkrét értékeket vehetnek fel!

8. Határozza meg az elemi töltést!

## 3. fejezet

# Atomok gerjesztési potenciálja (Kovács György)

### 3.1. Bevezetés

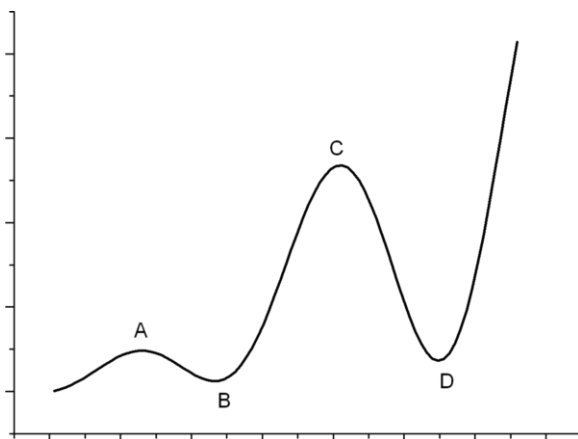
Az atomok belső szerkezetének megismerése mindig izgalmas kérdés volt, de csak az 1900-as évek elején születtek meg azok a modellek és elméletek, amelyek kielégítően magyarázták az atom szerkezetét. Ugyan Niels Bohr 1913-ban publikált atommodellje a mai ismereteink szerint már nem teljesen kielégítő, mégis elég sok jelenség leírására alkalmas. A modell egyik legfontosabb állítása az, hogy az atom elektronjai olyan pályákon keringenek, amelyek energianívói diszkréték és egy elektron alacsonyabb energiaszint-ről magasabb szintre juttatásához a két szint különbségének pontosan megfelelő energia szükséges. A spektroszkópiai kísérletek mellett a Bohr-modell nagyon fontos kísérleti bizonyítéka James Franck és Gustav Hertz német fizikusok 1914-ben Berlinben elvégzett mérése, amelyért 1925-ben Nobel-díjat kaptak. A mérés során tulajdonképpen ezt a kísérletet ismételjük meg annyi bővítéssel, hogy mi a neon atomok gerjesztési potenciálját is megvizsgáljuk, míg Franck és Hertz eredetileg csak higanyal mértek.

### 3.2. A Franck–Hertz-cső

A Franck–Hertz-cső egy módosított elektroncső, amelyben vákuum helyett a vizsgálandó anyag kisnyomású gáza vagy gőze van. Eredetileg az elektroncső elektronok vezérlésén alapuló eszköz, amely főleg az elektronikában egyenirányításra, és erősítésre szolgált. Elektródáit üvegburában helyezik el, és ez egyúttal védi a külső levegőtől is. Az elektroncsőben rendszerint egyetlen katód van, ezenkívül az elektroncső rendeltetésétől függetlenül további elektródák, de legalább még egy elektróda. A katód speciális anyaggal bevont elektróda, amelyet közvetlenül vagy közvetve fűtenek. A forró katódból termikus emisszió hatására kilépő elektronok zárt áramkör létrehozása esetén elérik az elektron-

cső másik végén elhelyezkedő elektródát, az anódot, és az anódba csapódva elektromos áramot hoznak létre, amely áramot a katód és az anód közé elhelyezett hálós szerkezetű elektródákkal módosítani lehet. Első közelítésben a Franck–Hertz-cső egy 3 elektródás cső, amiben kis nyomású neon gáz, illetve higany gőz és folyadék fázisa található. A neon gáz sűrűsége nem szabályozható, a higany gőz sűrűsége a cső melegítésével növelhető. Először vizsgáljunk meg egy anódból és katódból álló vákuumcsövet. Tételezzük fel, hogy a katódból kilépő elektronok sebességeinek statisztikus ingadozása elhanyagolható. Pozitív anódfeszültség esetén minden elektron eléri az anódot, és negatív zárófeszültséget alkalmazva nem lenne anódáram. Az áram erősen függ az anódfeszültségtől, aminek az oka, hogy a katódból kilépő elektronok a katód előtt tértöltést hoznak létre, és akadályozzák a katódból az elektronok kilépését. Ugyancsak befolyásolja az anódáramot a katód és az anód anyagának különbségéből származó kontaktpotenciál, valamint az elektronok kilépési munkáját csökkentő tér. Közelítőleg az anódáram a feszültség  $3/2$ -ik hatványával arányos. Ha az anódhoz közel beiktatunk egy  $\mathbf{g}_2$  gyorsító rácst, aminek kialakítása hálószerű, akkor a rácfszültséggel is vezérelhető az anódáram. A rácson keresztül haladó elektronok kinetikus energiája  $eU$ , a rácfszültség és az elektron töltésének szorzata. Az elektronok a rácson keresztül haladnak és elérik az anódot. Ha az anódot valamilyen potenciálra kötjük, akkor zárt áramkört alakítunk ki, és mérhetjük az anódáramot. A pozitív anód feszültsége gyakorlatilag nem befolyásolja az áramot, mert a vezérlést a rács veszi át. Az áram még akkor sem változik, ha a rács és az anód közt olyan kis ellenteret alakítunk ki, amely lassítja az elektronokat. Természetesen nagyon nagy ellentér esetén az elektronok nem tudják legyőzni a potenciálgátat, és nem érik el az anódot. Fontos megjegyezni, hogy ellentétben az ellenállásból és telepből álló áramkörrel, ahol az áram arányos a feszültséggel, itt más a helyzet. A fékező, vagy gyorsítótér ugyan megváltoztatja az elektronok sebességét, de időátlagot véve az áram állandó és csak a katódból kilépő elektronok számától függ. Azok az elektronok, amelyek nem érik el az anódot, a rácson keresztül zárják az áramkört. Igazándiból csak vákuumcsövek esetén igaz a fenti fejtegetés, gázzal töltött csövek esetén az elektron ütközik a gáz atomokkal. Gázzal töltött cső esetén, ha a gyorsító rácstra a katódhoz képest **kis** pozitív feszültséget kapcsolunk, ezáltal az elektronok kinetikus energiája egy kritikus értéknél kisebb, akkor az elektron a gáz atomokkal rugalmasan ütközik. Az ütközés következtében az elektron impulzusa jelentős mértékbe változhat, de kinetikus energiájának változása elhanyagolható. Nagyon sűrű gőz esetén a szabad úthossz lecsökken, az ütközések száma oly mértékben megnő, hogy az elektronok kinetikus energiája már észrevehetően csökken, és ha az anód a rácshoz képest negatív potenciálú, akkor az anódáram is csökken. A továbbiakban alacsony nyomású higanygőz vagy neongáz esetét vizsgáljuk, és kezdjük el a rács feszültségét növelni. A feszültség növekedésével az tapasztaljuk, hogy az áram egy maximumot elérve csökkenni kezd és további feszültség növelés után egy minimumot elérve ismét növekszik, és ez a rácfszültség növekedésével periodikusan ismétlődik, ahogy az **3.1.** ábrán látható. Az elektronok a rácfszültség növelésével elérnek egy akkora kinetikus energiát, hogy kölcsönhatva az atommal, képesek az atom egyik belső elektronját egy külső magasabb

energiájú állapotba juttatni. A jelenség egy rugalmatlan ütközéshez hasonló, az ütköző elektron energiát ad át a másik testnek, azaz a Hg vagy Ne atomnak, és közben energiát veszít. Az első maximum, az ábrán **A**-val jelölt pont, azt jelenti, hogy addig az elektronoknak éppen nincs még elegendő energiájuk, hogy a gáztomokat gerjesszék. A rácsfeszültség növekedésével az a rácstól való távolság a katód irányába, amelyen belül az elektronok a gerjesztéshez szükséges energiánál nagyobb energiával rendelkeznek nő és így a rugalmatlan ütközések száma is nő. Ha az anódra a katódhoz képest állandó negatív feszültséget kapcsolunk, az állandóság fontos, akkor az áramban csökkenés lesz látható, mivel az ütköző elektronok kinetikus energiája nem elég a záró potenciál legyőzéséhez. A gyorsító potenciál további növelése viszont azt eredményezi, hogy ugyan egyre több elektron ütközik rugalmatlanul, mert nő az a térfogat, ahol ütközhetnek, de ütközés után már az energiavesztés dacára is lesz annyi energiájuk, hogy legyőzzék a potenciálgátat. Ennek felel meg az ábra **B** pontja. A gyorsító feszültség növelésével azonban az elektronok energiája elegendő arra, hogy kétszer is ütközzenek, ekkor az energiájuk olyan mértékbe csökken, hogy nem tudnak a záró potenciál miatt eljutni az anódhoz, és ekkor jelenik meg a második maximum és minimum, a **C** és **D** pont. A további maximumok és minimumok jelenléte is így magyarázható.



3.1. ábra. A Franck–Hertz-cső rácsfeszültség–anódáram karakterisztikája

Felvetődik a kérdés, hogy miért csak az első gerjesztési potenciált detektáljuk, és van-e lehetőség magasabb gerjesztések vizsgálatára. Ha egy rácst használunk, és a rács feszültsége nagyobb, mint második gerjesztési potenciál, de az elektronok egy bizonyos útszakaszt akkor is olyan energiával tesznek meg, ahol az energiájuk még kisebb, mint a második, de meghaladja az első gerjesztési potenciál értékét. Ekkor az elektronok jelentős része a gáz atomjait első szintre gerjeszti és utána már nem képes gerjeszteni, vagy ha elég nagy a gyorsító potenciál, akkor többször is történik gerjesztés, de ismételten az első gerjesztési szintre. Magasabb gerjesztési potenciálok kiméréséhez Franck és Hertz két rácisos elrendezést használt. Még egy rácst kell elhelyezni a  $g_2$  és a katód közé. A  $g_1$

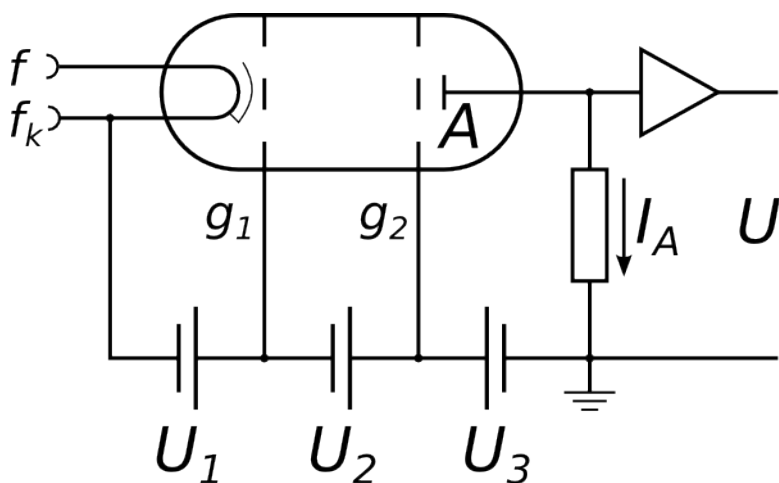


rács katódtól való távolságát úgy kell megválasztani, hogy ez a távolság kisebb legyen, mint az elektronok átlagos szabad úthossza. A második rácsot ugyanolyan potenciálra kapcsoljuk, mint az  $\mathbf{g}_1$ -et. Ekkor a katód és az  $\mathbf{g}_1$  közötti térrészben az elektronok felgyorsulnak és eléri a magasabb gerjesztéshez szükséges kinetikus energiát, és a két rács közti térrészben ütköznek. Természetesen az anód a rácsokhoz képest negatív potenciálú. Az elektronok a katód és  $\mathbf{g}_1$  közt csak jelentéktelen mértékben ütköznek. A rácsok közti távolságnak jóval nagyobbak kell lenni, mint az átlagos szabad úthossz így az ütközések a két rács közt történnek. Ebben az esetben a gyorsító feszültség-áram karakterisztika eltér az első ábrán látható görbétől. Itt is csúcsok és minimumok lesznek, de a csúcsok helye az első és második gerjesztési potenciál értékeinek lineáris kombinációja lesz, azaz  $a, 2a, a + b, 2b, 3a, 2a + b, 2b, \dots$  értékek esetén detektálunk csúcsokat, ahol  $a$  és  $b$  az első és második gerjesztési potenciál értékét jelentik. Itt jegyezzük meg, hogy az atomok csak rövid ideig maradnak gerjesztett állapotban, utána az alacsonyabb állapotba visszakerülő elektron az energiakülönbségnek megfelelő energiájú fotont bocsát ki, és így a gerjesztési energia spektroszkópiailag is meghatározható. Ha az ütköző elektron energiája elég nagy, képes ionizálni az atomot, azaz pozitív ion és egy további negatív elektron keletkezik. Az ionizáció megnöveli az anódáramot, de az ionok ellenkező irányba a katód felé mozognak, és a katódba csapódva tönkreteszik azt.

### 3.3. A mérés menete

A mérőberendezés fő része a Franck–Hertz-cső, amely speciális foglalatba van helyezve és a neonos csőnél a foglalat panelján feltüntetettük a elektródák neveit, higanyos csőnél pedig a banándugós kivezetéseken olvasható az elektródák neve. A cső vázlatát a 3.2. ábrán látható. A katód fűtése  $\mathbf{f}$  és  $\mathbf{f}_k$  pontok közt 6,3 V szabvány feszültséggel történik. Ezt a feszültséget fokozatosan adjuk a katódra, hogy meggátoljuk egy hirtelen feszültség-ugrásiából adódóan a fűtőszál elégetését. A csövek nagyon drágák és nem javíthatók.

A  $\mathbf{g}_2$  rács szolgál az elektronok gyorsítására, a neonos csőre 80 V, a higanyosra pedig 40 V maximális feszültség adható. A  $\mathbf{g}_1$  rács kétféle szerepet tölthet be. Ha az első gerjesztési szintet vizsgáljuk, akkor a tértöltés elszívására szolgál, és a második rács a gyorsító rács. A második esetben azonos potenciálra kötve, mint  $\mathbf{g}_2$ -t, a magasabb gerjesztési szintek kimérését teszi lehetővé. Ebben az esetben a rácsokra sosem szabad a gerjesztési szintnél nagyobb feszültséget adni a cső begyújtásának veszélye miatt. Lényegében az első gerjesztési szintek mérése esetén is nagy rácsfeszültség esetén van ionizáció, de ez kismértékű. Az anódra a rácshoz képest negatív feszültséget kell kapcsolni, és miután nagyon kis áramokat kell mérni, esetenként csak néhány száz pikoamper, ezért nagyon érzékeny árammérőt kell használni. A méréshez árnyékolt BNC kábelt használunk. A kábel belső, meleg pontja csatlakozik az anódhoz, a külső árnyékolás pedig a cső külső foglalatához. Az ampermérő meleg pontját rácsatlakoztatjuk a cső anódkiemenetéhez, mint az ampermérő bemenetének a másik kontaktusa a hidegpont, és ehhez



3.2. ábra. A Frank–Hertz-cső vázlata

a föld ponthoz kell kötni az  $g_2$  rácshoz képest negatív feszültségű tápegységet. . Az ampermérő kis ellenállása miatt, ezáltal az anód azonos potenciálra kerül, mint a föld pont és a második rácshoz képest negatív lesz. Látható, hogy a méréshez 4 szabályozható tápegységet kell használni. Fontos, hogy bekapcsolás előtt és a mérés befejezésével minden tápegységet 0 feszültségre állítsunk. A neonos cső, a tápegységek és az ampermérő bekötése után mérésre kész, de a higanyos csövet először melegíteni kell. Ehhez egy csőkályhát használunk. A kályha hőmérsékletét platina ellenálláshőmérővel mérjük. Az ellenállásmérést egy a számítógéppel összekötött digitális műszer végzi. A hőmérséklet szabályzás a mérőprogram beindításával elindul, és a számítógépes kijelzés egyik ablakában látható a kályha pontos hőmérséklete. A melegítés azért szükséges, hogy a higanyos csőben lévő higany egy részét elpárologtatva, megfelelő koncentrációjú higanygőz legyen a csőben, amivel a szabad úthosszat és az ütközések számát szabályozhatjuk. Kis koncentráció esetén az anódáram nagy, de a cső hamarabb begyűjthet, ami által kevesebb maximumot detektálhatunk. Túl meleg kályha, azaz nagy koncentráció esetén pedig az anódáram nagyon kicsi, ezáltal nehezen detektálhatók a maximumok és minimumok pontos helye. Neonos cső esetén nincs lehetőségünk a koncentráció melegítéssel történő növelésére. Az árammérő és a rácsfeszültségek detektálását végző digitális műszerek szintén a számítógépre vannak kötve, és gombnyomásra tárolják a rácsfeszültséget és a hozzá tartozó áramértékeket. A pontos mérés előtt van lehetőség a feszültség-áram karakterisztika vizuális érzékelésére oszcilloszkóp segítségével. Ezt a funkciót csak az első gerjesztési potenciál meghatározására használja, azaz az első rácstra csak kis feszültséget szabad kötni. A tápegység funkció kapcsolóját automatikus vezérlésre kapcsolva a  $g_2$  rácstra periodikus jel jut. Az oszcilloszkópot xy üzemmódon használva a bemenetekre a rácsfeszültséget illetve az anódáramot kösse. Az oszcilloszkóp bemeneti ellenállásán eső feszültség arányos lesz az anódárammal, a vízszintes eltérítés pedig a rácsfeszültséggel.

Az első gerjesztési potenciál mérésekor a maximumok távolsága nagyjából egyenlő, de az első maximum értéke nagyobb, mint a különbségek. Ennek magyarázata az, hogy a katód és anód más anyagból készül és így a két fém közti kontaktpotenciál eltolja az első maximum helyét. Az első gerjesztési potenciál meghatározásakor az anódáramot és a maximumok és minimumok élességét erősen befolyásolja az első rács és a zárófeszültség értéke, higanyos csőnél a hőmérséklet is. Egyes esetekben maximumok vagy minimumok helyett csak a meredekségben történő változást, esetleg inflexiós pontokat látunk.

### 3.4. Gyakorló kérdések

1. Nagyságrendileg mekkora a gőz–folyadék fázis kritikus hőmérséklete Hg és Ne esetében?
2. Miért nem tudjuk a neonos csőben a koncentrációt melegítéssel változtatni?
3. Hogyan határozható meg a kontaktpotenciál?
4. Milyen ütközések történnek a Franck–Hertz-csőben?
5. Mi a kapcsolat a Bohr-modell és a Franck–Hertz-mérés eredményei közt?
6. Milyen elektródák vannak a Franck–Hertz-csőben?
7. Miért kell a katódot fűteni?
8. Milyen feszültséget kapcsolunk az anódra és miért?
9. Hogyan mérjük meg az első gerjesztési potenciált?
10. Hogyan mérjük meg a magasabb gerjesztési potenciált?
11. Mit értünk a Franck–Hertz-cső esetén begyűjtáson?
12. Mi történik azokkal a töltésekkel, amelyek nem az anódon távoznak?
13. Mi történik a gerjesztett atomokkal?
14. Hogyan befolyásolja a mérést, ha az elektródák síklapok vagy koncentrikus hengeralakúak? Utóbbi esetben belül van a katód.
15. Mi a különbség az ionizáció és a gerjesztés közt?
16. Milyen legyen a szabad úthossz az első és magasabb gerjesztési potenciál mérésekor?
17. A  $g_1$  rácsra kis feszültséget adva, hogyan függ az áram a második rács feszültségétől?

### 3.5. Mérési feladatok

1. Mérje meg az első gerjesztési potenciált neonos cső több záró feszültségnél és első rácsfeszültségnél a mérésvezető által megadott paraméterekkel!
2. Végezze el az előző mérést higanyos cső esetén is, több különböző hőmérsékleten!
3. Határozza meg a maximumok és a minimumok különbségéből az első gerjesztési potenciál értékét, annak hibáját!
4. Számítsa ki milyen hullámhosszú és frekvenciájú foton keletkezik a gerjesztett elektron visszaugrásakor!
5. Határozza meg a kontaktpotenciál értékét!
6. Precíz árammérés és szerencsés  $g_1$  feszültség esetén kis extra maximumot és minimumot észlel. Ez a második gerjesztési potenciál. Próbálja megbecsülni ennek értékét!
7. A mérésvezető segítségével mérje meg a magasabb gerjesztési potenciálokat is! Ekkor a két rácsot azonos potenciára kapcsolja!
8. A higany és a neon termsémáiból határozza meg, hogy milyen átmeneteket mért!
9. Számolja ki, egy-egy ütközéskor energiájának hány százalékát veszíti el az elektron neon illetve higany esetén!

## 4. fejezet

# Fényelektromos jelenség (Kovács György)

### 4.1. Bevezetés

Fémeket fényvel megvilágítva, bizonyos körülmények között a fémből elektron kilépést tapasztalunk. Ez a fényelektromos jelenség vagy fotoeffektus. A fényelektromos jelenség a fény kvantumosságának egyik alapvető bizonyítéka és a jelentőségét az is bizonyítja, hogy az 1921-es évi fizikai Nobel-díjat Einstein kapta „az elméleti fizika területén szerzett érdemeiért, különös tekintettel a fényelektromos jelenség törvényszerűségeinek felismerésére”.

A fényelektromos jelenség kísérleti eredményeit így foglalhatjuk össze:

1. Minden fémhez tartozik egy meghatározott frekvencia, aminél alacsonyabb frekvenciájú fény hatására nem történik elektron kilépés.
2. Ha a megvilágító fény frekvenciája magasabb ennél a kritikus frekvenciánál, akkor az elektron kilépés azonnal megtörténik.
3. A kilépő elektronok száma a fény intenzitásával arányos, de a kilépő elektronok energia-eloszlása független a fény intenzitástól.

A kísérleti tények a fény hullámtermészetével nem magyarázhatók. Ha a fémet megvilágító fényben az energiaáramlás folytonos és egyenletes lenne, akkor kis intenzitásnál, hosszú időnek kellene eltelnie, hogy meginduljon az elektron kilépés, az elektronok energia eloszlásának függenie kellene a fény intenzitásától és nem tudjuk magyarázni a kritikus frekvenciát.

A jelenséget Einstein Planck elemi energia kvantum hipotézisének továbbfejlesztésével magyarázta. A fény elemi energia adagokból, fotonokból áll, amelyek a fénysebességgel

egyenes vonalba terjednek mintha  $hf$  energiájú kis részecskék lennének, ahol  $h$  a Planck állandó és  $f$  a fény frekvenciája.

A fémekben lévő elektronok egy része az atomokhoz kötődik, de minden atom lead vegyértékétől függően néhány elektront, amelyek kvázi szabadon mozognak a fém iontörzseinek rácsperiódikus potenciáljában. A kristály felületén viszont a periodicitás megszűnik és így olyan nagy potenciálgát alakul ki, amely meggátolja a vezetési elektronok fémből való kilépését. A fémekben lévő vezetési elektronok energiája folytonosnak tekinthető, 0 K-en a maximális értéke az úgynevezett Fermi-energia, és az ennél nagyobb energiájú elektronok száma szobahőmérsékleten szinte elhanyagolható. A Fermi-energia és a vákuum közti energiakülönbség épp a kilépési munka.

Tegyük fel, hogy egy foton épp egy maximális energiájú vezetési elektronnal találkozik. Az energiáját átadva megsemmisül és az elektron kinetikus energiája a foton  $hf$  energiájával növekszik. Ha ez az energia nagyobb, mint az  $A$  kilépési munka akkor a kilépő elektron kinetikus energiája

$$\frac{1}{2}mv^2 = hf - A, \quad (4.1)$$

A fenti összefüggés az Einstein-egyenlet a legnagyobb energiájú elektronokra igaz, a kisebb energiájúak kisebb kinetikus energiával lépnek ki. A fényelektromos jelenséget a fotocellával vizsgálhatjuk.

## 4.2. Fotocella

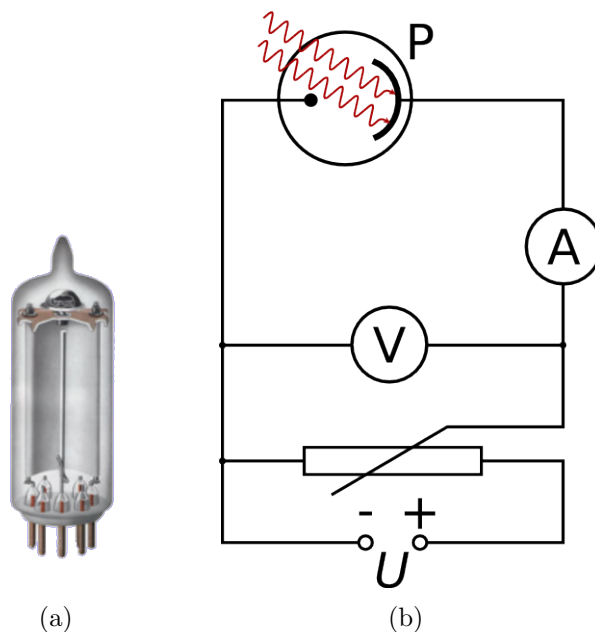
A fotocella egy elektródákkal ellátott zárt, vákuumozott üveg henger, amely palástjának egy részére ezüst hordozóra párologtatják a fényérzékeny anyagot. Ezt katódnak nevezik. A katóddal szembe helyezik el a másik elektródát, ami egy szál vagy gyűrű és ennek anód a neve. Egy tipikus fotocella képe az 4.1(a) ábrán látható.

A fotocella elektródáira feszültséget kapcsolva a 4.1(b) ábra szerinti kapcsolás alapján vizsgálhatjuk a fotocella áramát. Tegyük fel, hogy a katódot monokromatikus fényvel világítjuk meg. A bevezető alapján azt várnánk, hogyha a fény frekvenciája elér egy kritikus értéket, pozitív anód feszültség esetén az áram csak a fény intenzitásától függ. A fény intenzitása a fotonok számát jelenti és elméletileg minden egyes foton kilök egy elektront, ami a pozitív anódba csapódik. Negatív anódfeszültségnél az áram pedig fokozatosan csökken és a frekvenciától függően egy  $V_0$  záró feszültségnél lesz zérus. A  $V_0$ -ra fennáll a következő összefüggés:

képlet

$$V_0 = \frac{hf}{e} - \frac{A}{e}, \quad (4.2)$$

ahol  $e$  az elektron töltését jelenti. Az áram fokozatos és nem meredek csökkenésének az oka, hogy a kilépő elektronok mozgási energiája különböző, ami annak a következménye, hogy a fotonok a fém belsejében nem azonos energiájú elektronokat gerjesztenek.

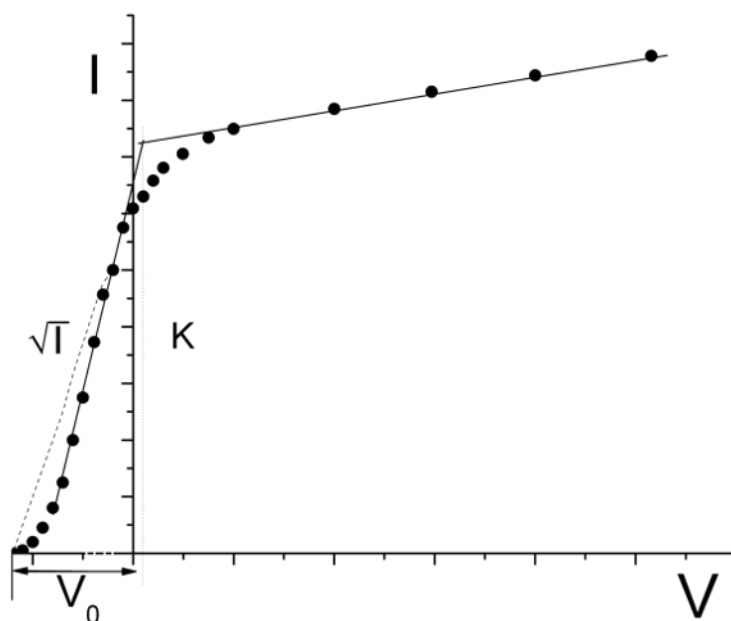


4.1. ábra. (a) Egy fotocella tipikus képe, (b) a fotocellás mérési elrendezés kapcsolási rajza.

A valóságban az áram egy adott cellánál nem csak a fényintenzitástól függ, hanem függ a megvilágító fény frekvenciájától is. Ennek magyarázata a következő. A kilépő elektronok száma arányos a fotonok számával. Arányos, de nem egyenlő, ugyanis nem minden foton nyelődik el, egyesek keresztülhaladnak a fémen, mások visszaverődnek, és nagyon jó elektróda kialakítás mellett is alig éri el az 1%-ot és így a kilépő elektronok száma és a fény intenzitásának aránya hullámhossz függő. A kilépő elektronok és a fotonok arányát nevezzük színérzékenységi görbének.

A fotocella feszültség-áram karakterisztikája is összetettebb. Egy reális karakterisztika a 4.2 ábrán látható.

Magasabb szívófeszültségnél, a katód és anód közt átvezetés léphet fel. Az áram nem 0 záró feszültségnél kezd erősen csökkenni, hanem hamarabb. Ennek magyarázata, hogy a katód és anód anyaga különböző fémből készül. A két különböző fém összeérintése, akár egy harmadik fém közbeiktatásával is, egy járulékos potenciál fellépését eredményezi, ami a két fém kilépési munkájának különbsége. Ezt kontaktpotenciálnak nevezzük. A kontaktpotenciál úgy jelentkezik, mintha a szívó feszültséghez hozzáadnánk a kontaktpotenciált. Az áram a  $V_0$  záró feszültség közelében nem lineáris, hanem inkább parabolikus. A 4.2 ábrán az is látszik, hogy a két lineáris rész közt egy könyök szakasz van, amely menete az elektródák anyagától és kialakításától függ. A kontaktpotenciált extrapolációval határozhatjuk meg. Egyeneseket illesztünk a telítési és a lineárisnak feltételezett csökkenő szakaszra és metszéspontjuk adja a kontaktpotenciált. A záró feszültséget nö-



4.2. ábra. Ez mi??

velve visszáramot is észlelünk, aminek az oka a fellépő átvezetés és a fotocella anódjának fotoemissziója.

### 4.3. Gyakorló kérdések

1. Mi a fotocella?
2. Mi történik, ha egy fémet megvilágítunk?
3. A fotocella árama mitől függ?
4. Mi a kilépési munka?
5. A fotocella áramkarakterisztikájának milyen szakaszai vannak?
6. Izzólámpa fényében milyen tartományba esik a legnagyobb arányba kibocsátott fotonok száma?
7. Mik a fotonok és mi jellemzi őket?
8. A fotocella áramának mérésére használt  $1\text{ M}\Omega$  ellenállású 500-szoros erősítésű eszközön eső feszültség mennyire befolyásolja a  $20\text{ nA}$ -es telítési áramú fotocella feszültség-áram karakterisztikáját a különböző áramtartományokban?



9. Milyen összefüggés alapján határozhatjuk meg  $h/e$ -t?
10. A kilépő elektronok energiája miért különbözik és kb mekkora az eltérés, ha a fotocella árama +2 voltnál kezd jelentősen csökkenni és -1 voltnál már nincs áram?
11. Egy alumínium lemezt nagy teljesítményű infra lámpával megvilágítva nem detektálunk elektron kilépést, de egy gyenge uv-lámpával már igen. Miért?

## 4.4. Mérési feladatok

Végső célunk a  $h/e$  arány meghatározása. Az (4.2) összefüggésből látható, hogy a záró feszültség a monokromatikus fény frekvenciájának lineáris függvénye. Meghatározva a több különböző frekvenciához tartozó záró feszültséget, és ábrázolva a frekvencia függvényében, olyan egyenest kapunk, amelynek iránytangense a  $h/e$ . A mérőeszköz olyan cső, amely egyik végére helyezük a fotocellát megvilágító szabályozható fényerejű lámpát, a másik végén megfelelő kivezetésekkel a fotocellát.

A fény útjába lencserendszeren keresztül interferencia szűrőt helyezünk, ami a fényforrás fényéből monokromatorként csak egy meghatározott hullámhosszú fényt enged át. Az interferencia szűrőknek megadtuk a hullámhosszát, amelyből a frekvencia kiszámolható. Ha csak a záró feszültségre vagyunk kíváncsi, akkor a következő módon járhatunk el. Megvilágítjuk a fotocellát és a kivezetéseit egy kondenzátorra kötjük. A kondenzátor addig töltődik, amíg a feszültség eléri a  $V_0$  záró feszültséget. A probléma az, hogy egyrészt a fotocella telítési árama is 10 nA nagyságrendű, ami a záró feszültséghez tartva töredékére csökken. Ez hosszú várakozási időt jelent és a kondenzátor feszültségét elvileg végtelen bemenő ellenállású voltmérővel kellene mérni.

A fotocella záró feszültség meghatározásának másik módja a feszültség-áram karakterisztika mérése. Nyilvánvaló, hogy ehhez érzékeny árammérő szükséges. Ez egy 1 M $\Omega$  bemenő ellenállású 500-szoros erősítésű erősítővel történik. Az erősítő kimenetét voltmérőre kötve, meghatározható az áram.

1. Mérje meg és ábrázolja a fotocella feszültség-áram karakterisztikáját megvilágítás nélkül! Ezzel megkapja a sötétáramot a feszültség függvényében.
2. Mérje meg két színszűrű esetén, a fotocella áram- fényintenzitás karakterisztikáját! Ehhez kapcsoljon 20 volt nyitó feszültséget a fotocellára és a fény erősségét különböző átmérőjű diafragmákkal szabályozza! Extrapolálással határozza meg a sötétáramot!
3. Maximális fényerősséget és szívófeszültséget használva határozza meg és ábrázolja a fotocella relatív színérzékenységi görbéjét, megmérve az egyes szűrőkhöz tartozó áramokat! A lámpát 2800°C fokos szürke testnek feltételezve, második lépésben vegye figyelembe a lámpa által kibocsátott fotonok relatív arányát!

4. Mérje meg az egyes színszűrők feszültség-áram karakterisztikáit! Először a szívó-feszültséget 25 V-ra tegye, és a lámpa feszültségének szabályozásával olyan fényerősséget állítson be, hogy az összes szűrőnél kezdetben azonos telítési áramot, kb. 20 nA-t detektáljon! A szívó feszültséget a könyökpont alatt és főleg a záró potenciál közelében érzékenyen csökkentse! Záróirányban is menjen – durva lépésekben – el -20 voltig!
5. A grafikonokból határozza meg a kontaktpotenciál értékét és hibáját! A kontaktpotenciál frekvencia független, és a különböző görbékből adódó eltérés a leolvasási hiba.
6. Határozza meg az egyes hullámhosszakhoz tartozó záró feszültségeket! A zérus áramhoz tartozó feszültség meghatározását célszerű úgy végezni, hogy az alsó könyök környezetében az áram gyökét a feszültség függvényében ábrázolva olyan egyenest kapunk, amely pontosabban kimetszi a lezáró potenciál értékét.
7. Vizsgáljuk meg, hogy a lezáró potenciál értékét illetve az áramot mennyire módosítja az anódból származó visszáram! A mért áram ugyanis a katódból és az anódból kilépő elektronok áramainak különbsége. Nagy negatív, illetve nagy pozitív feszültségeknél csak az egyik jelentős. A kontaktpotenciál fordítva érvényesül. Ezek alapján próbálja figyelembe venni az anódból kilépő elektronok áramát!
8. Ábrázolja a kontaktpotenciállal korrigált záró feszültséget a frekvencia függvényében! Egyenes illesztéssel (4.2) alapján határozza meg  $h/e$ -t és  $A/e$ -t!
9. A  $V_0$  meghatározását végezze el a kondenzátoros módszer segítségével is! A méréshez nagy bemenő ellenállású voltmérő szükséges, a HP-voltmérő bemenő ellenállása 10 G $\Omega$ -ra is változtatható. A kondenzátor a voltmérő bemeneti kapacitása (10 pF) és így nem kell külső kondenzátort alkalmaznunk.

## 5. fejezet

# Hidrogén és alkálifémek spektruma (Kovács György)

### 5.1. Bevezetés

Az ember egyik csodálatos képessége, hogy az elektromágneses sugárzás egy bizonyos hullámhossznyi tartományba eső részét, a fényt, érzékeli, és a legősibb összetett optikai rendszerrel és spektroszkóppal, a szemmel, feldolgozza, és információvá alakítja. Pontosan, hogy miért ez a tartomány fontos a látás szempontjából, hagyjuk meg más tudomány számára. A „spektrum” elnevezés, ami latinul látványt jelent, Newtontól származik, aki egy résen áthatoló napsugár útjába prizmat helyezett, és gyönyörködött az ily módon létrejött színpompás jelenségben. Elektromágneses sugárzás a világon mindig jelen van, és a klasszikus elektrodinamika alapján tudjuk, hogy az anyag gyorsuló töltései sugároznak, és folytonos eloszlású spektrumot adnak. Fraunhofer volt első, aki vonalas színeképet látott. Bunsen az elemek spektroszkópiái megfigyelésének egyik úttörője volt, és munkássága nyomán a színeképelemzés a fizika külön tudományává fejlődött. A spektrumvonalak egyértelműen jellemeznék egy-egy kémiai elemet, sőt vonalaik alapján fedeztek fel új elemeket. Az atomok vonalas színeképe, és a színeképvonalak között megállapítható tapasztalati összefüggések a modern fizika számára az egyik legfontosabb serkentő tényezőnek, és egyúttal az atomokra vonatkozó elméletek fontos próbakövévé váltak. A klasszikus fizika keretein belül az atomok vonalas színeképeinek magyarázata nem lehetséges. A félklasszikus Bohr-, illetve Bohr–Sommerfeld-féle atommodell jól leírja a hidrogén és közelítőleg az alkáli atomok színeképeinek főbb vonásait, de a színeképek finomabb szerkezetének kvantitatív magyarázata csak a modern kvantumelmélet eszközeivel lehetséges. A modellek lényege, hogy az atomok elektronállapotai kvantumszámokkal jellemezhetők, és ezekhez az állapotokhoz meghatározott, diszkrét energia tartozik. Az alapállapotban lévő atom elektronjai a Pauli elv által megengedett legalacsonyabb energiaállapotokat foglalják el, és gerjesztéskor a kiválasztási szabályoknak is megfelelően az atom egy vagy

több elektronja magasabb energia állapotba ugrik. Ha a gerjesztett elektronok egyike alacsonyabb energia állapotba kerül, akkor az energiakülönbségnek megfelelő foton sugárzódik ki, amit spektroszkópiailag észlelünk, mégpedig úgy, hogy fennáll a

$$\Delta E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (5.1)$$

összefüggés, ahol  $\nu$  a kisugárzott fény frekvenciája,  $h$  pedig a Planck-állandó és  $\lambda$  a hullámhossz,  $c$  a fénysebesség.

## 5.2. Hidrogén atom színe

A hidrogénatom a legegyszerűbb elem, csupán egy protonból és egy elektronból áll. A Bohr-modell szerint az elektron impulzusmomentuma kvantált,  $\frac{h}{2\pi}$  egész számú többszöröse. E feltétel és az elektron-proton közti vonzó Coulomb kölcsönhatást figyelembe véve a hidrogénatombeli elektron lehetséges energiaszintjei:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (5.2)$$

ahol  $e$  az elektron töltése,  $m_e$  a tömege,  $\epsilon_0$  a vákuum permittivitása, és  $n$  a főkvantumszám. Külső tér nélkül hidrogénatomban az elektron energiája csak a főkvantumszámtól függ. A

$$T_n = -\frac{E_n}{hc}$$

mennyiségeket termeknek is nevezzük. Különbségük megegyezik a kisugárzott fény hullámhosszának reciprokjával. az (5.2) összefüggést behelyettesítve az (5.1)-be, kapjuk, hogy

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = R_\infty \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (5.3)$$

ahol  $R_\infty$  a végtelen tömegű mozdulatlan atom Rydberg-állandója,  $n$  és  $m$  pozitív egész számok. Természetesen  $m$  nagyobb, mint  $n$ . Az (5.3)-as kifejezést felhasználva nem kapunk teljes egyezést a spektroszkópiai adatokkal. Ennek oka, hogy az elektron nem a proton, hanem az elektron-proton rendszer közös középpontja körül kering. A részletes számítások szerint a hibát korrigálhatjuk, ha az elektron tömeget a redukált tömeggel helyettesítjük, és így:

$$R_H = R_\infty \cdot \left( 1 + \frac{m_e}{m_p} \right)^{-1} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \cdot \left( 1 + \frac{m_e}{m_p} \right)^{-1}. \quad (5.4)$$

Ha az összes olyan átmenetet tekintjük, ahol  $n$  rögzített és  $m$  nagyobb, mint  $n$ , akkor az (5.4)-gyel módosított (5.3) összefüggés egy-egy színeksorozatot ír le. Az  $n = 2$ ,

és az  $m$  kettőnél nagyobb egész számokhoz tartozó sorozat a Balmer-sorozat. Az akkori spektroszkópai adatokat elemezve J. Balmer 1885-ben találta meg a hidrogén vonalaira a róla elnevezett összefüggéseket. A Balmer-sorozat átmenetei a látható fény tartományába esnek, az  $n = 1$  átmenetei, a Lyman-sorozat az ultra-ibolya, a többi  $n$ -hez tartozók átmenetek az infravörös tartományba esnek. az (5.4)-es összefüggésből következik, ha egy hidrogénhez hasonló, de más tömegű mag körül keringő elektront vizsgálunk, akkor a redukált tömegben szereplő  $m_p$  helyett az új mag tömegét kell írni. Ha az új mag egy protonból és egy neutronból álló rendszer, amit deutériumnak hívunk, akkor a deutérium vonalai nagyon közel lesznek a hidrogénéhez és

$$\frac{\lambda_H}{\lambda_D} = \frac{1 + \frac{m_e}{m_p}}{1 + \frac{m_e}{m_p + m_n}}. \quad (5.5)$$

A hullámhosszuk arányából, a proton tömegét egyenlővé téve a neutronéval, meghatározható a proton és elektron tömegének aránya. Harold Urey a hidrogén spektrumát vizsgálva, találta meg a hidrogén vonalai mellett lévő kis intenzitású vonalakat és fedezte fel a nehéz hidrogént, amiért 1934-ben kémiai Nobel-díjat kapott.

### 5.3. Alkáli atomok spektruma

Az alkáli atomok termjei sok egyezést, de különbséget is mutatnak a hidrogén atommal. Az egyezés oka, hogy az alkáli atomok külső héján egyetlen elektron található, a többi elektron pedig zárt nemesgáz szerkezetű belső héjat alkot. Az atommag és a betöltött héjak együttesen alkotják az atomtörzset, és az elektron az atomtörzshöz, mint effektív maghoz kapcsolódik. A legkülső elektron a vegyértékelektron, mert ez vesz részt a kémiai kötésekben, de világító elektronnak is nevezik, mert az alkáli atomok optikai színképei ennek az elektronnak a gerjesztésével keletkeznek. Az eltérés oka, hogy míg nagyobb távolságban a világító elektron centrális Coulomb teret érez, de az atomtörzs közelébe kerülve deformálja azt, s így már egy Coulomb potenciálra szuperponálódott dipól, vagy kvadrupól térben mozog. Ezáltal, az energiaszintek mellék kvantumszám szerinti elfajulása megszűnik, és a hidrogénnél tapasztalt energiaszintek szétválnak. Az alkáli atomok spektrumában léteznek egymáshoz közeli dublett szerkezetű vonalak. Ennek az oka, hogy az elektronnak saját, spin és pálya impulzusmomentuma van, amikhez mágneses momentum is tartozik. A két mágneses momentum kölcsönhatása is befolyásolja a termeket. Hidrogén esetében szinten van spin-pálya kölcsönhatás, de a termeket alig befolyásolja. Nézzük a nátrium nagyon jellegzetes sárga vonalpárját, dublettjét. A  $3s$  pálya  $l = 0$  és a  $3p$  pálya  $l = 1$  pályamomentumához tartozó szintek a Bohr-modell szerint azonosak lennének, de a Schrödinger-egyenlet alapján számított pálya átfedések, és a relativisztikus effektusok miatt a különböző  $l$  pályákhoz más energiaérték tartozik. A dublett szerkezet viszont a spin és pálya momentumok eredő impulzusmomentumától függ, amit  $j$  belső kvantumszámnak neveznek. A spin csak paralel vagy antiparalel

lehet a pályamomentummal, ezért az  $l = 1$  pályamomentumhoz  $j = 3/2$  vagy  $j = 1/2$  érték tartozik, az  $l = 0$  pályamomentumhoz viszont  $j$  pozitív volta miatt csak  $j = 1/2$  érték tartozhat. Az A. függelékben lévő (A.12) egyenletre hivatkozva közöljük az alkáli atomok termjeinek különbségét:

$$T_{n,j} = -R_M \frac{Z^{*2}}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^{*2}}{n} \cdot \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (5.6)$$

ahol  $RM$  az (5.4) alapján számítható, ha a proton tömegét az  $M$  magtömeggel cseréljük fel.  $Z^*$  az effektív magtöltés azt jelenti, hogy a világító elektron nem a  $Z - 1$  elektron által leárnyékolta mag terében, hanem annál nagyobb  $Z^*$  töltésű mag terében mozog. Az alkáli atomok P állapotában  $Z^*$

nátriumra	$Z=11$	$Z^* = 3,55$
káliumra	$Z=19$	$Z^* = 5,96$
rubídiumra	$Z=37$	$Z^* = 10,0$
céziumra	$Z=55$	$Z^* = 14,2$

Az árnyékolás erősen függ a rendszámától. Az  $\alpha$  finomszerkezeti állandót még Sommerfeld vezette be, amikor a Bohr-modellt korrigálni akarta.

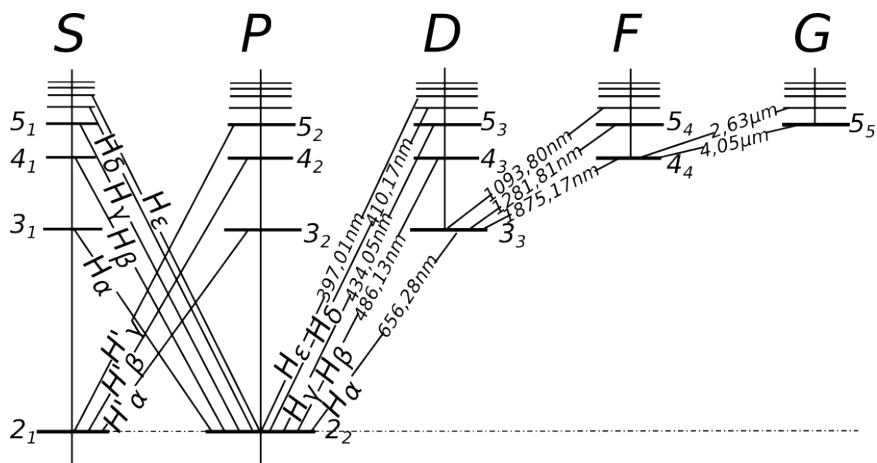
$$\alpha = \frac{e^2}{2\epsilon_0 hc} \approx \frac{1}{137}. \quad (5.7)$$

Az  $\alpha$  első fizikai értelmezése a nemrelativisztikus Bohr-féle atommodellben az első körpályán keringő elektron sebességének és a fény vákuumbeli sebességének a viszonya volt. A termék azonosítására Russel és Sanders egy napjainkban is széles körben alkalmazott jelölést vezetett be, ezek leírása és magyarázata az A. függelékben megtalálható. W. Grotrian a színeképvonalak és a spektroszkópiai termék ábrázolására grafikus módszert dolgozott ki, Ezek az ábrák nagymértékben megkönnyítik a színeképvonalak közötti eligazodást. Példaként az 5.1. ábrán bemutatjuk a hidrogén Grotrian-diagramját. Az átmenetek hullámhosszainak mértékegysége angström.

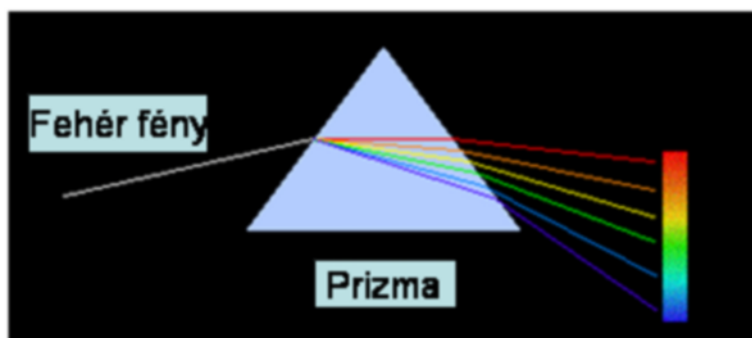
## 5.4. Spektroszkópok működése

A spektrum vizsgálatához használt eszközök legfontosabb eleme a színbontó elem, ami lehet optikai rács, vagy prizma. A mérésünkben prizmás spektroszkópot alkalmazunk. A prizma törésmutatója hullámhosszfüggő, így a beérkező fehér fényt, az (5.2). ábrának megfelelően felbontja.

A prizma anyagát a diszperziója jellemzi:  $D_n(\lambda) = dn/d\lambda$ . A diszperzió az anyag törésmutatójának hullámhossz szerinti deriváltja. A prizma színbontó képességét a legjobban a szögdiszperzió írja le. A szögdiszperzió definíciója:  $D_\epsilon(\lambda) = d\epsilon/d\lambda$ , ahol  $\epsilon$  a prizma eltérítése, más néven a deviációja, a belépő és a kilépő fénysugár közti szög (5.3. ábra).



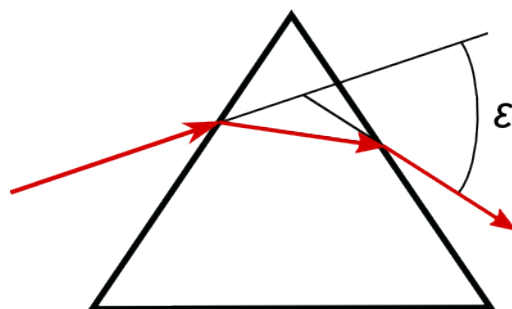
5.1. ábra. A hidrogén Grotrian-diagramja



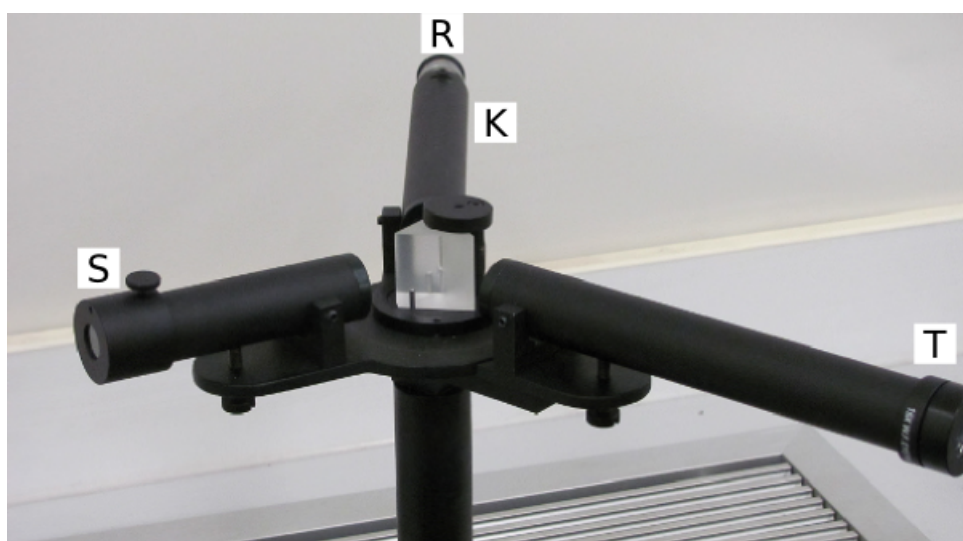
5.2. ábra. A prizma felbontja a fényt.

Nagyon fontos jellemzője a prizmának a felbontóképessége,  $R_s = \lambda/d\lambda$ , ahol  $d\lambda$  az egymás melletti, még épp megkülönböztethető két vonal hullámhossza közti különbség. A felbontóképesség javítható a prizma alapjának, a bázisának és a törőszögének a növelésével, de az utóbbit  $60^\circ$ -nál nem szokták nagyobbra választani, mert a reflexió miatt a fényintenzitás vesztesége is növekszik. Minden prizma igaz, hogy az elkerülhetetlen leképzési hibák akkor a legkisebbek, ha a fénysugár a prizma bázisával párhuzamosan halad. Ekkor minimális a hiba, vagy deviáció. Az 5.4. ábrán látható egyszerű felépítésű Bunsen-féle prizmaspektroszkóp ezt a feltételt nem biztosítja, de könnyen kezelhető. A spektroszkóp részei az R rész, a K kollimátor, ezeken keresztül jut a fény a prizma és a T spektrum megfigyelésére szolgáló távcső. Az S skála bevetítő cső egy skálát vetít a T távcsőbe. A T távcső kis szögben mozgatható, így ez az eszköz kis pontosságú, gyors analízisre alkalmas.

A minimális deviáció hullámhossz függetlenségét olyan mechanikával lehetne megoldani, ami egy helyben hagyja a kollimátort, a rést és a fényforrást, ugyanakkor a prizmat



5.3. ábra. A deviáció szemléltetése



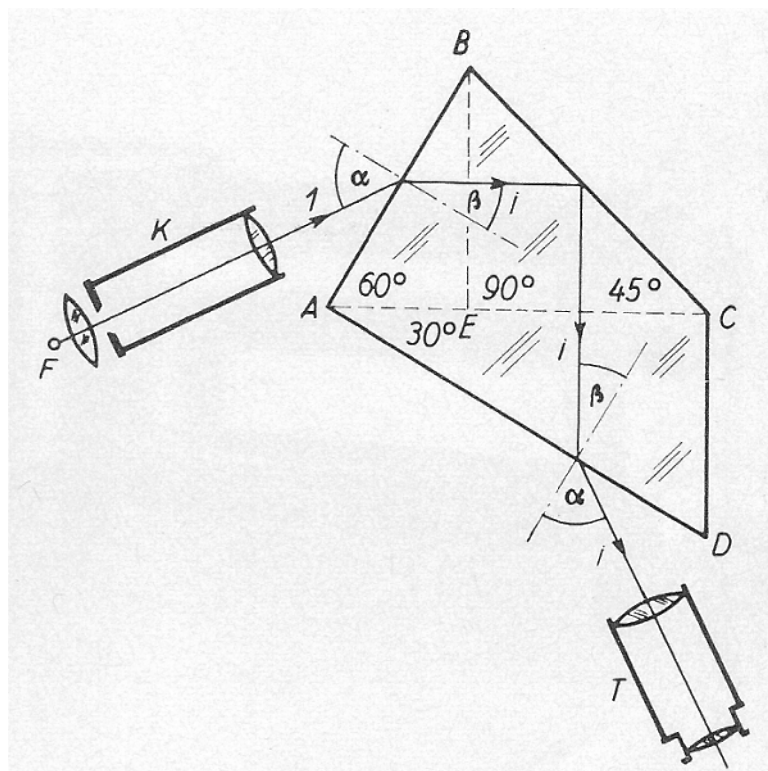
5.4. ábra. A Bunsen-féle prizmás spektroszkóp fényképe

$d\alpha$  szögű elforgatásával egyidejűleg a T távcsőt  $2d\alpha$  szöggel fordítja el. A bonyolult mechanika helyett azonban egy speciális prizmával is megoldható, hogy minden sugármenet a bázissal párhuzamos legyen. Erre az 5.5. ábrán látható Abbe-féle négyszög prizma a megfelelő megoldás. Abbe a  $60^\circ$ -os törőszögű prizmát kettévágta és az egyik felet a másik bázisára helyezte és kiegészítette egy egyenlő szárú derékszögű háromszög prizmával az 5.5. ábrán látható módon. A három egymáshoz illesztett háromszögből képzett prizma BEC prizma BC szakasza tükröként szolgál, és  $90$  fokkal elfordítja a bejövő sugarat. A kollimátor és a távcső helye mindig fix, és a prizmát kell elforgatni, hogy a bázissal párhuzamos sugarat kapjunk.

A spektrum vizsgálatát az Abbe-prizmával ellátott Török-Barabás-féle TB-2 típusú spektroszkóppal végezzük. A spektroszkóp belső szerkezete az 5.6. ábrán látható.

A spektroszkópba a jobb felső oldalon lévő résen keresztül lép be a fény. A rés nyílása szabályozható. A rés rácsatlakozik a kollimátor csőre, amely végén található a





5.5. ábra. Az Abbe-prizma

kollimátor lencse. A lencse akromatikus, azaz a teljes spektrum tartományban azonos gyújtótávolságú. A rés a kollimátor-lencse fókuszában van. A kollimátor-lencse a résről érkező sugarakat párhuzamosan továbbítja az  $A$  Abbe-prizmára. A színeire bontott fény a  $45^\circ$ -os  $P$  tükörre, onnan pedig a  $T$  távcső tárgylencsére jut, majd pedig a távcső zárt csövében folytatja útját, ahol egy pentagonál-prizma a felbontott fényt úgy vetíti a távcső szálkereszttel ellátott szemlencsére, hogy a sugarak jobb-bal irányát nem cseréli összességében fel, így a megjelenő színek hullámhossza a nemzetközi gyakorlatnak megfelelően balról jobbra nő. A fénysugár végül a távcső szemlencsére jut. Az okulár tubusának forgatható gyűrűjével a színek élességét állíthatjuk be. Az okulár mellett még egy másik nagyító található, amely segítségével a skála dobját és a mutatópálcát kétszeres nagyításban láthatjuk. A távcső szemlencséjébe jutó fény hullámhosszát a hullámhosszdob forgatásával szabályozzuk. A dob forgatásakor a dob tengelyét képző csavar az Abbe-féle prizma asztalkáját elforgatja, és visszacsavarásakor az asztalt egy rugó visszanyomja. A távcső okulárjában a szálkeresztre állított vonal hullámhosszát a dob oldalán kinyúló fém mutatópálca hegyénél lévő skálán olvashatjuk le. A dobot mindig finoman csavarjuk, mert a dob hornyaiba illeszkedő bütyök kiugorhat, és utána meghamisítja a további mérések eredményeit. A mechanikai részek elkerülhetetlen holtjátékát



5.6. ábra. Török-Barabás-féle TB-2 típusú spektroszkóp belső szerkezeti képe

és az ebből adódó szisztematikus hibát úgy küszöbölhetjük ki, hogy a dobot mindig egy irányba csavarjuk és a mérés előtt kalibrálást végzünk. A készülék Abbe-prizmája nehéz ólomüvegből készült, bázishossza 50 mm. A hullámhossz-tartomány 400–750 nm és a két legfontosabb adat, a prizma felbontóképessége:

370 nm-en	16400
800 nm-en	2460.

## 5.5. A mérés során alkalmazott fényforrások.

A mérés során fényforrásként *spektrállámpákat* használunk. Ezek spektroszkópiai célokra tervezett kisülési csövek. A hidrogén illetve deutérium színeképét 150 Pa nyomású speciális Geissler-csővel állítjuk elő. Ebben a csőben a pozitív oszlop fényét használjuk fényforrásként. A középső rész kapilláris cső, itt az előállított fénysűrűség nagyobb. A lámpák működéséhez 1500 V nagyfeszültség szükséges. A lámpák a tápegység bekapcsolásával működőképesek. Az alkáli fémek, a higany és a kadmium színeképének előállításához fémgőz-lámpákat használunk. A fémek szobahőmérsékleten nem gáz halmazállapotúak, és atomjaik csak a lámpák bemelegítése során kezdenek kellő sűrűségű gőzfázist képezni. A lámpa működéséhez először a fémet el kell párologtatni, vagy legalábbis kellően magas koncentrációt létrehozni benne. Az egyik megoldás, hogy kezdetben több ezer voltos indítófeszültséget kapcsolunk a lámpára, és amikor már elegendő töltéshordozó van, akkor a lehet a feszültséget csökkenteni. A gyakorlatban másik eljárás terjedt el. A lámpák készítésekor a két főelektroda mellé egy segédelektrodát is elhelyeznek, amelyek a lám-

pába épített ellenállásokon keresztül csatlakoznak az áramvezetékhez. A fémgőz-lámpák néhány kPa-nyi kisnyomású nemesgázt is tartalmaznak. A lámpa sarkaira áramkorlátozó előtét-ellenálláson keresztül kapcsoljuk a tápfeszültséget. Ekkor a segédelektrodák és a főelektroda közt meginduló néhány milliamperes áram hatására a cső melegedni kezd. A folyamat végére a fém egy része elpárolog és beindul a vezetés, az áram amper nagyságú lesz. Előtét-ellenállásnak izzólámpát használunk, ami az áram növekedésekor lecsökkenti a lámpára jutó feszültséget, ugyanis az izzólámpa ellenállása a lámpa hőmérsékletével, s így a rajta átfolyó árammal nő. Kezdetben nagy előtét-ellenállást alkalmazunk, amit egy 3 állású kapcsolóval fokozatosan csökkenthetünk. Először mindig a legnagyobb ellenállást kapcsoljuk be és némi várakozás után kapcsolhatjuk a következő kisebb ellenállás fokozatot. A kisülési csövek ultraibolya sugárzást is kibocsátanak. A spektrállámpák ezért fémházba vannak helyezve, és felhelyezhetőek a TB-2 spektroszkópra. **Közvetlenül ne nézzen a lámpa fényébe, mert kötőhártya gyulladást okozhat!** A lámpák színképeiben különböző intenzitású vonalak vannak. Az emberi szem működése miatt célszerű sötétben dolgozni, így a kisebb intenzitású vonalakat is észleljük. A vonalak fényessége a rés nyitásával növelhető, de ekkor a vonalak kiszélesednek, és a leolvasás kevésbé pontos. A leolvasást úgy célszerű végezni, hogy a dobot kiinduláskor a legkisebb hullámhosszú állásba forgatjuk és széles rés mellett a hullámhosszt a dob forgatásával, lassan növeljük. Mikor a látómezőbe megjelenik egy vonal, a rést a lehető legkisebbre szűkítjük, hogy a vonal még látható legyen és rávisszük a szálkeresztre. Leolvassuk a mutató állását a dobon. A dob beosztása nem egyenletes, alsó tartományban a fél, felsőbb tartományban nanométeres a vonalbeosztás. Ezt a pontosságot fokozni tudjuk a két beosztás közti távolság megbecslésével.

## 5.6. Gyakorló kérdések

1. Mik a Bohr-modell állításai?
2. Milyen energiaszintek lehetségesek hidrogénre a Bohr-modell alapján?
3. Mi a Rydberg-állandó?
4. Hogyan tudja megmérni a proton és elektron tömegarányát?
5. Alkáli atomoknál miért függ az elektron energiája a mellékvantumszámtól?
6. Mi a finomszerkezeti állandó?
7. Hogy épül fel a Bunsen-spektroszkóp?
8. Mi az Abbe-prizma és miért használják a TB-2 spektroszkópban?
9. Hogyan működnek a spektrállámpák?

10. Mik a Grotrian-diagramok?

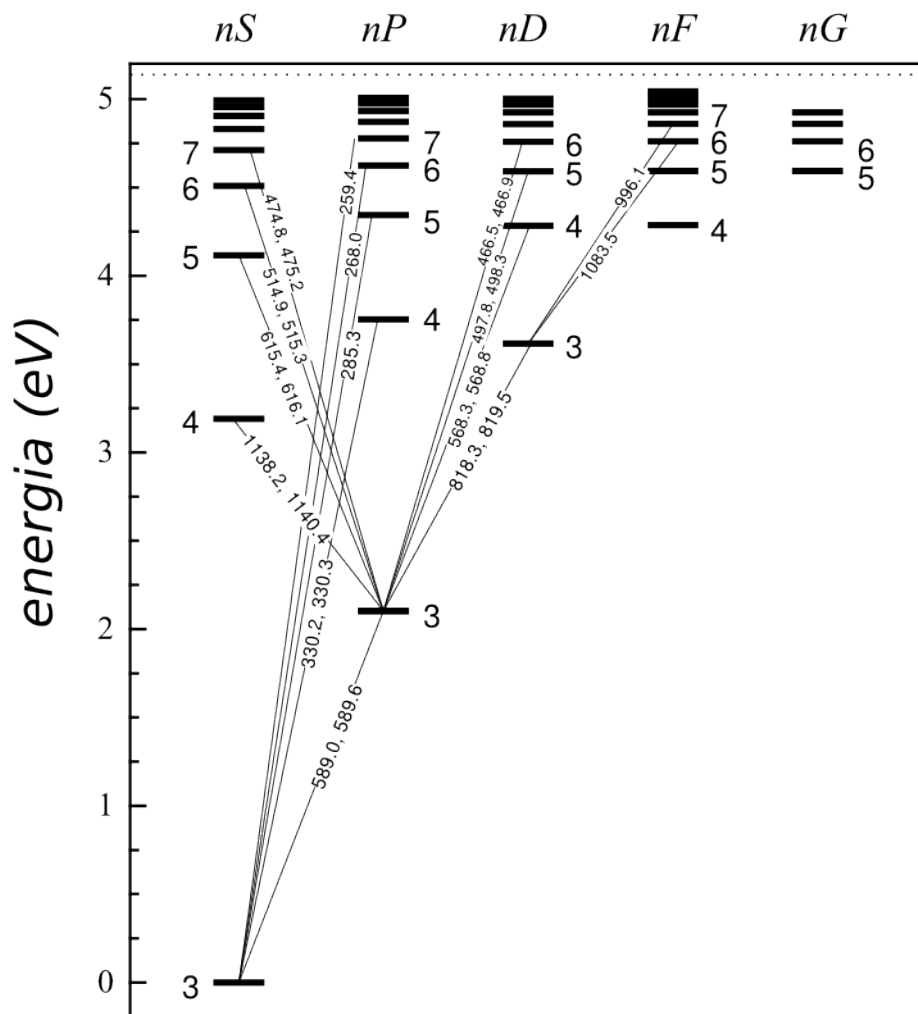
11. A prizma felbontóképessége 400 nm-en 16000, 800 nm-en 4000. Hol érdemes ez alapján mérni a deutérium-hidrogén lámpa vonalait, ha különbségük 0,1 nm?

## 5.7. Mérési feladatok

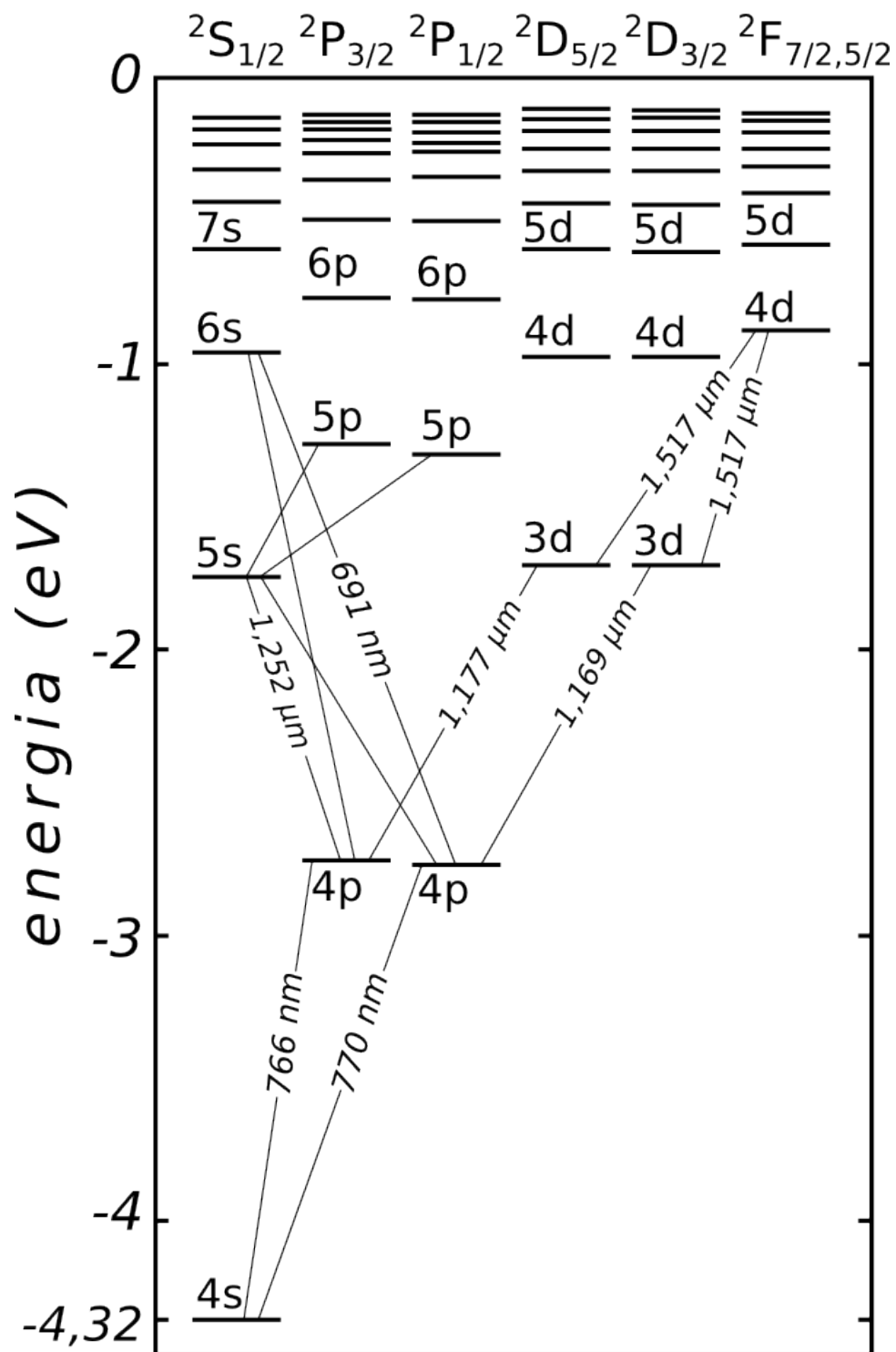
Mérések előtt a Bunsen-féle spektroszkóppal végezzen tájékoztató mérést! Ezzel a készüléssel a lámpák teljes spektrumát egyben látja, természetesen jóval kisebb felbontásban, mint a TB-2-vel.

- A higany- és kadmium-lámpa segítségével a mechanikai hibák kiküszöbölésére kalibráljuk a spektroszkópot! Vegye fel mindkét lámpa összes vonalát!
- A Hg és Cd mért vonalaihoz keresse ki a spektrálvonal táblázatból a mért vonalak és a valódi vonalak különbségét és ábrázolja egy közös grafikonon a mért vonalak függvényébe! A további mérések vonalait korrigálni kell majd. Ezt lineáris interpolációval végezze. Egy új mért vonal hibáját a kalibrációban öt közrefogó szereplő két vonal hibáiból határozza meg, feltételezve, hogy e kis szakaszon a hiba lineárisan változik. Minden mért vonalat a hozzá tartozó hibával korrigáljon!
- Mérje meg a hidrogén lámpa és a deutériumos lámpa vonalas színképét! A Balmer-sorozat minden egyes vonalaiból határozza meg az  $R_h$  Rydberg-állandót és azok átlagát!
- A proton és az elektron tömegének aránya (5.4) alapján kiszámítható. Számítsa ki, vagy becsülje meg a deutérium-hidrogén lámpa vonalaiból ezt az arányt!
- Határozza meg a Planck-állandót az (5.3) és az (5.4) egyenletek felhasználásával!
- Vegye fel a Na, K, Ru lámpák spektrumát!
- Azonosítsa a mellékelt Grotrian-diagramok (5.7., 5.8., 5.9. ábrák) alapján az átmeneteket!
- Határozza meg a Na dublettjéből az  $\alpha$  finomszerkezeti állandót az (5.6) összefüggés segítségével!

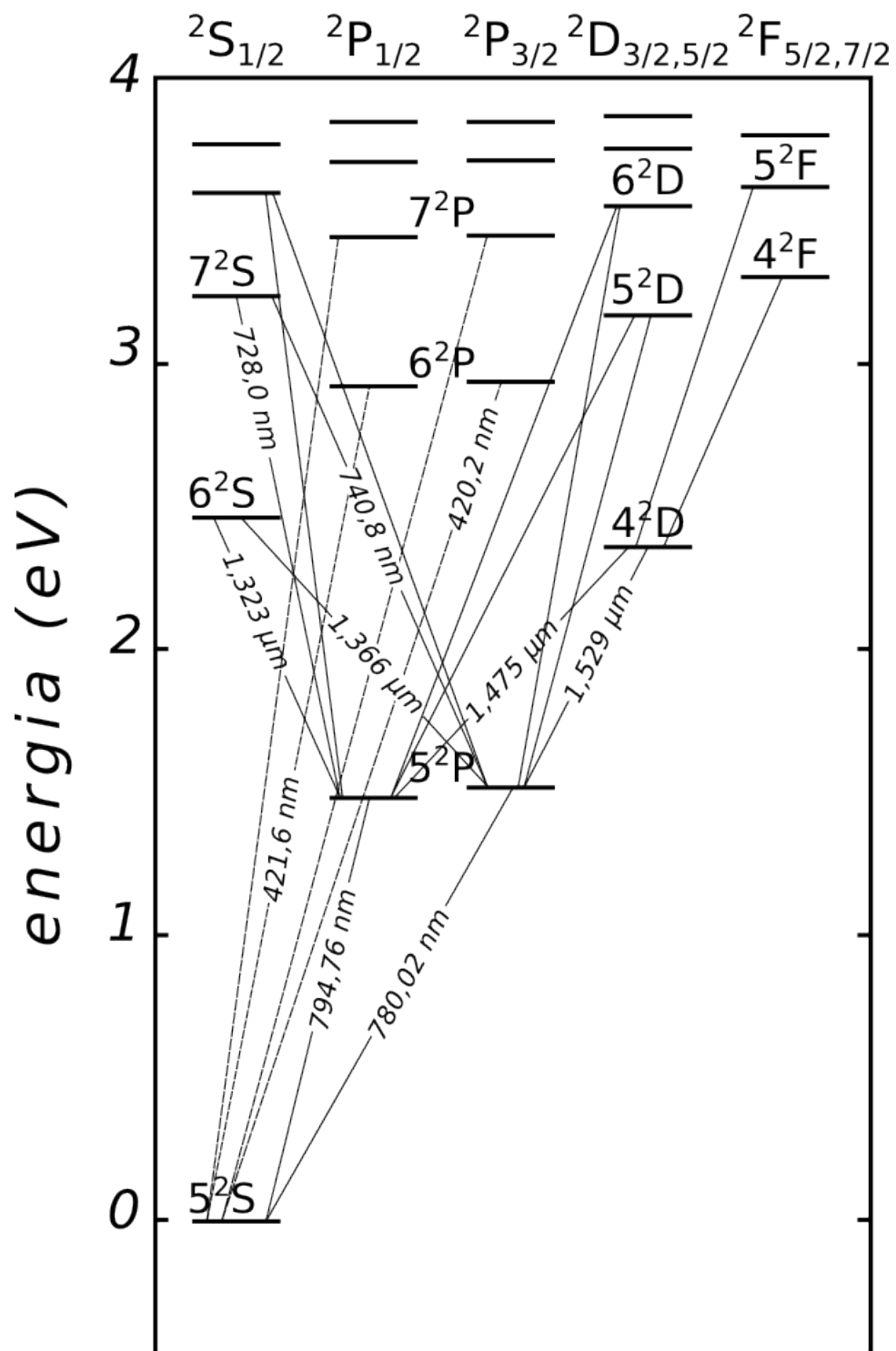
### 5.7.1. Grotrian-diagramok



5.7. ábra. Na Grotrian-diagram



5.8. ábra. K Grotrian-diagram



5.9. ábra. Rb Grotrian-diagram

## 6. fejezet

# Zeeman-effektus (Koltai János)

### 6.1. Bevezetés

Ha egy atomot külső mágneses térbe helyezünk, az energiaszintjei eltolódnak, az eredetileg degenerált szintjei felhasadhatnak, ezt a jelenséget nevezzük Zeeman-effektusnak. A felhasadást az atomi mágneses momentumok ( $\vec{\mu}$ ) és a külső mágneses tér ( $\vec{B}$ ) kölcsönhatásaként fellépő energia okozza:

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (6.1)$$

A (6.1) kifejezésben a skalárszorzat függ a mágneses tér és a mágneses momentum relatív irányától. A mágneses magrezonancia (NMR) és az elektron spin rezonancia (ESR) egyaránt az atomi energiaszintek Zeeman-felhasadásának következménye. Az NMR esetében a felhasadások a mag mágneses momentum és a nagy statikus mágneses tér irányától függenek. A magrezonancia során egy kisebb, váltakozó elektromágneses térrel (jellemzően a rádiófrekvenciás tartományban ( $\nu = 20$  MHz)) a magmomentumok közti átmenet hozható létre. Az ESR-ben a Zeeman-felhasadás az elektronok mágneses momentumától függ és ezért egy sokkal nagyobb energiájú (jellemzően  $\nu = 10$  GHz) váltakozó elektromágneses tér kell a rezonancia létrejöttéhez.

Ebben a kísérletben az optikai Zeeman-effektust fogjuk vizsgálni, ami bizonyos értelemben kicsit bonyolultabb, mert mindig két energiaszint felhasadását kell egyszerre figyelembe venni. Az optikai Zeeman-effektus során az atom egy gerjesztett állapotból alapállapotba (vagy egy alacsonyabb energiájú gerjesztett állapotba) relaxál, és az energiaszintek közötti energia egy foton formájában sugárzódik ki. Ha ez a folyamat külső mágneses térben zajlik, akkor mind a kezdő, mind a végállapot energiaszintjei felhasadhatnak és ennek megfelelően többféle, kicsit különböző energiájú fotont figyelhetünk meg.

Ezt a jelenséget 1896-ban Zeeman<sup>1</sup> fedezte fel, és magyarázta meg a Bohr-atommodell

---

<sup>1</sup>Pieter Zeeman (1865-1943), holland fizikus. 1902-ben Hendrik Lorentzcel megosztott Nobel-díjat kapott a később róla elnevezett jelenség felfedezéséért.



keretében. A Zeeman–Lorentz-féle magyarázatban a mágneses térben mozgó elektronokra Lorentz-erő hat, ami kissé módosítja a pályájukat és ezáltal az energiájukat. Ez az energiaváltozás függ a pálya irányától, ha merőleges a pálya a mágneses térre, akkor a  $\Delta E$  energia pozitív vagy negatív lesz, attól függően, hogy az elektron mozgása a pálya mentén az óramutató járásával egyező vagy ellenkező. Ha a mágneses tér a pálya síkjába esik, akkor pedig a Lorentz-erő átlaga egy körbejárás során zérus lesz, és emiatt a  $\Delta E = 0$  lesz. Ez az érvelés minden esetben a spektrumvonalak hármas („normális”) felhasadására vezet. Egy körültekintőbb tárgyalás ugyanezt az eredményt adja tetszőleges irányultságú pálya esetén. Egy kvantummechanikai tárgyalás nem a Lorentz-erőn alapul, hanem azon, hogy egy adott pályaimpulzus-momentumú elektronhoz  $\mu_l$  mágneses momentum kapcsolódik, és a (6.1) egyenletnek megfelelően egy energia-felhasadásra vezet. Ez a felhasadás természetesen függ a mágneses momentum és külső mágneses tér relatív irányultságától.

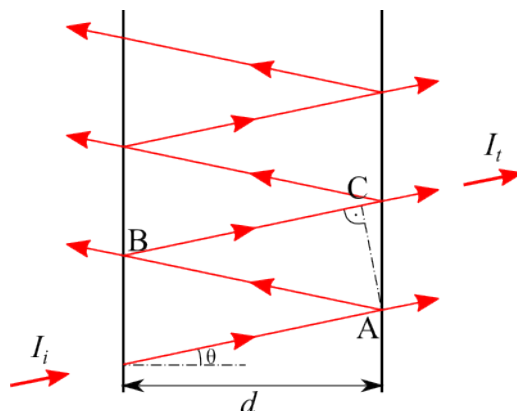
A gyakorlatban a „normális” három vonalas Zeeman-felhasadást ritkán tudjuk megfigyelni. Általában egy nagyfelbontású spektroszkóppal több, mint három vonalat találunk, sőt, ha éppen három vonalat találunk, akkor is azok nem a Zeeman-Lorentz féle érvelésnek megfelelően függnek a mágneses tértől. Ezt az „anomális” Zeeman-effektust csak évekkel később, az elektron spinjének felfedezését követően lehetett megmagyarázni. Az elektron spinje, vagyis saját impulzusmomentuma, egy belső szabadsági fok, amihez szintén kapcsolódik mágneses momentum, csak a pályából származó mágneses momentumtól eltérő mértékű, nagyjából annak kétszerese.

A mérés során a *higany*  $^3P_2 \rightarrow ^3S_1$ , zöld vonalának Zeeman-felhasadását fogjuk vizsgálni, a kis mágneses tér ( $< 1$  T) határesetben. Mivel a felhasadás kicsi ( $B = 1$  T mágneses tér esetén is 0,01 nm nagyságrendű), megfigyeléséhez nagyfelbontású spektroszkópiai módszert kell alkalmazni, jelen esetben a felhasadásokat Fábry–Perot-interferométerrel figyeljük meg. A mérés elvégzése előtt szükséges az A függelék elolvasni, ahol a Zeeman-effektusról bőszéges leírás található!

## 6.2. A Fábry–Perot-interferométer

Tekintsünk két, egymástól  $d$  távolságban lévő, párhuzamos üveglemezt, melyre  $\lambda$  hullámhosszú, monokromatikus fénysugár esik be (6.1 ábra)! Az üveglemezek belső felületei részben tükrözőek, így ha a  $\theta$  beesési szög kicsi, a sugár sokszorosan reflektálódik az üveglemezek között. A jobb oldalon kilépő sugarakra az optikai úthossz különböző, azok a végtelenben, vagy egy gyűjtőlencse fókuszsíkjában interferálnak (6.1). Jelölje  $\delta l$  az optikai úthosszak különbségét a szomszédosan kilépő (eggyel többször oda-vissza reflektálódott) sugarak esetén. A 6.1 ábráról leolvasható, hogy fennáll a következő összefüggés:

$$\delta l = \overline{AB} + \overline{BC} = 2d \cos \theta, \quad (6.2)$$



6.1. ábra. Egy sugár többszöri visszaverődése a Fábry–Perot-interferométerben

ahonnan a két sugár közötti fáziskülönbség:

$$\delta\varphi = 2\pi \frac{\delta l}{\lambda} + \varphi_1 + \varphi_2 = 4\pi \cos\theta \frac{d}{\lambda} + \varphi_1 + \varphi_2, \quad (6.3)$$

ahol  $\varphi_1, \varphi_2$  a fémrétegeken visszaverődéskor kapott fázisváltozás. A beesési szögtől függően az átmenő fény interferenciájában erősítés vagy gyengítés (kioltás) lép fel. Az erősítés feltétele most is  $\delta\varphi = 2\pi m$ , ahol  $m$  egy tetszőleges egész szám. Ha eltekintünk a fémrétegeken visszaverődéskor kapott fázisváltozásoktól, akkor az  $m$ -ed rendű erősítés iránya a következő lesz:

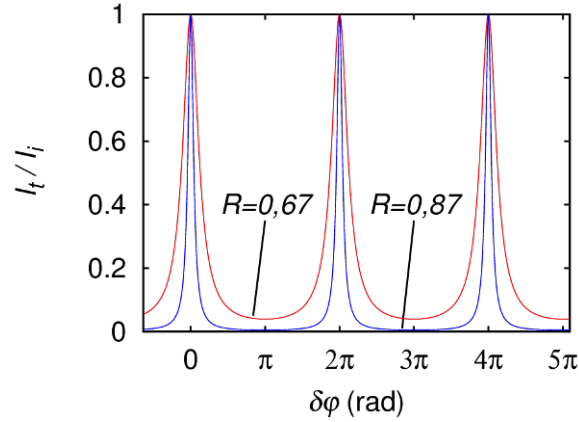
$$\cos\theta_m = \frac{\lambda m}{2d}. \quad (6.4)$$

Megjegyezzük, hogy kis szögekre  $m$  nagy szám lesz, ugyanis be szokás vezetni  $m_0$ -át, ami a fenti egyenlet megoldása  $\theta = 0$  szög esetén, azaz  $m_0 = 2d/\lambda$ . Szokásos paraméterek mellett  $m_0 \approx 10^4$ .

### 6.2.1. Az interferométeren átmenő fény intenzitása

Az interferométeren átmenő fény intenzitásának részletesebb analizéséhez kiszámíthatjuk az átmenő fény elektromos terének amplitúdóját ( $E_t^0$ ) a beeső fény elektromos terének amplitúdójából ( $E_i^0$ ), valamint az átmenő fénysugarak időtől függő elektromos térerősségeinek szuperponálásából – a megfelelő fázisfaktorok figyelembevételével. A  $k$ -adik átmenő fénysugár elektromos tere:  $E_{tk} = E_{tk}^0 \exp(i\omega t)$ , ahol  $k = 0$  az első átmenő (nem reflektálódott) fénysugárnak felel meg. Ha a belső, tükröző felületek reflexiós és átviteli tényezői  $r$  és  $t$ , akkor  $E_{tk}^0 = t^2 r^{2k} E_i^0$ . A  $k$ -adik sugár fázisa  $k\delta\varphi$ -vel késik a  $k = 0$ -dik sugár fázisához képest. A fentiek figyelembevételével az átmenő fény térerőssége:

$$E_t = \sum_{k=0}^{\infty} E_{tk}^0 \exp[i(\omega t - k\delta\varphi)] = E_i^0 \left[ \sum_{k=0}^{\infty} (t^2 r^{2k}) \exp(-ik\delta\varphi) \right] \exp(i\omega t). \quad (6.5)$$



6.2. ábra. A Fábry–Perot-interferométeren átmenő fény intenzitáseloszlása két különböző reflexió esetén ( $R = 0,67$  és  $R = 0,87$ )

Itt feltételeztük, hogy a tükrök között a visszaverődések száma nagy, ezért az összegzésben a felső határt végtelennek vettük. A (6.5) geometriai sort felösszegezve az alábbi kifejezés kapható:

$$E_t = \left[ \frac{T}{1 - R \exp(-i\delta\varphi)} \right] E_i^0 \exp(i\omega t), \quad (6.6)$$

ahol bevezettük a  $T = t^2$  transzmissziós- és  $R = r^2$  reflexiós együtthatókat. Mivel a fényintenzitás a térerősség abszolútértékének négyzetével arányos, a fentiekből az átmenő és a beeső fény intenzitásának aránya:

$$\frac{I_t}{I_i} = \left( \frac{T}{1 - R} \right)^2 \frac{1}{1 + F \sin^2(\delta\varphi/2)}, \quad (6.7)$$

ahol bevezettük az  $F = 4R/(1 - R)^2$  jelölést. A 6.2 ábrán a (6.7) egyenletnek megfelelően az átmenő fény intenzitását ábrázoltuk a fáziskülönbség függvényeként két különböző  $R$  reflexió esetében. Feltételeztük, hogy a tükröző rétegek abszorpciója zérus, azaz teljesül a  $T + R = 1$  összefüggés. Az ábrán látható, hogy a maximumok periodikusan a  $\varphi = 2\pi m$  értékeknél lépnek fel. Minél tökéletesebb a lemezeken a reflexió, annál keskenyebb a rezonanciák az intenzitásban. Mint azt később látni fogjuk ez összefüggésben áll a spektroszkóp felbontóképességével.

### 6.2.2. Kísérleti alkalmazások

A Fabry–Perot-interferométer egy nagyfelbontású spektroszkópiai eszköz, amely többféle elrendezésben is használható. Egy szokásos elrendezésben az interferométeren áthaladó, párhuzamos nyaláb intenzitását mérik az interferométer mögött, egy gyűjtőlencse fókuszpontjában elhelyezett, pontszerű résen (pinhole) keresztül. Az interferométert feltöltik a

vizsgált gázzal. Finoman változtatva az interferométerben lévő gáz törésmutatóját (pl. a nyomás vagy a hőmérséklet változtatásával) az intenzitás maximumok az interferencia miatt jellegzetesen módosulnak. Az ilyen fajta mérés kiértékeléséhez a (6.3) kifejezésben a közeg törésmutatóját is figyelembe kell venni az optikai úthosszkülönbség számolásakor.

A jelen kísérletben alkalmazott elrendezés a 6.3 ábrán látható. Egy kiterjedt fényforrás sugarait egy gyűjtőlencse kis divergenciájú nyalábként az interferométerre vetíti. A rendszer hengeres szimmetriája miatt a tágulóan beeső nyaláb az interferométer mögött egy színes gyűrűrendszerként képződik le. Ez akár végtelenre akkomodált szemmel is megfigyelhető. A gyűrűk kvantitatív megértéséhez tekintsünk monokromatikus nyalábot, és leképezésként használjunk egy második gyűjtőlencsét a fókuszsjában elhelyezett ernyővel! A gyűjtőlencse az optikai tengellyel  $\theta$  szöget bezáró párhuzamos nyalábot a fókuszsjában egy pontba képezi le, melynek távolsága az optikai tengelytől:

$$\overline{OP_\theta} = D/2 = f \operatorname{tg} \theta, \quad (6.8)$$

ahol  $f$  a lencse fókusztávolsága,  $D$  pedig a kialakuló gyűrű átmérője lesz. Ha figyelembe vesszük a (6.4) interferencia-feltételt, akkor paraxiális sugarakra ( $\theta_m$  kicsi, azaz  $\operatorname{tg} \theta_m \approx \sin \theta_m$ ) adódik, hogy:

$$\left(\frac{D_m}{2f}\right)^2 = 1 - \left(\frac{\lambda m}{2d}\right)^2 = \left(1 + \frac{\lambda m}{2d}\right) \left(1 - \frac{\lambda m}{2d}\right). \quad (6.9)$$

Ha figyelembe vesszük, hogy  $m, m_0 \gg m_0 - m$ , a következő alakra juthatunk:

$$D_m^2 = 8f^2 \left(1 - \frac{\lambda m}{2d}\right). \quad (6.10)$$

Ez a kifejezés az alapja a mérés kiértékelésének. A (6.10) képlet  $m$ -ben lineáris, tehát a szomszédos gyűrűk átmérőnégyzeteinek különbsége mindig állandó lesz:

$$D_{m-1}^2 - D_m^2 = 8f^2 \frac{\lambda}{2d} = \operatorname{const}. \quad (6.11)$$

Ez a kifejezés lehetőséget teremt a Fabry–Perot-interferométer kalibrálásához, ha ismerjük a lencse fókusztávolságát és a monokromatikus nyaláb hullámhosszát, vagy a lencse fókusztávolságát számolhatjuk ki, ha az interferométer tükreinek távolságát ismerjük. A mérés során ennek kicsit módosított alakját használjuk majd a kalibráláshoz.

A (6.10) képlet alapján tudjuk a felhasadások következményeképpen kialakuló interferenciagyűrűket értelmezni. Ha feltételezzük, hogy az interferenciaképet két közeli hullámhosszú monokromatikus nyaláb hozza létre, melyeknek a hullámhosszai rendre  $\lambda$  és  $\lambda + \Delta\lambda$ , akkor a gyűrűk átmérői között az alábbi összefüggés fog teljesülni:

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda}{8f^2} (D_m^2 - D_m'^2). \quad (6.12)$$

A mérés során mindvégig ezen formula alapján fogjuk a Zeeman-felhasadást kiszámolni.

### 6.2.3. Spektrális jellemzők, felbontóképesség

A Fabry–Perot-interferométer spektrális jellemzésére több paramétert szokás bevezetni. Az egyik a *szabad spektrális tartomány* ( $\Delta\lambda_0$ ), melyet úgy értelmezhetünk, hogy azon két közeli spektrumvonal hullámhosszának különbsége, melyek két szomszédos rendben azonos átmérőjű interferenciagyűrűket hoznak létre. A (6.10) egyenlet alapján a szabad spektrális tartományra a következő eredmény adódik:

$$\Delta\lambda_0 = \frac{\lambda}{m} \approx \frac{\lambda}{m_0} = \frac{\lambda^2}{2d}, \quad (6.13)$$

ahol felhasználtuk, hogy  $m$  nagy szám és közelíthettük  $m_0$ -val.

A szabad spektrális tartomány meghatározza azt a spektrumtartományt, mely egyidejűleg az interferométerrel megfigyelhető, a különböző rendű gyűrűk összekeveredése nélkül. Mivel a szabad spektrális tartomány a Fábry–Perot-interferométernél kicsi, ezért gyakran más spektrométerrel kombinálva alkalmazzák. A szabad spektrális tartomány a  $d$  lemeztávolság növelésével csökken.

Az interferométer *felbontóképessége* többféleképpen is definiálható. Az  $F_0$  felbontást az intenzitáseloszlás (6.2 ábra) két szomszédos maximuma közötti  $\delta\varphi$  és a maximum körüli félértékszélesség ( $\gamma$ ) hányadosaként definiáljuk. A félértékszélesség a (6.7) egyenletből számolható,  $\gamma = 2\delta\varphi_0$ , ahol teljesül az alábbi feltétel:

$$F \sin^2(\delta\varphi_0/2) = 1. \quad (6.14)$$

Feltételezve, hogy  $F \gg 1$ , azt kapjuk, hogy  $\gamma = 4/\sqrt{F}$ . Mivel a két intenzitásmaximum távolsága a (6.3) egyenlet szerint  $2\pi$ , az  $F_0$ -ra az alábbi eredmény adódik:

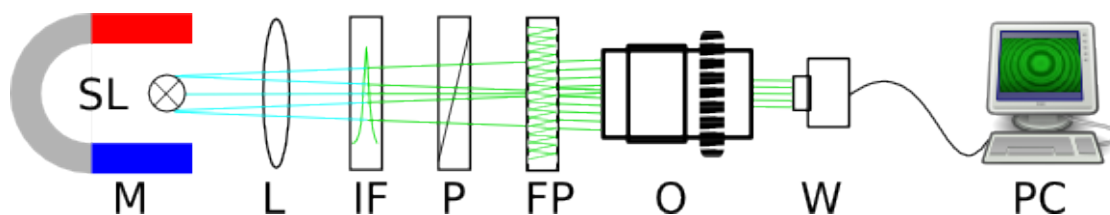
$$F_0 = \frac{2\pi}{\gamma} = \frac{\pi\sqrt{F}}{2} = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R}. \quad (6.15)$$

A fázisszögre megadott  $\gamma$  félértékszélesség átszámítható hullámhosszkülönbségre ( $\delta\lambda$ ) is a (6.3) egyenlet segítségével, a  $\delta\varphi$  függvény  $\lambda$  szerinti deriváltjának felhasználásával:

$$\delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2d} \frac{1-R}{\pi\sqrt{R}}. \quad (6.16)$$

A  $\delta\lambda$  – definíció szerint – két olyan spektrális vonal hullámhosszkülönbsége, mely egymástól még megkülönböztethető (Rayleigh-kritérium). A  $\delta\lambda$  csökkenthető a  $d$  lemeztávolság növelésével. Spektroszkópiában szokásos az adott spektrométer felbontóképességét a  $\lambda$  és  $\delta\lambda$  hányadosaként definiálni ( $R_0$ ):

$$R_0 = \frac{\lambda}{\delta\lambda} = \frac{2d}{\lambda} \frac{1-R}{\pi\sqrt{R}}. \quad (6.17)$$



6.3. ábra. A mérési elrendezés vázlatos rajza: SL - spektrállámpa, M - elektromágnes, L - gyűjtőlencse, IF - interferencia szűrő, P - polarizátor, FP - Fabry-Perot interferométer, O - objektív, W - webkamera, PC - számítógép

A Fabry–Perot-interferométerre az  $F_0$  felbontóképesség a jellemzőbb. Könnyen belátható, hogy  $F_0$  egyúttal megadja az ún. *effektív interferencia számot* is. Ez utóbbi – definíció szerint – az a szám, amely megadja, hogy hány felbontható vonal fér bele a szabad spektrális tartományba, azaz  $F_0$ -ra fennáll a következő összefüggés:

$$F_0 = \frac{\Delta\lambda_0}{\delta\lambda}. \quad (6.18)$$

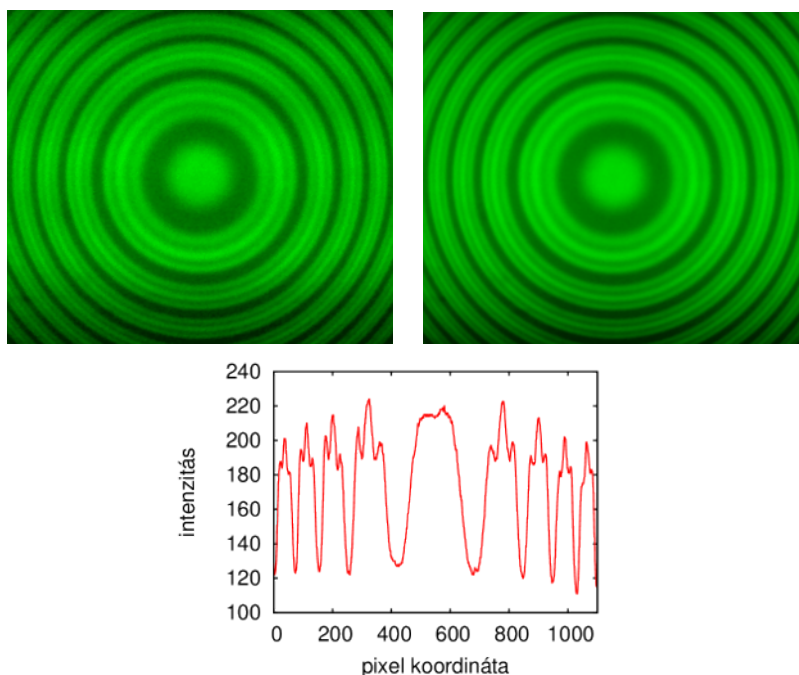
$F_0$  csak a tükröző felületek reflexiójától függ, a reflexiót növelve  $F_0$  is nő, az interferométer fényereje viszont csökken.

### 6.3. A mérés menete

A kísérleti elrendezés vázlatos összeállítása a 6.3 ábrán látható. Az elektromágnes (M) pólusai között helyezkedik el a spektrálizzó (SL). A spektrálizzó fénye egy gyűjtőlencsével (L) kissé széttartó nyalábként a Fabry–Perot-interferométerre jut. Az interferencia szűrő (IF) segítségével kiválaszthatjuk a vizsgálandó spektrálvonalat, a polarizátorral (P) pedig a mágneses térrel párhuzamos ( $\pi$ ) illetve arra merőleges ( $\sigma$ ) komponenseket tudjuk majd szétválasztani. A Zeeman-felhasadást ebben az elrendezésben a mágneses térre merőleges irányban kilépő fotonokon figyeljük meg. Elvileg lehetséges lenne a térrel párhuzamos megfigyeles is, csak ahhoz a tekercsek magjára lyukat kellene fúrni, hogy az izzó fénye arra is ki tudjon a tekercsek közül lépni. A gyűrűket egy objektív (O) a webkamera (W) bemenetére vetíti, a keletkező képeket számítógépen (PC) rögzítjük.

A gyűrűket megfigyelhetjük szabad szemmel is. Ehhez el kell távolítani az objektívet és a webkamerát. Ezt felhasználhatjuk a Fabry–Perot-interferométer lemezeinek párhuzamosra állítására: ha szemünket az optikai tengelyre merőlegesen mozgatjuk – rossz beállítás esetén – a gyűrűk egyes irányokban mozogva tágulnak, míg más irányban szűkülnek. A táguló iránynak megfelelő lemeztávolságot ekkor finoman csökkenteni kell. A lemezek állítására az interferométer előlapján három csavar szolgál.

Az objektívvel és webkamerával történő megfigyelés esetén kissé módosítani kell a (6.11) és a (6.12) formulákat. Mivel az első lencse után további lineáris leképezések



6.4. ábra. A Fabry–Perot-interferométeren keletkező gyűrűrendszer Zeeman-felhasadása, a higany zöld vonalára, párhuzamos polarizátor állás ( $\pi$ ) esetén

következnek, amelyek nagyítása nem ismert, célszerű az alábbi alakokat használni:

$$D_{m-1}^2 - D_m^2 = N \frac{\lambda}{2d}, \quad (6.19)$$

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda}{N}(D_m^2 - D_m'^2), \quad (6.20)$$

ahol  $N$  a nagyítási tényező, melyet a kalibráció során az első egyenletből határozunk meg. Fontos, hogy ezután már a rendszer nagyításán ne változtassunk! A kamerával készült képek minősége nagymértékben javítható több kép átlagolásával, ezért képsorozatokat készítsünk a mérés során, majd a képfeldolgozás első lépéseként átlagoljuk azokat. A 6.4 ábrán példaként egy  $\pi$  átmenetéről készült kép látható. A nyers kép mellett az átlagolás eredménye, valamint az átmérő mentén vett intenzitáseloszlás látszik.

## 6.4. Számolási feladatok

- Számolja ki a g-faktor értékét a  $^3P$  állapotokra!
- Számolja ki a higany zöld vonalának relatív intenzitásait!

## 6.5. Gyakorló kérdések

1. Milyen kölcsönhatás eredménye a Zeeman-felhasadás?
2. Mi a spin-pálya csatolás Hamilton-operátora?
3. Mi a Zeeman-kölcsönhatás Hamilton-operátora?
4. Írja fel a Zeeman-felhasadás kis mágneses tér esetén érvényes alakját!
5. Mi az a Bohr-magneton? Mekkora a Bohr-magneton értéke?
6. Mit jelent a  $^3P_2$  jelölés?
7. Mekkora lehet  $J$  értéke,  $L = 1$  és  $S = 1$  esetén?
8. Mik egy  $J = 2$  spin lehetséges vetületei?
9. Hányszorosan degenerált egy  $S = 42$  spin? Mekkora a spin, ha a spin multiplicitás 42?
10. Mi az a spintriplett/spinszinglett?
11. Írjon fel két feles spinű részecskére szimmetrikus/antiszimmetrikus spinhullámfüggvényt!
12. Hogyan hangzik a Pauli-elv a hullámfüggvényekre kimondva?
13. Mik azok a (jó) kvantumszámok és mire valók?
14. Mekkora az optikai fáziskülönbség egy Fabry–Perot-interferométer esetén?
15. Hogyan lehet energiát mérni a Fabry–Perot-interferométerrel?

## 6.6. Mérési feladatok

A spektrállámpa ultraibolya fényt is kibocsájt, mely a szemre ártalmas lehet, ezért ne nézzünk tartósan a spektrállámpába! Az elektromágnes tápegységét mindig zérusra állított áramerősségnél kapcsoljuk ki vagy be!

1. Végezzük el a berendezés optikai beállítását!



2. A kvalitatív vizsgálódás végeztével kalibrációként vegyük fel zérus mágneses tér mellett az intenzitáseloszlást! Ebből a (6.19) képletben az  $N$  nagyítási tényező meghatározható ( $\lambda = 546,07 \text{ nm}$ ,  $d = 8 \text{ mm}$ ). Fontos, hogy ezután az optikai beállítást már nem szabad megváltoztatni! A kamerával készült képek minősége nagymértékben javítható több kép átlagolásával, ezért képsorozatot (legalább 10 kép) készítsünk a mérés során, majd a képfeldolgozás első lépéseként átlagoljuk azokat!
3. 5-5 mágneses tér értéknél vizsgáljuk a  $\sigma$ - illetve a  $\pi$ -átmeneteket! A Zeeman-felhasadásokat a (6.20) képlet alapján határozhatjuk meg. Ábrázoljuk a Zeeman-felhasadásokat a mágneses tér függvényeként! A tekercsre  $I$  áramot kapcsolva  $B = bI$  mágneses tér hat a spektrálizzónál, ahol  $b = 0,89 \text{ T/A}$ .
4. A Zeeman-felhasadások mágneses tér függéséből számoljuk ki a Bohr-magneton értékét! Értékeljük a kapott eredményeket!

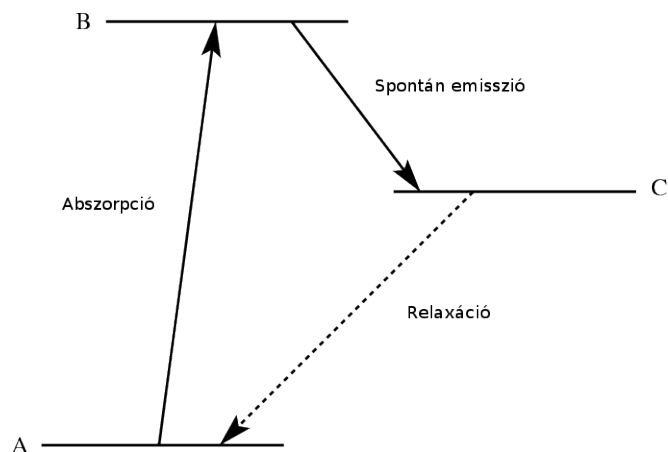
## 7. fejezet

# Optikai pumpálás (Szabó Bálint)

### 7.1. Bevezetés

Az optikai pumpálás egy olyan módszer, melynek segítségével - optikai besugárással - az atomok, ionok energiaállapot szerinti (hőmérséklet-) eloszlásában lényeges változásokat lehet előidézni. Pl. az alapállapot Zeeman- vagy hiperfinom felhasadás (lásd az **A.** függelék) következtében fellépő alnívóinak betöltési arányai változtathatók meg ily módon. A betöltési arányokban fellépő változások megfigyelhetők az ezt létrehozó, a mintán áthaladó fényintenzitás változásával, vagy a szórt rezonancia fény intenzitása, ill. polarizáció változásával. A termikus relaxáció és a rádiófrekvenciás rezonancia is tanulmányozható segítségével. Az optikai pumpálás egyszerűsített elvét a **7.1.** ábra szemlélteti. Külső, polarizált és frekvencia-szelektált fény egy atomban  $A \rightarrow B$  átmenetet hoz létre, melyet egy spontán  $B \rightarrow C$  emisszió követ. A  $C \rightarrow A$  átmenet sugárzás nélküli, relaxációs átmenet (legtöbbször ütközésen keresztül, lásd később). Ennél a folyamatnál a  $C$  állapotba történik a pumpálás, melynek hatásossága függ a pumpáló fény intenzitásától és a hőmérsékleti egyensúlyt ( $A$  és  $C$  szintek között) visszaállító folyamat sebességétől. A  $C$  állapot lehet  $A$ -tól különböző, vagy  $A$  és  $C$  lehetnek egy adott nívó mágneses (Zeeman) vagy hiperfinom felhasadt alnívói. Ez a nívó általában az alapállapot, vagy egy hosszú élettartamú metastabil nívó. Ha a  $C$  az energiaskálán az  $A$  fölött van, akkor a pumpálás során a rendszer energiája nő, ez „fűtési” folyamat. Ha  $A$  és  $C$  az  $1/2$  spinállapot két mágneses alnívója, a „spin-hőmérséklet” nő a pumpálás során. Ha populáció inverzió (lásd a **C.** függelék) következik be a pumpálás által az  $A$  és  $C$  állapotok között, a spinrendszer „negatív abszolút hőmérsékletű” állapotba jut. (Ezt úgy kell érteni, hogy termikus egyensúlyban ez nem következhet be.) A lézer működésénél is egyfajta pumpálási mechanizmussal találkozunk. Ha a  $C$  nívó az  $A$  nívó alatt van, az optikai pumpálás egy „hűtési” folyamat, a spinrendszer hőmérséklete csökken. Zeeman-nívók esetén a fűtés és hűtés változtatható a mágneses tér irányának, vagy a cirkulárisan poláros pumpáló fény polarizációjának megfordításával. Az optikai pumpálás során nemcsak az atomi rendszer

energiája változik, hanem az impulzusmomentumban is fellép változás. A fény impulzusmomentumot ad át a rendszernek. Minden atomi állapothoz meghatározott impulzus- és mágneses momentum tartozik. Az optikai pumpálás egy adott irány szerint polarizálja a rendszert és makroszkopikus mágnesezettséget is létrehoz.



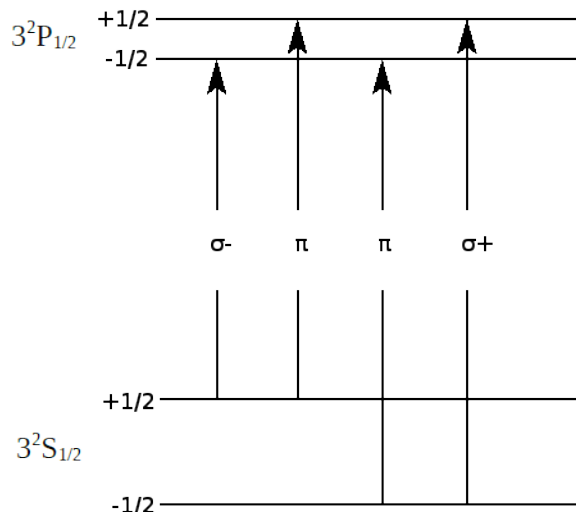
7.1. ábra. Optikai pumpálás három energianívó esetén

A kísérlet során alkálifém (Rb) gőzben vizsgáljuk az optikai pumpálás jelenségét. Kísérletileg megfigyelhető az optikai pumpálás eredménye, a relaxációs folyamatok, továbbá alapvető fizikai mennyiségek (az Rb izotópok magspinjei, magmágneses momentumi) határozhatók meg kísérletileg mágneses rezonancia módszerrel. A kísérlet elvégzése feltételezi az [A. függelék](#) ismeretét!

### 7.1.1. Optikai pumpálás Rb atomokkal

Az optikai pumpálás egyik legegyszerűbb megvalósítási objektumai az alkálifémek gőzei. Itt az első gerjesztési - p - állapot a spin-pálya kölcsönhatás következtében két nívóra hasad. Az alapállapotból való gerjesztés (vagy az abba való visszatérés) adja a jellegzetes  $D_1$  és  $D_2$  vonalakat. A két vonalat megfelelő interferencia szűrővel lehet szétválasztani. A [7.2.](#) ábra az Rb atom alap és az első gerjesztett állapotának külső mágneses térbeli Zeeman-felhasadását, a megengedett átmeneteket, továbbá a polarizációs viszonyokat tünteti fel. (A könnyebb érthetőség kedvéért itt egyenlőre a hiperfinom felhasadást nem vesszük figyelembe.) Előjel konvenció: a  $\Delta m_j = 1$  ( $\sigma^+$ ) átmenetnél a fény a mágneses térre merőleges síkban cirkulárisan polarizált oly módon, hogy azon megfigyelő számára, aki a mágneses tér irányába néz és észleli a fényt, az elektromos vektor az óramutató járásának irányába forog.

Tegyük fel, hogy Rb atomokat tartalmazó mintát  $D_1$ ,  $\sigma^+$  komponenssel világítunk meg. (Ezt egy Rb kisülési csőből kijövő fény megfelelő szűrésével nyerhetjük, lásd ké-



7.2. ábra. Alkálifémek alsó energianívóinak Zeeman-felhasadása és az átmenetek polarizációs viszonyai

sőbb.) Ebben az esetben csak  $m_j = -1/2$  (alap)  $\rightarrow m_j = +1/2$  (gerjesztett) állapotok között jöhet létre átmenet. A gerjesztett állapot bomlása két módon következhet be:  $\sigma^+$  és  $\pi$  átmenetekkel (7.2. ábra). Az előbbinél a gerjesztett atom az eredeti  $m_j = -1/2$  alnívóra, míg az utóbbinál az  $m_j = +1/2$  alnívóra tér vissza. Az átmeneti valószínűségek arányai azt mutatják, hogy három gerjesztett atom közül kettő az  $m_j = -1/2$ , míg egy az  $m_j = +1/2$  alnívóra kerül. Száz atomból, melyek eredetileg (közel) egyenlően oszlottak el a két alnívón, csak 50 tud  $\sigma^+$ -t abszorbeálni, ezek közül  $50/3$  az  $m_j = +1/2$  alnívóra tér vissza. Így az eredetileg egyenlő populáció megváltozik:  $N_+ = 50 + 50/3$ ,  $N_- = 50 - 50/3$ . A polarizáció fokát (P) a következőképp definiálhatjuk:

$$P = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}. \quad (7.1)$$

A fenti esetben a polarizáció fokára  $1/3$ , azaz kb. 30% adódik.

### 7.1.2. Relaxációs folyamatok

Mint korábban említettük, az optikai pumpálás során atomi, vagy magpolarizáció lép fel a Zeeman-alnívók egyensúlytól eltérő betöltöttsége miatt. Ezen folyamat ellen dolgozik a termikus relaxáció, mely a hőmérsékleti egyensúlyt igyekszik visszaállítani. A termikus

relaxációt egy időállandóval ( $T_1$ ) vehetjük figyelembe. Ha az optikai pumpálást hirtelen megszakítjuk, a pumpálás által létrehozott makroszkopikus mágneses momentum (pontosabban annak a külső mágneses tér irányába vett vetülete,  $M$ ) exponenciálisan bomlik le:

$$M(t) = M(0) \exp(-t/T_1). \quad (7.2)$$

Példaként vegyünk az Rb atom S alapállapotának két (Zeeman-felhasadt) mágneses alnívóját. Ha  $\mu$  az adott alnívón levő atom mágneses momentuma és  $N_+$  és  $N_-$  a két alnívó betöltöttsége, akkor fennáll:

$$M = \mu(N_+ - N_-). \quad (7.3)$$

A polarizáció fokára kapjuk (lásd (7.1) egyenletet):

$$P = \frac{M}{\mu N}, \quad (7.4)$$

ahol  $N = N_+ + N_-$ . Legyen  $n = N_+ - N_-$ , akkor:

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n}{T_1}. \quad (7.5)$$

(A (7.5) elsőrendű differenciálegyenlet megértéséhez gondoljunk a  $T_1$  jelentésére.) Ha a pumpálás a „-” alnívóról történik, akkor az ennek során bekövetkező átmenetek száma arányos a besugárzó fény intenzitásával ( $I$ ) és az alsó alnívón levő atomok számával ( $N_-$ ). Így a pumpálás jellemezhető:

$$dN_+ = dN_- = kIN_-dt, \quad (7.6)$$

ahol  $k$  egy arányossági tényező. Bevezetve a  $T_p = 1/kI$  pumpálási időállandót, a (7.6) egyenlet a következő alakba írható:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{N - n}{T_p}. \quad (7.7)$$

A relaxációs és pumpálási effektusokat a (7.5) és a (7.7) egyenletek felhasználásával kapjuk:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{N - n}{T_p} - \frac{n}{T_1}. \quad (7.8)$$

A (7.8) differenciálegyenlet megoldása stacionárius ( $dn/dt = 0$ ) állapotra:

$$n_0 = \frac{N}{1 + \frac{T_p}{T_1}} = \frac{M_0}{\mu} \quad (7.9)$$

Tehát a pumpálás hatásossága a két időállandó ( $T_p$ , és  $T_1$ ) arányától függ. Csökkentve  $T_p$ -t (I növelésével) és növelve  $T_1$ -t (lásd később)  $n_0$  növelhető. (Hasonló folyamatok játszódhatnak le az ESR-nél is.) A (7.8) tranziens megoldása:

$$n = n_0(1 - \exp(-t/\tau)), \quad (7.10)$$

ahol  $\tau$  egy összevont időállandó:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{T_p} + \frac{1}{T_1} \quad (7.11)$$

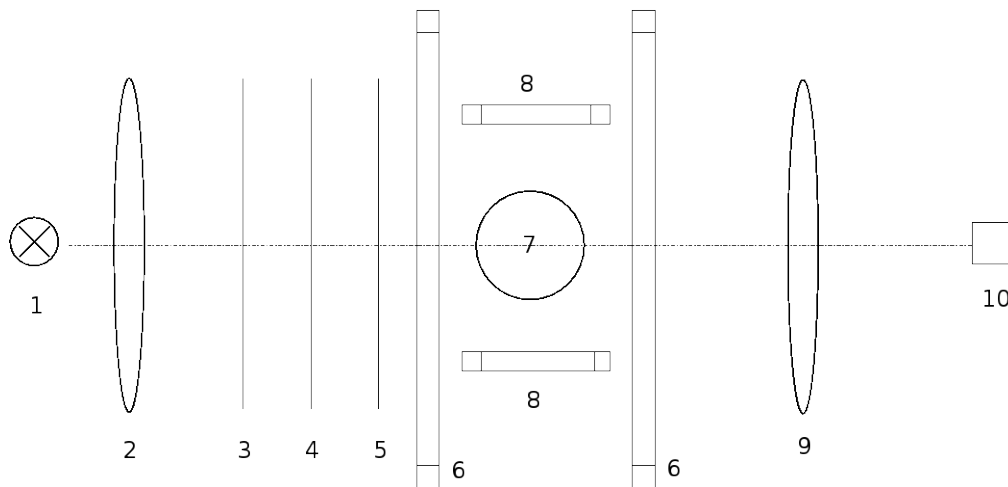
A  $T_1$  időállandó növelése oly módon lehetséges, ha csökkentjük azon atomi ütközések valószínűségét, melyek átmenetet hoznak létre az alapállapot két Zeeman-alnívója között. Diamágneses idegen gáz, mint „puffer” gáz alkalmazása azért célszerű, mert a diamágneses atomokkal való ütközések megőrzik az alapállapotban pumpálással létrehozott orientációs polarizációt, ugyanakkor megakadályozzák (lényegesen csökkentik) a mintatartó edény falával való ütközéseket. Az edény falával való ütközések depolarizációhoz vezetnek. A nálunk alkalmazott puffer gáz kripton, néhány 100 Pa nyomáson.  $T_1$  méréséhez definíció szerint a pumpálást, azaz a megvilágító fényt kell kikapcsolni, és regisztrálni az alacsonyabb energiaszintre való visszatérés időbeli lefolyását.

Ha a mágneses teret kapcsoljuk ki, a 7.2. ábrán látható Zeeman felhasadások eltűnnek, és csak két nívó marad, így tehát pumpálni nem lehet. Azaz a termikus (nem pumpált) egyensúlyhoz relaxál a rendszer a mágneses tér lekapcsolása után, de az ide vezető átmenet gyorsabb, mint a  $T_1$  relaxáció. A külső mágneses térre merőleges irányú, azaz transzverzális elektronspínék átfordulásához tartozó relaxációs időt  $T_2$ -vel jelöljük. Ez a folyamat disszipációval nem jár, a rendszer entrópiája nő azzal, hogy az orientált spínék szétszélednek. 0 mágneses tér esetén is ez, a  $T_1$ -né kisebb időállandó határozza meg a relaxációs folyamatot.

## 7.2. A mérőberendezés

A laboratóriumban rendelkezésre álló berendezésben a rezonancia átmenet a mágneses tér modulációjával figyelhető meg a rádiófrekvenciás tér rögzített frekvenciáinál. A kísérleti berendezés optikai részének vázlatát a 7.3. ábra szemlélteti. A továbbiakban ismertetjük az egyes elemeket.

- 1. Rb-t és Kr puffer gázt tartalmazó nagyfrekvenciás kisülési cső. Ez szolgál fényforrással az optikai pumpáláshoz. A rubídium olvadáspontja 30 Celsius fok, a megfelelő gőznyomás eléréséhez a kisülési csövet (kívülről) fűteni kell. Ezt egy kis fűtőtest látja el, mely a cső nyakához illeszkedik. Az összeállításban a hőmérséklet egy előre beállított értéket vesz fel. A bekapcsolás után kb. 15-30 perc múlva áll be a stabil kisülés.



7.3. ábra. A kísérleti berendezés optikai részének vázlata

- 2. és 9. A sugármenet kialakítására szolgáló két gyűjtőlense.
- 3. Interferenciaszűrő ( $\lambda_{max} = 795nm$ ), mely a  $D_1$  vonalat engedi át.
- 4. és 5. Polarizációs szűrő és  $\lambda/4$ -es lemez a cirkulárisan poláros gerjesztő fény előállítására. Lényeges a két elem helyes beállítása (sorrend és a forgatás). A beállítás úgy történik, hogy amikor már van irányváltó (négyzet) mágneses térben pumpálási jelünk, a jel nagyságát maximálisra állítjuk a  $\lambda/4$ -es lemez (vagy a polarizációs szűrő) forgatásával. Ekkor az abszorpciós csőbe érő fény cirkulárisan poláros, a pumpálás maximális. Erről könnyen meggyőződhetünk azzal, hogy ha ezen beállításhoz képest a  $\lambda/4$ -es lemezt 45 fokkal elforgatjuk, akkor a pumpálási jel eltűnik. A 45 fokos elforgatás lineárisan poláros fényt eredményez és  $\pi$ -komponenssel pumpálás nem valósítható meg (7.2. ábra).
- 6. Helmholtz tekercspár a Zeeman-felhasadást létrehozó mágneses tér előállítására, két db tekercspár van. A második a mágneses tér szinuszos modulációjára szolgál. A tekercspárok vízszintes, a rendszer tengelyével párhuzamos irányú mágneses teret állítanak elő. Megjegyzés: az optikai pumpálásnál kis mágneses tereket alkalmazunk. Az abszorpciós csőben lévő Rb atomok érzik a Föld mágneses terét is, mely nem elhanyagolható a Helmholtz-tekercspárok által előállított mágneses térhez képest. Ezt a kísérlet során végig figyelembe kell venni.
- 7. Rubídiummal és kripton puffer gázzal töltött abszorpciós cső, melyben az optikai pumpálás történik. A megfelelő Rb gőznyomás előállítására a cső fűthető. A fűtés egy kis elektromos fűtőtesttel történik, melynek árama változtatható.

- 8. Tekercspár a rádiófrekvenciás elektromágneses tér létrehozására a rezonanciaátmenetek gerjesztéséhez a MHz-es frekvenciatartományban. Ezen tekercsek meghajtásához a tekercsek felett elhelyezett, öt fokozatban változtatható frekvenciájú (0,5-1,5 MHz tartományban) oszcillátor szolgál.
- 10. Fotodióda az abszorpciós csövön átmenő fény intenzitásának mérésére. Fontos annak megértése, hogy minden, az optikai pumpálás során fellépő változást a fotodióda által detektált jellel észlelünk. A fotodióda jelét egy kompenzációval ellátott erősítő erősíti, melyet oszcilloszkópon figyelhetünk meg.

### 7.3. A rezonancia átmenet és kísérleti megfigyelése

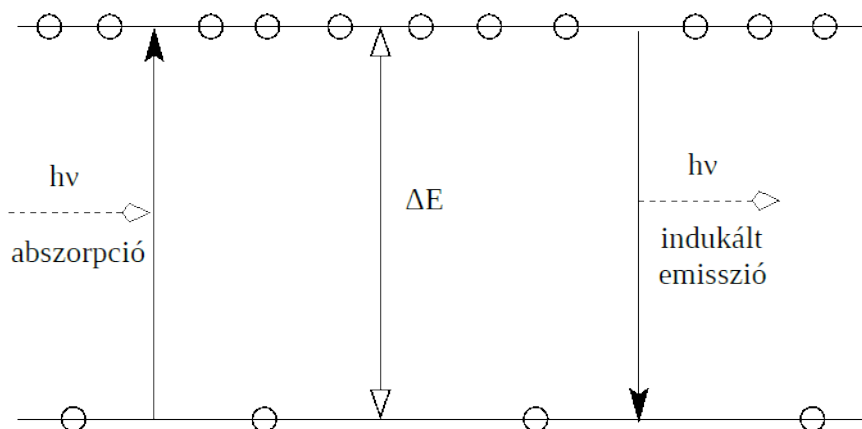
A rezonancia átmenetet leegyszerűsítve tárgyaljuk, azaz a hiperfinom felhasadástól eltekintünk. Azonban az itt elmondottak könnyen általánosíthatók a hiperfinom szerkezetre is. Tegyük fel, hogy az optikai pumpálás az alsó Zeeman-nívóról a felsőre történik, azaz a felső nívó populációja nagyobb, mint az alsóé (7.4. ábra). Ha ekkor a pumpált atomi rendszert egy olyan frekvenciájú ( $\nu$ ) elektromágneses térrel sugározzuk be, melyre teljesül az alábbi rezonancia feltétel:

$$h\nu = \Delta E = \mu_B g_F B \quad (7.12)$$

(lásd az A. függelék), akkor a rádiófrekvenciás tér átmeneteket hozhat létre a két Zeeman-alnívó között. Ez lehet abszorpció, mely a pumpálás irányába változtatja a populációt, de lehet indukált emisszió is, mely a pumpálással ellentétes átmeneteket hoz létre. Az abszorpció és az indukált emisszió valószínűsége egyenlő feltéve, hogy az alsó és a felső nívó betöltöttsége azonos. Azonban rendszerünk pumpált állapotban van, így a két folyamat gyakorisága már nem egyenlő. Mivel a felső Zeeman-alnívón, a pumpálás eredményeként, több atom van, az indukált emisszió gyakorisága nagyobb, ezért a rádiófrekvenciás besugárzás a pumpálás ellen dolgozik, azaz a populáció kiegyenlítése felé hajtja a rendszert. (Könnyen belátható, ha a pumpálás ellentétes irányú, azaz a felső alnívóról az alsóra történik, a végeredmény ugyanez: a rádiófrekvenciás besugárzás a pumpálást kiegyenlíteni törekszik.) A rezonancia átmenet megfigyelésével kísérletünkben a magspin határozható meg, míg nagyobb felbontásnál a mag mágneses momentuma is (lásd az A. függelék).

A rezonancia átmenet kísérleti megfigyelése a következőképp valósítható meg. Rögzített rádiófrekvenciánál a B mágneses teret változtatjuk oly módon, hogy közben átme-gyünk a (7.12) által megadott rezonancia feltételen. Rezonancia esetén az Rb abszorpciós csőben az abszorpció megnő (az áthaladó fény intenzitása csökken), melyet a fotodióda detektál. A rezonancián való áthaladás után az átmenő fény intenzitása visszaáll az eredeti pumpálási szintre. Célszerű a mágneses tér változtatását modulációval megvalósítani. (Ezt alkalmazzák az ún. rezonancia módszereknél, az ESR és az NMR spektroszkópiában





7.4. ábra. Rezonancia átmenetek két Zeeman-felhasadt alnívó között. A körök az alnívók betöltöttségét szemléltetik az adott pumpálásnál

is.) Egy  $B_0$  állandó mágneses térre egy vele párhuzamos, kis amplitúdójú (b) szinuszos mágneses teret viszünk, így az eredő külső mágneses tér  $B_0 + b\sin(\omega t)$  lesz. Ekkor, ha a (7.12) által meghatározott rezonanciához tartozó B mágneses tér nagysága a  $B_0 \pm b$  sávba esik, a moduláció egy periódusa alatt két rezonancia figyelhető meg. A  $B_0$  mágneses teret az egyik Helmholtz-tekerespárral, míg a modulációt a másik tekerespárral állítjuk elő (egyenáramú tápegység, ill. hangfrekvenciás generátor segítségével). A rezonancia átmenet kétsugaras oszcilloszkópon figyelhető meg. Egyik sugárra a modulációval arányos jelet viszünk, míg a másik sugárra a fotodióda jelét. Fokozatosan növelve  $B_0$ -t megjelenik a rezonancia jele, mely a modulációs sávban megkettőződik, majd kilépve a sávból eltűnik. Az Rb két izotópjára elkülönülten megfigyelhető a rezonancia, két különböző modulációs sávban. (A moduláció amplitúdóját, b-t célszerű kis értékre beállítani, hogy a modulációs sávok jól elkülönüljenek egymástól.) Mint már erre korábban felhívtuk a figyelmet, az abszorpciós csőben lévő Rb atomok az eredő mágneses teret érzik, mely több komponensből áll. Egyrészt az általunk előállított modulált mágneses tér egyen- és váltó komponensei, másrészt a Föld mágneses terének vízszintes komponense. Mindezek eredőjét tartalmazza a (7.12) kifejezés. A kísérlet során a (7.12) alapján a  $B \sim \nu$  lineáris összefüggést vizsgáljuk, melyből a magspin meghatározható. Célszerű a modulációból származó mágneses teret oly módon kiejteni, hogy a rezonancia jelet a szinusz zérus értékeinél figyeljük meg. A Föld mágneses terének vízszintes komponense úgy ejthető ki, hogy a rezonanciát a  $B_0$  két ellentétes irányánál is megfigyeljük (a Helmholtz-tekercesen az áram polaritásának váltásával).

## 7.4. Gyakorló kérdések

1. Mi az a Boltzmann-eloszlás? Adja meg képlettel is!
2. Szobahőmérsékleten, 1 T-nál sokkal kisebb mágneses mező esetén milyen a Zeeman nívók betöltése?
3. Mi az az indukált emisszió? Milyen összefüggés van a fotonok közt?
4. Miért kell minimum 3 nívó az optikai pumpáláshoz?
5. A pumpáló fény polarizációja hogyan függ ez össze az elektronok impulzusmomentumának megváltozásával?
6. Lehet-e árnyékolni statikus mágneses teret néhány mm-es fémlemezekkel ill. Faradaykalitkával? Miért?
7. Mi az a kettőstörés?
8. Hogyan lehet lineárisan polarizált fényből cirkulárist előállítani?
9. Mi az a  $\lambda/4$ -es lemez? Milyen anyagból készül?
10. Mire szolgál a mintában lévő puffergáz?
11. Mekkora a Zeeman-felhasadás energiája?
12. Mi az a  $T_1$  relaxáció?

## 7.5. Mérési feladatok

1. A kísérlet elvégzése feltételezi az (A. függelékben foglaltak ismeretét!
2. Gondoljuk át a pumpálási folyamatokat (Zeeman-felhasadást) és a rezonancia átmeneteket a hiperfinom felhasadás figyelembevételével mindkét Rb izotóp esetén.
3. Számítsuk ki az Rb mindkét izotópjának alapállapotára a  $g_j$  és  $g_F$  faktorokat (lásd az A. függelék).
4. A készülékek bekapcsolása után (15-30 perc) figyeljük meg a pumpálási-relaxációs jelet négyyszög mágneses térben kétsugaras oszcilloszkópon. Az egyik sugárra a mágneses térrel arányos jelet, míg a másik sugárra a fotodióda jelét vigyük. Állítsuk be a maximális jelet a polarizátor és a  $\lambda/4$ -es lemez forgatásával. A jel alakjából határozzuk meg a  $\tau$  időállandót (7.11). A négyyszög mágneses tér frekvenciáját célszerű 10-100 Hz között megválasztani.

5. A négyzög mágneses tér amplitúdóját csökkentve, egy bizonyos értéknél előáll az az eset, hogy a Föld mágneses terének vízszintes komponense ki lesz kompenzálva az egyik félperiódusban. Ekkor a fotodióda jelének időfüggése karakterisztikusan megváltozik: azt két különböző időállandó írja le. Az egyik  $\tau$ , a másik  $T_2$ . Ezen jel megfigyelésével  $T_2$  és a Föld mágneses terének vízszintes komponense meghatározható. (Itt feltételezzük, hogy a mérőberendezés optikai tengelye E-D beállítású.)
6. A rezonancia átmenetek megfigyelése. Négy rögzített frekvenciánál határozzuk meg a  $B \sim \nu$  lineáris összefüggést (7.12), melynek segítségével a magspin mindkét izotópra meghatározható az **A**. függelék felhasználásával. A frekvenciát hurokantenna kicsatolással, oszcilloszkópon mérjük.

## 7.6. Ajánlott irodalom

- [1] R. De Zafra: Am. Journ. Phys. 28, 646 (1960).
- [2] R. Benurnof: Am. Journ. Phys. 33, 151 (1965).
- [3] C. Cohen-Taunoudji and A. Kastler: Optical pumping. Progress in Optics, Vol. V. (1966). 3-81. old.
- [4] A. Corney: Atomic and Laser Spectroscopy. Clarendon Press, Oxford, 1977.

## 8. fejezet

# Elektronspin rezonancia (Kürti Jenő)

### 8.1. Bevezetés

Az elektronspin rezonancia – ESR (más elterjedt elnevezéssel elektron paramágneses rezonancia – EPR) egy olyan spektroszkópiai módszer, amellyel az elektronok energiaszintjeinek mágneses mezőben való felhasadása vizsgálható. Az alapjelenség: sztatikus mágneses tér hatására kialakuló Zeeman-alsó- és felső-szintek között hozunk létre átmeneteket, megfelelő frekvenciájú elektromágneses hullám segítségével. Ehhez a sztatikus mágneses tér nagyságának és az időben oszcilláló mágneses tér frekvenciájának egymással meghatározott viszonyban (rezonanciában) kell lenniük.

Az ESR-rel sok közös vonást mutat az NMR (nuclear magnetic resonance), csak ott atommagokon történik a mágneses rezonancia megvalósítása. Az ESR, illetve NMR kísérleti technikájában ugyanakkor jelentős különbségek vannak, alapvetően amiatt, mert az atommagok mágneses momentuma jóval kisebb az elektronénál. Amíg egy tipikus NMR készülékben az oszcilláló elektromágneses tér frekvenciája néhány száz MHz, és a hozzá tartozó sztatikus mágneses tér nagyságrendileg 10 T, addig egy tipikus ESR készülékben a vizsgált mintát néhány tized T sztatikus térrel „előfeszítve” az átmeneteket  $\approx 10$  GHz frekvenciájú ( $\lambda \approx$  néhány cm) mikrohullámok idézik elő. Ma már léteznek több T teres, a mikrohullámú illetve távoli infravörös tartomány határán dolgozó ESR berendezések is.

Szemben az NMR-rel, ahol ma már szinte kizárólag impulzus üzemű (Fourier-transzformációs) készülékekkel dolgoznak, az ESR spektrométerek zöme (a labormérésben használt is ilyen) folytonos üzemű (CW). Éppen ezért ebben a jegyzetben csak a mágneses rezonancia *spektroszkópiái* vonatkozásait érintjük, a jelenség dinamikai aspektusaival nem foglalkozunk.

Az ESR nem analitikai módszer, tehát szemben az NMR-rel — kivételes esetektől

eltekintve — nem alkalmas ismeretlen anyag azonosítására. Az ESR spektrumból nyerhető információk (a vonal(ak) helye, alakja, szélessége, intenzitása, több vonal esetén azok távolsága) segítségével következtethetünk a jelet adó atom vagy molekula lokális környezetére, illetve annak — hőmérsékletváltozás, megvilágítás, kémiai reakció stb. miatt bekövetkező — egészen finom változásaira.

Az ESR-rel leggyakrabban vizsgált anyagok: átmeneti fémek komplexei, szerves szabad gyökök, triplett állapotú molekulák, szennyezőatomok félvezetőkben, színcentrumok ionkristályokban, vezetési elektronok fémekben, ill. félvezetőkben. Külön megemlítenődő, hogy biológiai mintákról — beépített spinjelzők segítségével — más módszerrel nem elérhető információk nyerhetők az ESR segítségével.

Ez a mérés bevezetést nyújt az ESR-spektroszkópiába. Először a mágneses rezonancia alapjaival foglalkozunk, majd — az elvégzendő mérésekhez kapcsolódóan — a g-faktorra valamint a hiperfinom kölcsönhatásra vonatkozó legfontosabb ismereteket tárgyaljuk. A mérőberendezéssel csak nagy vonalakban foglalkozunk, részletesebb információk a mérés helyén kaphatók.

## 8.2. A mágneses rezonancia alapjai

A mágneses rezonancia alapjai (fél)klasszikus, illetve fenomenologikus szinten is megérthetők (Larmor-precesszió, Bloch-egyenletek ...). Ennek azonban csak akkor lenne előnye, ha a jelenség dinamikai aspektusaival is foglalkoznánk (impulzusszerű gerjesztés, spin-echo kísérletek ...), ugyanis ezek korrekt kvantummechanikai tárgyalása meglehetősen bonyolult. Ezzel szemben, az energiaszintek feltérképezése — tipikusan ez történik egy folytonos üzemű ESR-spektrométerrel való méréskor — sokkal egyszerűbben kezelhető kvantummechanikailag, ezért ebben a jegyzetben csak az utóbbival foglalkozunk, az előbbit illetően az irodalomjegyzékre utalunk.

### 8.2.1. Egyszerű kvantummechanikai kép

Tekintsünk egy mikroszkopikus objektumot, amelynek  $\vec{\mu}$  mágneses és  $\vec{J}(= \hbar\vec{j})$  impulzusmomentuma egyaránt van, s köztük a következő a kapcsolat:

$$\vec{\mu} = \gamma\vec{J}. \quad (8.1)$$

A  $\gamma$  giromágneses tényező helyett szokás a dimenziótlan és egységnyi nagyságrendű g-faktort bevezetni, ami a természetes egységeikben mért momentumok közötti arányossági tényező. Az impulzusnyomaték természetes egysége  $\hbar$ , az elektron mágneses nyomatékáé pedig  $\mu_B = e\hbar/2m_e \approx 9,2740 \cdot 10^{-24}$  joule/tesla, az ún. Bohr-magneton. Ezzel

$$\vec{\mu} = -g\mu_B\vec{j}, \quad (8.2)$$

ahol a negatív előjel az elektron negatív töltése miatt van.

Tekintsük a legegyszerűbb esetet, amikor külső mágneses tér nélkül a rendszer energiája nem függ az impulzusnyomaték orientációjától. A kiszemelt energiaszint ekkor —mágneses tér hiányában—  $(2j + 1)$ -szeresen degenerált.  $\vec{B}$  külső mágneses mezővel való kölcsönhatást a

$$K_Z = -\vec{\mu}\vec{B} = -\gamma\vec{J}\vec{B} = g\mu_B j\vec{B} \quad (8.3)$$

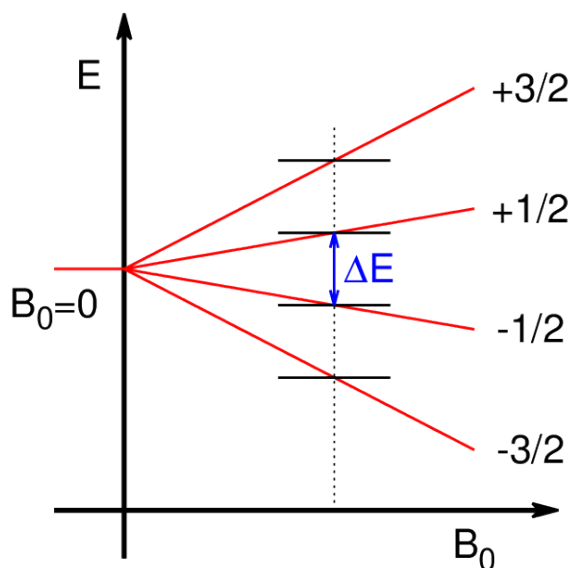
Hamilton-operátor adja meg (Zeeman-kölcsönhatás, lásd az A. függelékét). Itt  $\vec{B}$  akár sztatikus, akár időtől függő lehet.

A mágneses rezonancia esetében kétféle külső mágneses teret alkalmazunk: egy  $\vec{B}_0$  sztatikus teret, amely az eredetileg elfajult energianívókat fölhasítja, és egy  $\vec{B}_1 \sin(2\pi\nu t)$  időben oszcilláló teret, amellyel átmeneteket hozhatunk létre a  $\vec{B}_0$  által fölhasított energiaszintek között.

Ha  $\vec{B}_0$  irányát választjuk  $z$ -tengelynek, akkor  $K_Z$  sajátértékei az  $m = j_z$  mágneses kvantumszámmal egyszerűen kifejezhetők:

$$E(m) = E_0 + g\mu_B B_0 m \quad (m = -j, -j + 1, \dots, j). \quad (8.4)$$

Példaképpen a 8.1. ábra  $j = 3/2$  esetére mutatja a Zeeman-felhasadást.



8.1. ábra. Zeeman-felhasadás  $j = 3/2$  esetén.

Jól ismert, hogy egy időben harmonikusan változó perturbáció, így az oszcilláló mágneses térrel való  $g\mu_B j \vec{B}_1 \sin(2\pi\nu t)$  kölcsönhatás is csak akkor idézhet elő átmenetet két energiaszint között, ha teljesül a  $h\nu = \Delta E$  feltétel, ahol  $\Delta E$  a két szint energiakülönbsége. Az időfüggő perturbációszámítás alapképlete szerint az  $|m\rangle \rightarrow |m'\rangle$  átmenet

időegység alatti valószínűsége

$$P_{mm'} = 2\pi/\hbar \cdot |\langle m' | g\mu_B \vec{j} \vec{B}_1 | m \rangle|^2. \quad (8.5)$$

Ismerve  $j_x$ ,  $j_y$  és  $j_z$  operátorok hatását  $j_z$  sajátállapotaira, azonnal adódik, hogy  $\vec{B}_1$ -nek csupán  $\vec{B}_0$ -ra merőleges komponense idézhet elő átmenetet, méghozzá csak akkor, ha teljesül a  $\Delta m \equiv m' - m = \pm 1$  kiválasztási szabály. Mivel bármely *szomszédos* nívó közötti különbség  $g\mu_B B_0$ , ezért ezt az energia-megmaradást kifejező  $h\nu = \Delta E$  összefüggésbe írva kapjuk a

$$h\nu = g\mu_B B_0 \quad (8.6)$$

### **rezonancia-feltétel.**

A leírtakhoz néhány megjegyzés kívánkozik:

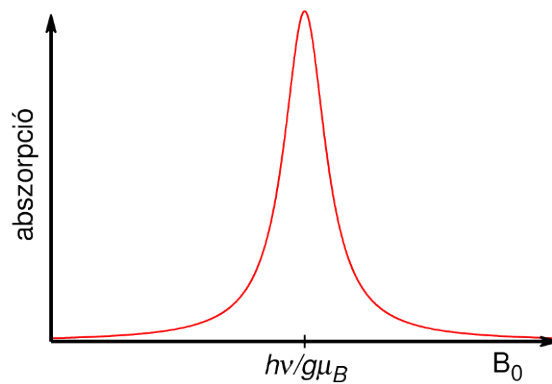
- Az (8.1) összefüggés teljesülését az alnívók olyan csoportjára szorítkozva, melyek csak az  $m$  kvantumszámban különböznek egymástól, a Wigner–Eckart-tétel garantálja. Különböző alnívó-rendszerre  $\gamma$ , és így  $g$  értéke más és más lehet, példa erre az izolált atomok Landé-féle  $g$ -faktora (lásd A. függelék).
- Kondenzált anyagoknál, a pályamomentum-befagyás jelensége (lásd később) miatt a domináns járulékot az elektronspin adja, innen ered a módszer elnevezése (ESR) is.
- $S > 1/2$  eredő spin esetén tipikusan (pl. átmeneti fémekre vagy triplett gerjesztett állapotú molekulákra) az anizotrop környezet, ill. a spin-spin kölcsönhatás miatt mágneses tér nélkül sincs teljes degeneráció (nullterű fölhasadás). Az alnívók egy olyan csoportja, amelyeknek nulla mágneses térbeli energiakülönbsége nem haladja meg a mágneses tér bekapcsolásakor létrejövő Zeeman-felhasadás nagyságrendjét, ilyenkor is kezelhető egy – S-ben nemlineáris tagokat is tartalmazó – ún. effektív spin Hamilton-operátor segítségével, ahol  $2S_{eff} + 1$  egyenlő a figyelembe vett nívók számával.
- Páratlan számú elektront tartalmazó atom vagy molekula energiaszintjeinek degenerációját csak mágneses tér tudja megszüntetni (Kramers-tétel). Nulla mágneses térben minden nívó legalább kétszeresen degenerált (Kramers-dublett), ahol a két állapot egymásból időtükrözéssel nyerhető. Az ilyen, tehát kompenzálatlan spinű elektront tartalmazó, rendszer mindig vizsgálható ESR-rel.
- Sugárzáselméleti nyelven a rezonancia-feltétel teljesülése megfelel egy  $h\nu$  energiájú,  $\hbar$  perdületű részecske (foton) elnyelésének vagy kibocsátásának.
- Az (8.6) rezonancia-feltétel csupán  $B_0$  és  $\nu$  arányát szabja meg, s nem az abszolút nagyságukat. A gyakorlatban érdemes minél nagyobb  $B_0$  sztatikus mágneses térben



dolgozni. Milyen előnyei vannak ennek?  $B_0$  értéke tipikusan néhány tized tesla — ehhez  $\nu \approx 10$  GHz mikrohullámú frekvencia tartozik.

### 8.2.2. Energiaabszorpció, a relaxációk szerepe

Az ESR-mérés során rögzített  $\nu$  mikrohullámú frekvencia mellett változtatjuk a sztatikus mágneses tér  $B_0$  nagyságát. Ha teljesül az (8.6) rezonancia-feltétel, a minta energiát nyel el a mikrohullámú térből, s ezt detektáljuk. Az energiaszintek véges élettartama miatt — a Heisenberg-féle határozatlansági relációnak megfelelően — a spektrumvonalak az ESR-nél sem Dirac-delta keskenységűek, hanem véges félértékszélességűek van (8.2. ábra).



8.2. ábra. ESR abszorpció-görbe.

Most nézzük meg kicsit részletesebben, hogyan jön létre az energiaabszorpció! Az egyszerűség kedvéért tekintsünk  $N$  darab  $S = 1/2$  spinű elektront! A mélyebb energiájú Zeeman-alsó betöltöttsége legyen  $N_1$ , a magasabb energiájúé  $N_2$ , természetesen  $N = N_1 + N_2$ . (8.5)-ből azonnal látható, hogy az oszcilláló tér egy kiszemelt spin két-féle beállása között egyforma  $P$  valószínűséggel hoz létre átmenetet mindkét irányban. Az egyik esetben energiafelvétel (abszorpció), a másik esetben energialeadás (indukált emisszió) történik. A mikrohullámú térből való időegység alatti nettó energiafelvételt a szintek populációja határozza meg:

$$\frac{dE}{dt} = (N_1 - N_2) \cdot P \cdot h\nu. \quad (8.7)$$

Termikus egyensúlyban a nívók betöltöttségének aránya a Boltzmann-eloszlás szerint:

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{\frac{g\mu_B B_0}{kT}}. \quad (8.8)$$

Szobahőmérsékleten  $kT \approx 4 \cdot 10^{-21}$  J, míg a Zeeman-alsó energiakülönbsége még 1T nagyságú térben is ennél nagyságrendekkel kisebb:  $g\mu_B B_0 \approx 10^{-23}$  J. Ekkor az

exponenciális függvényt sorbafejtve kapjuk, hogy a betöltöttség különbsége,  $n$ , arányos lesz a spinek összes számával:

$$n \equiv N_1 - N_2 \equiv \frac{N_1 - N_2}{N_1 + N_2} \cdot N \equiv \frac{\frac{N_1}{N_2} - 1}{\frac{N_1}{N_2} + 1} \cdot N \cong \frac{g\mu_B B_0}{2kT} \cdot N. \quad (8.9)$$

Az elnyelt energia, vagyis az ESR-jel intenzitása (az abszorpciós görbe alatti terület) mérésével tehát – megfelelő kalibrációval – meghatározható a mintában levő kompenzálatlan spinű elektronok száma. Más szóval, az ESR-jelet adó komponens mágneses szuszceptibilitása tisztán megmérhető, szemben a sztatikus szuszceptibilitás-méréssel, ahol ezt nem lehet elválasztani egyéb tényezőktől, pl. a diamágneses járuléktól.

Az eddig leírtak azonban csak akkor igazak, ha elhanyagolható a mikrohullámú tér hatása a populációkra. Valójában a rezonancia-frekvenciával oszcilláló perturbáció kitéríti a rendszert termikus egyensúlyából, egészen pontosan – az abszorpciós és az indukált emissziós folyamatok egyforma valószínűsége miatt – önmagában kiegyenlítené a betöltöttségeket. Ugyanakkor viszont a mikrohullámú teret megszüntetve, különböző mikroszkopikus folyamatok következtében a spinrendszer visszatér (relaxál) a termikus egyensúlyi állapotába. Az egyensúlyhoz közelítést többnyire kielégítően le lehet írni egy  $T_1$  relaxációs idővel jellemezhető exponenciális időfüggéssel. A végeredményt az említett két folyamat egyidejű versengése szabja meg. A betöltöttség különbségének időbeli változását az alábbi egyenlet adja meg (miért?):

$$\frac{dn}{dt} = -2Pn - \frac{n - n_0}{T_1}. \quad (8.10)$$

Itt  $n_0$  a termikus egyensúlynak megfelelő, Boltzmann-eloszlásból származtatható érték. Az (8.10) egyenlet stacionárius megoldása:

$$n = \frac{n_0}{1 + 2PT_1}. \quad (8.11)$$

Ezekből az összefüggésekből leolvasható, hogy kis besugárzó teljesítményekre, amíg  $2PT_1 \ll 1$ , a spinrendszer termikus egyensúlyban marad. Ilyenkor a mikrohullámú térből folyamatosan abszorbeált energiát a spinek a gyors relaxációjuk révén azonnal tovább tudják adni környezetüknek, a fölvett energia végső soron a minta „melegítésére” fordítódik. (8.7)-ből és (8.5)-ből láthatóan az ESR-jel intenzitása ilyenkor arányos  $B_1^2$ -tel, vagyis a mikrohullámú besugárzás teljesítményével. Nagy mikrohullámú teljesítmény esetén a spinrendszer nem tud elég gyorsan megszabadulni a bepumpált energiától, a szintek betöltöttsége kiegyenlítődik. Ezt hívják telítésnek.

Az itt leírtakkal kapcsolatban ismét néhány megjegyzés:

- Relaxációhoz vezet minden olyan folyamat, amelyben az elektronspint időben fluktuáló kölcsönhatás (spin-pálya, spin-spin ...) éri.

- A spinrendszer termikus egyensúlyhoz közelítését kétféle relaxációs idővel szokás jellemezni. Az említett  $T_1$  relaxációs időben a környezettel való kölcsönhatás játszik szerepet, ezért azt spin-rács relaxációs időnek nevezik. Mivel ilyenkor változik a betöltöttségek különbsége, tehát a  $\vec{B}_0$  irányú eredő mágnesezettség,  $T_1$ -et longitudinális relaxációs időnek is szokás hívni. Ha a rezonancia-feltétel teljesül, a mágnesezettségnek lesz  $\vec{B}_0$ -ra merőleges komponense is. A termikus egyensúlyba kerüléshez ennek is el kell tűnnie, ehhez viszont a spinrendszernek nem kell energiát cserélnie a környezetével, elegendő az egyes spinek egymás közötti kölcsönhatása. Ez a folyamat egy  $T_2$  ún. spin-spin vagy transzverzális relaxációs idővel írható le.  $T_2$ , illetve  $T_1$  tehát a spinrendszer önmagával, illetve környezetével való termikus egyensúlyba kerülésének karakterisztikus időállandója.
- Ha az ESR-jel szélessége tisztán a nívók véges élettartamából származik, homogén kiszélesedésről beszélünk. Mivel  $T_2 \leq T_1$  sőt tipikusan  $T_2 \ll T_1$ , ezért a homogén ESR-jel szélessége  $T_2^{-1}$ -nel arányos. Előfordul, hogy egyes spinek nem pontosan ugyanazt a lokális mágneses teret érzik, és ez az ESR-jel inhomogén kiszélesedéséhez vezet. Ennek legegyszerűbb oka, ha a mintában lévő spinek dipólus tereinek eredője – ami hozzáadódik a  $\vec{B}_0$  külső térhez – a minta belsejében a hely szerint szórást mutat.
- Az ESR-spektrum  $\nu$ -függése (s így értelemszerűen  $\vec{B}_0$ -függése is) ugyanaz, mint ha egy impulzusszerű gerjesztés után a spinrendszert magára hagynánk és vennénk az időbeli válasz Fourier-transzformáltját. A tisztán exponenciális relaxációs folyamatnak ezért a folytonos spektrumban egy Lorentz-görbe felel meg. Ha az inhomogén kiszélesedés dominál, az ESR-jel Gauss-görbe alakú.
- Nem ekvivalens, de egymással kölcsönható spinrendszerek (pl. elektronok és magok) esetén az egyik komponens telítése a másik komponens populációját, s ezáltal mágneses rezonancia jelének intenzitását is megváltoztatja. Ezen alapulnak a különböző kettős rezonancia módszerek.

### 8.3. Az ESR-spektrum néhány fontos jellemzője

Az ESR-spektrum paraméterei sok tényezőtől függenek. Ebben a pontban két fontos kérdéssel foglalkozunk röviden: mitől függ az ESR-jel helyét megszabó g-faktor, valamint hogyan befolyásolja az ESR-spektrumot az elektronspinek és magspinek közötti hiperfinom kölcsönhatás.

### 8.3.1. A g-faktor

Az elektron impulzusmomentumának és ezzel együtt mágneses momentumának két forrása van: egyrészt a térbeli mozgásából származó pályamomentuma ( $\vec{L}$ ), másrészt az „elvehetetlen” saját, belső momentuma, a spin ( $\vec{S}$ ). Mint ismeretes, lényegében arról van szó, hogy egy elektront relativisztikusan nem elég egyetlen hullámfüggvénnyel leírni, több (4, kis sebességekre jó közelítéssel 2) komponensre van szükség, amelyek időbeli viselkedését a Schrödinger-egyenlet helyett a Dirac-egyenlet írja le. Forgatási transzformációra a hullámfüggvény két ok amiatt is megváltozik: egyrészt a térbeli koordináták transzformálódnak — ezt írja le az  $\vec{L}$ , másrészt a komponensek egymás között keverednek — ezt írja le az  $\vec{S}$ . Mindenféle komplikáció gyökere az, hogy a kétféle impulzusmomentumhoz nem egyforma súllyal társul mágneses momentum, más szóval a g-faktor a kétféle esetben nem ugyanaz. A Schrödinger-egyenletből levezethető (hogyan?), hogy  $g_L=1$ , a Dirac-egyenletből pedig, hogy  $g_S=2$ . Az általános esetben a kétféle járulék eredője szabja meg a g-faktor tényleges értékét.

Két határeset van, ami könnyen kezelhető. Az egyik a szabad atom, amikor  $l$ ,  $s$  és  $j$  mindegyike külön-külön jó kvantumszám. Ilyenkor a g-faktorra a jól ismert Landé-féle kifejezés adódik (lásd A. függelék). Az ESR-méréseknél azonban – ritka kivételektől eltekintve – ennek nincs jelentősége, hiszen szilárd vagy folyékony mintákban az atomok nem tekinthetők izoláltaknak. Egy kiszemelt atomra a szomszédok elektromos hatása egy  $V_{krist}$  ún. kristálytér potenciállal vehető figyelembe. Megmutatható, hogy ezen kristálytér következtében az  $\vec{L}$  várható értéke nulla lesz (ezt hívják pályamomentum-befagyásnak) s emiatt a Zeeman-felhasadáshoz csak a spin ad járulékot. A levezetés gondolatmenetének lényege egész röviden: i)  $V_{krist}$  hatására a pályamomentum vetületei szerinti degeneráció megszűnik (fizika), ii) valós Hamilton-operátor nemelfajult sajátfüggvényei valósak (matematika), iii)  $\vec{L}$  várható értéke valós állapotban csak nulla lehet (miért?) (matematika). Gondold végig a pályamomentum befagyását  $l = 1$ -re, oktaédes környezetben!

Valójában a pályamomentum befagyása soha nem tökéletes. Ennek oka a  $K_{SO} = \lambda \vec{L} \vec{S}$  spin-pálya kölcsönhatás megléte. Mivel ebben  $\vec{L}$  tartalmazza az  $i$  képzetes egységet, ezért az előző gondolatmenet ii) pontja nem alkalmazható maradéktalanul. Kondenzált anyagokban mindenesetre  $K_{SO} \ll V_{krist}$ , ezért első közelítésben továbbra is igaz, hogy csak a spin játszik szerepet a Zeeman-felhasadásban. A perturbációszámítás következő rendjében azonban a spin-pálya kölcsönhatás az alapállapothoz kis mértékben hozzákeveri a gerjesztett állapotokat is, és az így módosított alapállapotban már nem lesz nulla a pályamomentum várható értéke. Mindez átfogalmazható úgy, hogy továbbra is csak a spinről (helyesebben most már effektív spinről) beszélünk, de módosított g-faktorral. Szemléletesen szólva, a spin kétféleképpen hat kölcsön a mágneses térrel: egyrészt közvetlenül ( $\vec{S}\vec{B}$ ), másrészt közvetve, a spin-pálya kölcsönhatáson keresztül ( $\vec{S}\vec{L}$  és  $\vec{L}\vec{B}$  kombinációja).

A pontos képletet mellőzve, kvalitatíve annyit érdemes megjegyezni, hogy egy ger-

jesztett állapotnak az alapállapothoz keveredése, és ezáltal a  $g$ -faktornak a  $g_S$ -től való eltérése  $\frac{\lambda}{\Delta}$ -val ( $\frac{\lambda}{\Delta} \ll 1$ ) arányos, ahol  $\Delta$  a kristálytér miatti energiafelhasadás. Az eredmény attól is függ, hogy a mágneses tér iránya hogyan áll a kristálytani irányokhoz képest, vagyis a  $g$  általában tenzoriális mennyiség. A  $g$ -tenzor méréséből információ nyerhető a  $V_{krist}$ -ről, így többek között az elektronspin lokális környezetének szimmetriájáról.

Néhány kiegészítő megjegyzés:

- Ebben a pontban és a továbbiakban az impulzusmomentumok alatt a  $\hbar$  nélküli operátorokat értjük.
- A spin-pálya kölcsönhatás eredete szemléletesen: a mozgó spin az atommag (centrális) elektromos terét részben mágneses térnek érzi ( $\vec{B} \propto \vec{v} \times \vec{E} \propto \vec{v} \times \vec{r} \propto \vec{L}$ ). (Ennek alapján várhatólag milyen  $\lambda$  rendszámfüggése?)
- A  $g$ -faktor kísérleti értéke szabad elektronra, amikor pedig a mágneses momentum tisztán a spinből származik, nem a Dirac-egyenletből várható 2, hanem  $g_e \approx 2,0023 \dots$ . Ezt csak sugárzáselméleti korrekciók segítségével lehet megmagyarázni.
- A  $g$ -tenzor egykristály esetén a minta forgatásával teljes egészében kimérhető, pormintákon egy  $g_{min}$  illetve  $g_{max}$  által megszabott intervallumon belüli jellegzetes aszimmetrikus spektrumból korlátozott információ nyerhető, folyadékokban pedig a  $g$ -tenzor kiátlagolt értékét ( $1/3Spurg$ ) mérhetjük.

### 8.3.2. A hiperfinom kölcsönhatás

Az elektronok és az atommagok közötti ún. hiperfinom kölcsönhatás (lásd az [A.](#) függelék) elnevezése onnan ered, hogy ez adja az atomi színekvonalak legfinomabb felhasadását. Az ESR-spektrumban ilyenkor, a magspin(ek) értékétől függően, jellegzetes, több vonalas szerkezetet kapunk.

Az ESR-ben hiperfinom kölcsönhatás domináns járulékát az elektronspin és a magspin közötti mágneses csatolás adja, ezen belül is az ún. Fermi-féle kontaktkölcsönhatás. Ez utóbbi akkor lép föl, ha az elektron nem nulla valószínűséggel tartózkodik egy atommag helyén. A továbbiakban a hiperfinom kölcsönhatásnak a kontaktkölcsönhatást tekintjük, ami az  $\vec{S}$  elektronspin és az  $\vec{I}$  magspin skaláris szorzatával arányos:

$$K_{hf} = A\vec{S}\vec{I} \quad (8.12)$$

ahol  $A$  az ún. hiperfinom kölcsönhatási állandó (energia dimenziójú).  $A$  arányos  $|\psi(0)|^2$ -tel, a mag helyén való megtalálási valószínűséggel.

Néhány jellegzetes magra az  $I$  értéke (zárójelben az illető izotóp természetes előfordulási gyakorisága %-ban):

$^1\text{H}$  (99,99) 1/2,  $^2\text{H}$  (0,01) 1,  $^{13}\text{C}$  (1,1) 1/2,  $^{14}\text{N}$  (99,63) 1,  $^{17}\text{O}$  (0,04) 1/2,  
 $^{53}\text{Cr}$  (9,6) 3/2,  $^{55}\text{Mn}$  (100) 5/2,  $^{57}\text{Fe}$  (2,2) 1/2,  $^{59}\text{Co}$  (100) 7/2.

Most nézzük meg, mit eredményez a hiperfinom kölcsönhatás az ESR-spektrumban! Tekintsünk egy atomot  $\vec{S}$  elektronspinnel és  $\vec{I}$  magspinnel, melyek kölcsönhatásban vannak egymással és egy külső  $\vec{B}_0$  mágneses mezővel! Az utóbbi irányát  $z$ -tengelynek választva, a rendszer Hamilton-operátorának számunkra érdekes része:

$$K = g\mu_B B_0 S_z - g_{\text{mag}}\mu_{\text{mag}} B_0 I_z + A\vec{S}\vec{I} \quad (8.13)$$

Az első és második tag az elektron(felhő), illetve a mag Zeeman-kölcsönhatása, a harmadik pedig a köztük lévő hiperfinom csatolás.

(8.13) sajátértékeinek egzakt meghatározása az általános esetben nem könnyű feladat. Szerencsére tipikusan  $g\mu_B B_0 \gg A$  ( $\gg g_{\text{mag}}\mu_{\text{mag}} B_0$ ), ezért bőven elegendő, ha a hiperfinom kölcsönhatásból csak az  $AS_z I_z$  tagot tekintjük, az  $A(S_x I_x + S_y I_y)$  részt pedig — szükség esetén — csupán mint kis perturbációt vesszük figyelembe. Ekkor az energiasajátértékek:

$$E(m_S, m_I) = g\mu_B B_0 \cdot m_S - g_{\text{mag}}\mu_{\text{mag}} B_0 \cdot m_I + A \cdot m_S \cdot m_I \quad (8.14)$$

Itt  $m_S$  és  $m_I$  az elektron(felhő) és a mag mágneses kvantumszámai.

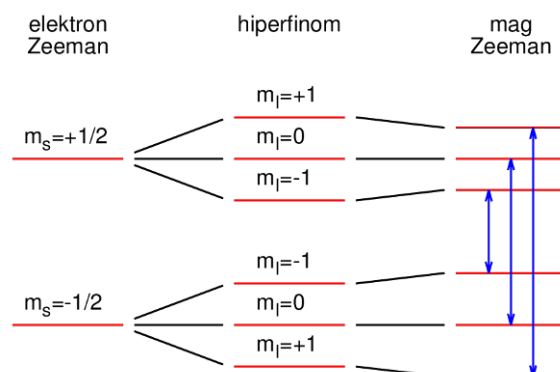
Az ESR-átmenet kiválasztási szabálya:  $\Delta m_I = 0$  és  $\Delta m_S = \pm 1$  (miért?), vagyis adott magspin mellett egyet billen az elektronspin, így (8.14)-ből a rezonancia feltétele:

$$h\nu = \Delta E = g\mu_B B_0 + A \cdot m_I = g\mu_B \cdot \left( B_0 + \frac{A}{g\mu_B} \cdot m_I \right) \quad (8.15)$$

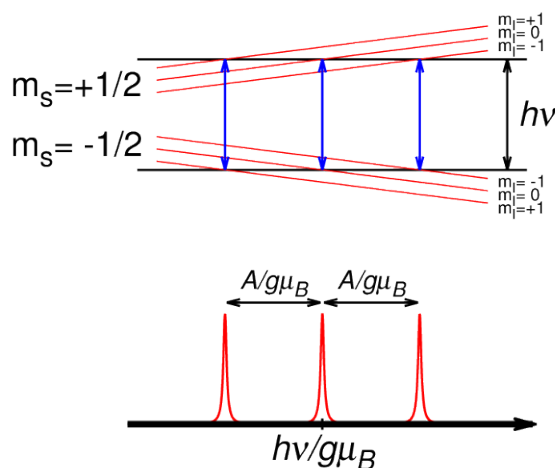
A magok Zeeman-kölcsönhatása az ESR-ben láthatóan nem játszik szerepet. (8.15)-ben az utolsó egyenlőség az alábbi szemléletes képet sugallja: használhatjuk az (8.6) szokásos rezonancia-feltételt, figyelembe véve azonban, hogy az elektronok által érzett lokális mágneses tér a mintában atomonként más és más lehet. A  $B_0$  külső térhez ugyanis minden atomnál hozzá kell adni a saját magja által keltett mágneses teret is. Mivel az utóbbi sokkal kisebb  $B_0$ -nál, ezért annak nyilván csak a  $B_0$  irányú komponense számít (miért?), s az pedig a magspin  $B_0$  irányú vetületétől ( $m_I$ ) függ, aminek lehetséges értékei diszkrét. A különböző  $m_I$ -jú atomokra különböző  $B_0$  külső térben teljesül a rezonancia feltétele.

Összefoglalva: a hiperfinom kölcsönhatás az ESR-jelet annyi vonalra hasítja, ahányféleképpen az adott fajta magspin beállhat a külső  $B_0$  tér irányához képest. A szomszédos vonalak távolsága (8.15)-ből következően egyenlő. Az egyes vonalak intenzitása szobahőmérsékleten egyforma (miért?).

Az ebben a pontban leírtakat  $S=1/2$ ,  $I=1$  speciális esetére illusztráljuk. A 8.3. ábrán az energiaszintek felhasadása látható a kétféle Zeeman- illetve a hiperfinom kölcsönhatás következtében, adott  $B_0$  külső térben. (Vigyázat, a jól láthatóság kedvéért az egyes



8.3. ábra. Példa:  $S=1/2$  spinű elektron és  $I=1$  spinű mag energiaszintjeinek felhasadása az egymással való hiperfinom kölcsönhatás következtében,  $B_0$  külső mágneses térben. Az ábrán feltüntettük a megengedett ESR-átmeneteket is (vö. (8.14) és (8.15) képletek).



8.4. ábra. Az ESR-spektrum hiperfinom felhasadása  $S=1/2$ ,  $I=1$  esetén.

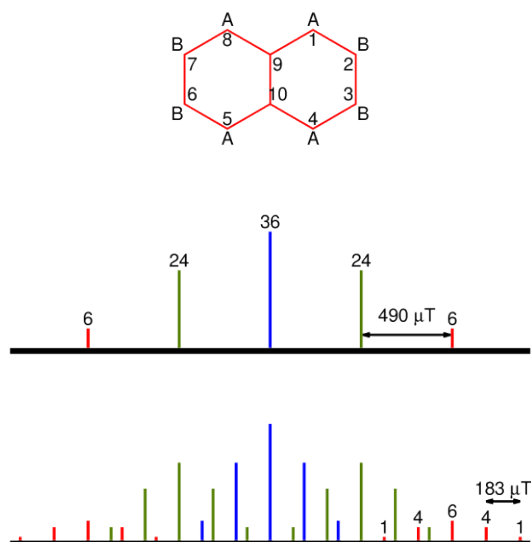
felhasadások az ábrán nem méretarányosak!) Mivel az ESR-spektrumot rögzített  $h\nu$  mellett  $B_0$  változtatásával vesszük föl, ezért a 8.4. ábra ilyen nézőpontból is megmutatja a hiperfinom felhasadást.

A hiperfinom spektrum vizsgálata különösen hasznos szerves szabad gyököknél, ahol a kompenzálatlan spinű elektron egyszerre több maggal is kölcsönhatásba léphet, különböző  $A_j$  csatolási állandókkal. Az egyszerűbb (8.12) képlet helyett ekkor

$$K_{hf} = \vec{S} \cdot \sum_j A_j \vec{I}_j \quad (8.16)$$

írandó. Az ESR-spektrumban ilyenkor többszörös, általában különböző mértékű felhasadást találunk: az első mag által fölhasított vonalat a második mag tovább hasítja stb. Ha szimmetria-okok miatt bizonyos magok ekvivalensek, akkor a rájuk vonatkozó  $A_j$  csatolási állandók egyformák, ezért a hiperfinom vonalak részben ugyanarra a helyre esnek.

Példaképpen a naftalinmolekula ( $C_{10}H_8$ ) anionjának ESR „pálcika-spektrumát” mutatja a 8.5. ábra. A kompenzálatlan spinű elektron az egész molekulára delokalizálva van. Mivel a C-atomok 99%-ának nulla a magspinje, ezért csak a 4 db A típusú és 4 db B típusú  $1/2$  spinű  $^1H$ -maggal (protonnal) való hiperfinom kölcsönhatás számít. Az A protonok 5 vonalas felhasadást okoznak 1:4:6:4:1 intenzitás arányokkal (miért?), a B protonok minden vonalat ugyanilyen módon tovább hasítanak. A kétféle felhasadás mértéke különböző.



8.5. ábra. A naftalinmolekula (a), és anionjának ESR pálcika-spektruma (b).

Egy szerves gyök hiperfinom-spektrumának számítógépes illesztésével még bonyolult esetben is meghatározhatók az egyes  $A_j$  csatolási állandók, s így az egyes magok helyén a megtalálási valószínűségek (korrektebbül a spinsűrűségek). Bizonyos értelemben tehát a kompenzálatlan spinű elektron hullámfüggvényét tapogatójuk le az ESR-rel.

Megjegyzések, kérdések:

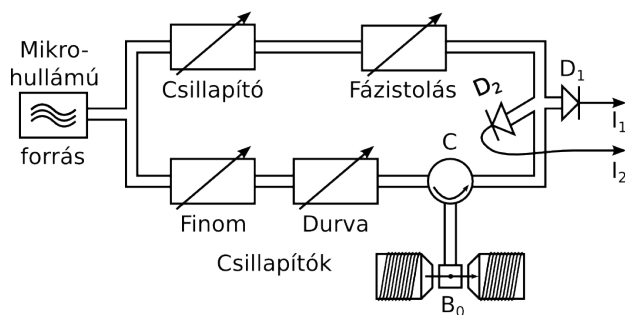
- Az elektron és a mag mágneses momentuma között a szokásos dipól-dipól kölcsönhatás is létezik, ez azonban általában sokkal gyengébb a kontaktkölcsönhatásnál. Eredménye elsősorban az, hogy  $A$  tenzorá válik.



- A kontaktkölcsönhatás Dirac-egyenletből való levezetése például a 3. sz. irodalomban megtalálható. Hogyan lehetne a kontaktkölcsönhatás felléptét (fél)klasszikusan kézenfekvővé tenni?
- Mi a hatása az elhanyagolt  $A(S_x I_x + S_y I_y)$  tagoknak az energiaszintekre és az ESR-spektrumra, a perturbációszámítás első-, illetve másodrendjében?
- Példa: hogy néz ki a H-atom alapállapotú hiperfinom nívószerkezete nulla mágneses térben? Hogy néz ki az ESR-spektruma?
- A szövegben az elektronfelhő kifejezés arra utal, hogy az ESR-jel gyakran (például átmeneti fémek atomjainál) nem egyetlen elektronspintől származik, hanem – a Hund-szabálynak megfelelően – több elektron eredő spinjétől.
- Nyílt héjú, sokelektronos atomokra és molekulákra az  $A$  hiperfinom csatolási állandó a különböző spinű elektronoknak a mag helyén való megtalálási valószínűségei különbségéből adódó, ún. spinsűrűséggel kapcsolatos. (A spinsűrűség kiszámításához figyelembe kell venni a külső héjon lévő kompenzálatlan spinű elektron(ok)nak a belső, lezárt héjakra való polarizációs hatását.)
- Ha egy kompenzálatlan spinű elektron  $L > 0$  állapotban van, kaphatunk-e az ESR-ben hiperfinom felhasadást? Miért? Szerves molekula  $\pi$ -elektronja léphet-e hiperfinom kölcsönhatásba egy, a szimmetriasíkjában lévő maggal?
- Gyakorlásképpen: milyen ESR-spektrum várható a benzol anionra?

## 8.4. A mérőberendezés

A spektrométer működését csak vázlatosan ismertetjük, a technikai részletek a helyszínen kerülnek megbeszélésre. A berendezés elvi vázlatát a 8.6. ábra mutatja.



8.6. ábra. A mikrohullámú híd sematikus rajza.

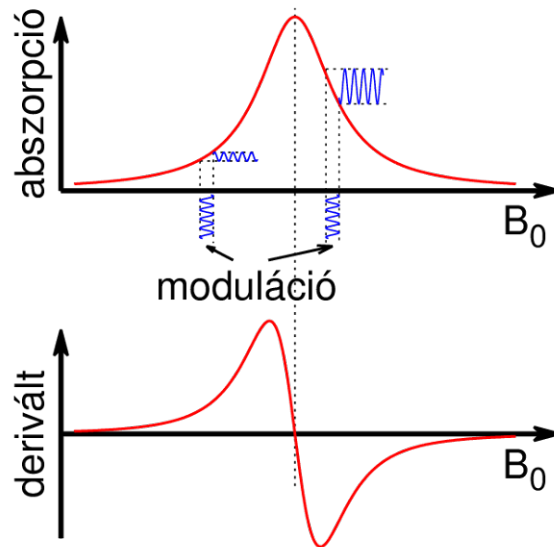
A mérendő mintát egy üregrezonátorba helyezük, ami egyúttal benne van egy elektromágnes  $\vec{B}_0$  sztatikus mágneses terében. A mikrohullámokat egy klisztron szolgáltatja, amelynek frekvenciája 10 GHz könyékén néhány százaléknnyit hangolható. Erre azért van szükség, hogy a mikrohullámú forrást pontosan rá lehessen hangolni a mindenkori mintát tartalmazó üregrezonátorra. Az utóbbi ugyanis csak egy  $\nu_0$  karakterisztikus frekvencián, illetve annak nagyon szűk környezetében engedi be a mikrohullámokat, és ez a sajátfrekvencia a behelyezett mintától függően kis mértékben elhangolódhat.

Az üregrezonátor frekvencia-karakterisztikájának élességét a  $Q (= \nu_0 / \Delta\nu)$  jósági tényezőjével jellemezzük. A jósági tényező (és megmutatható, hogy ezzel az ESR-jel intenzitása) annál nagyobb, minél kisebbek a veszteségek (a mágneses rezonancián kívüli egyéb energiadisszipáció).  $Q$  tipikusan néhány ezres értékű. (Mi történik, ha vizes mintát helyezünk üregrezonátorba?) A mérés során a mikrohullámú forrás frekvenciáját külön elektronika stabilan rajtatartja az üregrezonátor aktuális sajátfrekvenciáján. Az üregrezonátornak a mikrohullámú kör többi részéhez való csatolását külön optimalizálni kell, egy – az üregrezonátor belépő nyílásánál elhelyezett – csavar segítségével.

A mikrohullámok hullámvezetőkben terjednek (milyen méretű hullámvezetőre van itt szükség?). Az üregrezonátorról visszaverődő hullámokat mikrohullámú diódák detektálják. A  $B_0$  mágneses teret változtatva, a rezonancia-feltétel teljesülésekor a visszavert hullám kismértékben megváltozik (pl. az amplitúdója lecsökken), emiatt megváltozik a detektáló diódák árama. Bizonyos okok miatt célszerű ún. híd-módszert alkalmazni, ami azt jelenti, hogy a mikrohullámoknak csak egy része jut a mintát is tartalmazó mérőágba, másik részük egy referenciaágban terjed, és e két ág interferenciája határozza meg a diódaáramokat. A mérőágban lévő csillapító elemekkel a mintára jutó teljesítmény szabályozható (gondoljunk a telítés jelenségére!). A referenciaágban terjedő komponensnek mind az amplitúdója, mind a fázisa változtatható, ezek segítségével hozható a mikrohullámú híd megfelelő alaphelyzetbe.

A mágneses rezonancián való áthaladáskor a diódaáram az abszorpciós görbének megfelelően változik. Ez a változás azonban olyan kicsi, hogy a dióda termikus zaja is összemérhető vele. A kicsiny jelnek a nagy zajból való kiemelése érdekében az ESR-spektrum fölvétele ún. *lock in* technikával történik. Ennek lényege a következő: a mérési folyamatba beviszünk egy időben jól definiált periodikus (nem okvetlenül szinuszos) változást (ez lesz a referencia) és a jelből kiszűrjük a pontosan ugyanígy változó komponenst. Tekintve, hogy a zaj véletlenszerű, ez igen tetemes jel/zaj-viszony javuláshoz vezethet. Gyakorlatilag az történik, hogy a *lock in* erősítő kimenetén egy olyan egyenszint jelenik meg, amely arányos a vizsgált jel és a referencia szorzatának bizonyos időállandóval történő kiátlagolt értékével. Megjegyzendő, hogy többről van szó, mint egyszerű frekvencia-szűrésről: a változásnak fázisban is azonosnak (esetleg éppen ellenkezőnek, ebben az esetben negatív egyenszint jelenik meg a *lock in* kimenetén) kell lennie a referencia jellel, ezért az ilyen erősítőt fázisérzékeny erősítőnek is szokás hívni. Jelen esetben az ESR-jel fölvételéhez  $B_0$ -t szinuszosan megmoduláljuk 100 kHz-cel (miért nem sokkal kisebb vagy sokkal nagyobb frekvenciával?). A moduláció amplitúdóját az abszorpciós görbe félértékszéles-

ségénél kisebbre kell választani, ha nem akarjuk torzítani a jelalakot. A *lock in* technika következtében az ESR-jel derivált alakú lesz (lásd a 8.7. ábrát).



8.7. ábra. Derivált ESR-jelalak létrejötte a *lock in* letapogatás miatt.

## 8.5. Gyakorló kérdések

A mérés megkezdése előtt néhány kérdésre kell tudni válaszolni.

- Minek a rövidítése az ESR illetve az NMR kifejezés?
- Mi a mágneses rezonancia feltétele illetve annak fizikai jelentése?
- Mi a rezonancia-feltételt leíró képletben az egyes betűk jelentése?
- Mi a g-faktor?
- Mi a giromágneses tényező?
- Mi a Bohr-magneton?
- Nagyobb vagy kisebb a proton mágneses momentuma az elektronénál? Hányszor?
- Egy  $S=5/2$  eredő spinű és  $L=0$  eredő pályaperdületű elektronhéj energiaszintje hány nívóra hasad föl B mágneses mezőben?

- Az ESR spektrum fölvételekor mit mérünk minek a függvényében?
- Mi a különbség a  $T_1$  és  $T_2$  relaxációs idők között?
- Mit jelent az ESR jel telítése?
- Mekkora a szabad elektron g-faktora?
- Miért nem adekvát a Landé-formula használata kondenzált anyagok ESR vizsgálata esetén?
- Milyen a spin-pálya kölcsönhatás erősségének rendszámfüggése?
- Mi a hiperfinom kölcsönhatás?
- Miért derivált alakú az ESR jel?
- Milyen egy hidrogénatom ESR spektruma?
- Milyen egy izolált  $Mn^{2+}$ , illetve  $Cr^{3+}$  ion elektronszerkezete a szokásos atomfizikai jelölésekkel?

## 8.6. Mérési feladatok

Két mintát kötelező megmérni és a spektrumokból néhány mennyiséget meghatározni. Az egyikben  $Mn^{2+}$  ionok vannak ZnS-ban, mint diamágneses hordozóba beágyazva, a másikban  $Cr^{3+}$  ionok vannak MgO-ban, mint diamágneses hordozóba beágyazva (mi lehet a diamágneses hordozó szerepe?). A Cr tartalmú minta kalibrációs anyagként használható: benne a Cr atomok száma összesen  $\approx 8,3 \cdot 10^{13}$ . A Cr g-faktora:  $1,9800 \pm 0,0001$ . A jegyzőkönyvben a mért spektrumok rövid értelmezését is le kell írni.

Mérési feladatok:

1. Vegye föl a  $Mn^{2+}$  (ZnS-ban) ESR-spektrumát!
2. Vegye föl a  $Cr^{3+}$  (MgO-ban) ESR-spektrumát!
3. Határozza meg a Mn g-faktorát!
4. Számolja ki a  $^{55}Mn$  és a  $^{53}Cr$  izotóp hiperfinom kölcsönhatási állandóját!
5. Határozza meg a Mn atomok számát!

Ha marad még idő, szorgalmi feladat is választható az alábbi mérések közül:

- telítés mérése
- g-faktor anizotrópia mérése
- koncentrációfüggés mérése folyadékban

## 8.7. Ajánlott irodalom

- [1] Kiss Ádám, Korecz László: Magfizikai laboratóriumi gyakorlatok, Tankönyvkiadó, 1989
- [2] Rockenbauer Antal: ESR-spektroszkópia, Molekulaspektroszkópia c. könyv, Szerk.: Kovács István - Szőke József, Akadémiai Kiadó, 1987
- [3] Elméleti fizikai példatár 4. kötet, Tankönyvkiadó, 1984
- [4] S.P. Slichter: Principles of magnetic resonance with examples from solid state physics, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1978
- [5] A. Carrington, AD. McLachlan: Introduction to magnetic resonance, with applications to chemistry and chemical physics, Chapman and Hall, New York, 1979

## 9. fejezet

# Röntgenfluoreszcencia analízis (Csorba Ottó és Horváth Ákos)

### 9.1. Bevezetés

A röntgenfluoreszcencia analízis napjainkban egy széles körben használt nukleáris analitikai eljárás, ami az anyagok felületének besugárzása alapján határozza meg, hogy a minta *milyen elemekből* tevődik össze. Jól használható módszer például az anyagtudományban, amikor ötvözetek vizsgálata a kutatás tárgya, vagy az ásványtanban, amikor kisméretű kristályok összetétele a kérdés. Továbbá rutinszerű eljárásokban alkalmazzák, mint például pénzverdékben, amikor a pénzek összetételét ellenőrzik, vagy akármilyen gyártási folyamatban, amikor az elemösszetétel a kérdés és roncsolás mentes vizsgálat szükséges. Alkalmazásainak sokszínűségét mutatja, hogy ezen kívül a régészetben, képzőművészetben is alkalmazzák. A régészetben a tárgyak nyomelemeinek mennyiségi eloszlása mutatja, hogy melyik bányából származott az alapanyag, a képzőművészetben a festék anyagának elemösszetétele mutathatja meg, hogy az adott festmény eredeti-e vagy sem.

A röntgenfluoreszcencia analízis egy másik nagyon elterjedt felhasználása a környezetfizika témakörébe esik. Napjaink civilizációjának sikereit minden ember élvezi, de sokszor szembesülünk az ipari tevékenység egészségkárosító mellékhatásaival. Az előnyök és a káros mellékhatások kiegyensúlyozása a feladatunk. A röntgenfluoreszcencia a *nehézfém szennyeződések* feltérképezésében, mennyiségi meghatározásában tud segíteni. Az egyik olyan elem, amelynek koncentrációja sokszor merül fel a környezet védelme során, az ólom. A közlekedés sok évig használta az ólmot hatásfok növelő anyagként az üzemanyagokban, de ezzel együtt a levegőbe kibocsátott ólom a növényzetben és a levegő tisztasága terén is károkat okozott. Szerencsére napjainkban már ólmozatlan benzin az elterjedt üzemanyag, de a sok éves múlt hatásai még mindig számos helyen kimutathatóak. A másik két ilyen elem a kadmium és a higany, ami egészségre veszélyes lehet,

és elterjedten alkalmazzák őket kisebb elektromos készülékek energiaellátására szolgáló akkumulátorokban, elemekben. A nem újratölthető elemekben lévő nehézfémek környezetünkben történő elterjedését például szelektív hulladékgyűjtéssel lehet megakadályozni, de mindezek ellenére kikerülnek legtöbbször talajokba, néha ipari folyamatokhoz kapcsolódóan aggasztóan nagy mennyiségben. A talajokban felhalmozódó ipari szennyezőanyagok aztán a talajvízben is megjelenhetnek, ezért a vizek vizsgálata is fontos. A röntgenfluoreszcencia egyik válfaja a totálreflexiós-röntgenfluoreszcencia analízis a vizek nyomelem-tartalmának kimutatására alkalmas.

A röntgenfluoreszcencia módszere során a mintát alkotó atomok legbelső elektronjait üjtjük ki az atomokból, molekulákból. Az elektronfelhő így gerjesztett állapotba kerül, és valamelyik elektron a legkisebb energiájú betöltetlen pályára át fog ugrani a kvantummechanika szabályai szerint. Ilyenkor elektromágneses sugárzás keletkezik, melynek frekvenciája, és fotonjainak energiája az atomra jellemző. Gyakran áll elő az a helyzet molekulák vizsgálata esetén, hogy molekulában lévő atom oxidációs számát (a kötésbe beadott elektronok számát megmutató, a kémiában sokszor használt fogalom) is meg lehet határozni, amitől ugyanis a kibocsátott foton energiája kis mértékben ugyan, de függ. A folyamat során a foton energiája a legfontosabb mérendő mennyiség. Ez mutatja meg az atomok rendszámát, és így a minőségét. A legbelső elektron kiütése után az elektronfelhő nemcsak röntgenfotonok kibocsátásával tud kisebb energiájú állapotba kerülni, hanem külső elektronpályákról történő elektronkibocsátással is. Ilyenkor a kibocsátott elektronokat Auger-elektronoknak (ejtsd: özsé-elektronok) hívjuk. Nagy rendszámú atomoknál van relatíve nagyobb valószínűsége ennek a folyamatnak, amikor nagyobb az elektronok közötti taszítás, összehasonlítva a kisrendszámú atomok esetéhez.

A röntgenfluoreszcencia analízis az atomok Bohr-modellje keretében jól leírható, de sok esetben mutatja az ezen túlmenő finomfelhasadást is, amit az elektronok spinjének és pályaperdületének kölcsönhatása okoz. Így a módszer alkalmas csak a kvantummechanika által leírt atomfizikai jelenségek kísérleti bemutatására is.

A röntgenfluoreszcencia mennyiségi analitikai felhasználása elég bonyolult feladat. Ennek oka az, hogy az atomok által kibocsátott röntgenfotonokat a minta egy másik részén lévő atomok elnyelhetik, vagy ezek szóródhatnak Compton-effektussal egy másik atom elektronján, amivel megváltozik az energiájuk. Ezt összességében önnyelődésnek hívjuk, és számos olyan módszer van, ami ezek hatását precízen figyelembe tudja venni. Egy másik, ennél is nehezebben figyelembe vehető hatás az, amikor a keletkezett a minta egyik atomjára karakterisztikus energiájú röntgenfoton egy másik atom egy belső elektronját kiüti. Ekkor a minta saját magában hoz létre egy újabb karakterisztikus de az előzőnél kisebb energiájú röntgenfotont. Ez a minta öngerjesztése, vagy más néven mátrixhatás. Ezek az effektusok a pontos (analitikus) mennyiségi meghatározásnál játszanak szerepet, és csak akkor, ha a minta vastagsága számottevő ahhoz az úthosszhoz képest, amennyi alatt a röntgenfotonok intenzitása felére esik a mintában.



A röntgenfluoreszcencia analízis (RFA) egyik legismertebb felhasználása a Mars kőzetek vizsgálata volt. A Marsra felküldött szondát felszerelték RFA vizsgálatára alkalmas eszközzel, és innen a Mars kőzeteinek összetételéről lehetett kísérleti tapasztalatokat szerezni. Ez az alkalmazás mutatja, hogy a módszer terepi méréseknél is könnyen alkalmazható, gyors eljárás tud lenni.

## 9.2. A karakterisztikus röntgensugárzás

Az atomi elektronfelhőben az elektronok meghatározott energiájú pályákon helyezkednek el az atommag körül. Amikor egy nagyobb energiájú elektronpályáról egy elektron egy alacsonyabb energiájú pályára ugrik magától át, és a két energia közötti különbséget elektromágneses sugárzás formájában sugározza ki, akkor ezt a sugárzást karakterisztikus röntgensugárzásnak hívjuk. Ha a végállapot az atom legalacsonyabb energiaszintje, akkor az egyes atomok ilyen sugárzásainak energiái jól elkülöníthető energiával rendelkeznek. Az egymástól eggyel különböző rendszámú atomok által kibocsátott röntgenfotonok energiája a mérési bizonytalanságon jócskán túl különbözik. Ezért nevezzük ezt a sugárzást karakterisztikusnak. Ha a végállapot az atom másik energiaszintje, akkor is fennáll az állítás. Azonban azokat a kisugárzott fotonokat, melyek egy atom legalacsonyabb energiaszintjére érkeznek már össze lehet esetleg keverni egy másik (jóval különböző rendszámú) atom második energiaszintjére érkező karakterisztikus röntgensugárzásával. De a keveredés tisztázására vannak észrevehető jelek, amiket később részletezünk.

### 9.2.1. A karakterisztikus röntgensugárzás keltése

A mérés során a minta atomjainak legbelső elektronját egy külső gamma-forrás segítségével üttjük ki. A gamma-fotonok behatolnak a mintába, és egy-egy elektronon fotoeffektust szenvednek. Ekkor a gamma-foton megsemmisül, és a teljes energiáját átadja az elektronnak. Érdekes kérdés, hogy miért éppen a legbelső elektront üti ki a gamma-foton. Ennek oka az, hogy a fotoeffektus során az energia és az impulzus megmaradása csak akkor teljesülhet, ha egy harmadik résztvevő is szerepel az ütközésben. (Egy üres térben lebegő szabad elektronon nem lehet fotoeffektus a két megmaradási tétel egyidejű fennállása miatt.) Ez a harmadik résztvevő az atommag. A fotoeffektus során az atommag visszalökődik és elvisz egy kis energiát és impulzust. Jelentősen leegyszerűsítve a leírást azt mondhatjuk, hogy minél közelebb van az atommag, annál nagyobb a valószínűsége, hogy kölcsönhatásba lép az elektron-foton reakcióban, és el tud tőlük vinni egy kis energiát. Ezen szükségszerű impulzus átadás miatt lesz az, hogy a legbelső elektron kiütése a legvalószínűbb. További következmény, hogy a fotoeffektus valószínűsége erősen függ az atommag töltésétől, azaz a rendszámától. Minél nagyobb ugyanis a mag töltése, annál nagyobb az elektron-foton ütközés helyén az elektromos térerősség, és ezzel nagyobb az esély arra, hogy az atommag képes lesz elvinni a szükséges impulzust és

energiát. A térerősség két ok miatt is nagyobb. Egyrészt a magtöltés nagyobb, másrészt ilyenkor a Bohr-modellben is megismert pályasugarak kisebbek, ezért közelebb is vannak az elektronok a maghoz. Összességében a fotoeffektus valószínűsége a rendszám ötödik hatványával arányos!

Tekintsük összehasonlításként a még logikailag lehetséges Compton-szórást is. Ebben a folyamatban is kaphat az elektron elegendő energiát, hogy kirepüljön az atomból és egy elektron lyuk keletkezzen. A Compton-effektus azonban nem kötődik az atommaghoz, ez szabad elektronon is végbemegy. Ez a hatás inkább a külső kváziszabad elektronokon valószínű. Ezen esetben az ütközés után keletkezett lyuk betöltésekor kibocsátott foton energiája jóval kisebb, a belső elektron kiütéséhez képest. Tovább csökkenti a Compton-effektus fontosságát az a tapasztalat, hogy kb. 1 MeV alatti fotonok esetén a fotoeffektus valószínűsége a nagyobb. Gamma-fotonok besugárzásakor ezért a legbelső pályákról szakad ki egy elektron fotoeffektus során.

Az atomi energiapályák kiürítését más módszerrel is el lehet végezni. Gamma-sugárzás helyett lehet egy nagyobb rendszámú elem karakterisztikus röntgensugárzását használni, vagy felhasználhatjuk felgyorsított elektronok fémbe csapódásakor keletkező fékezési sugárzást is. További lehetőség protonnyalábbal kiütni az elektronokat. Ezt gyorsítók mellett lehet elvégezni, mert a protonokat ilyenkor néhány MeV energiára fel kell gyorsítani, hogy behatoljanak a mintába. A protonnyalábnak van egy nagy előnye is. Ha egy nagyon jól fókuszált és nagyon kis nyalábátmérőjű nyalábot tudunk létrehozni, akkor a minta felületének egyes pontjai külön is vizsgálhatók. Ilyen technikai berendezés a mikronyaláb. Egy jó példa rá a debreceni Atommagkutató Intézet Van de Graaff-gyorsítója mellett kialakított mikronyaláb egység. Ezzel geológiai, régészeti, biológiai vagy anyagtudományi minták egyes elemeinek térbeli eloszlása vizsgálható. Például egy levélben a káliumtartalom, vagy nehézfém-tartalom felhalmozódásának helye meghatározható. Ilyenkor a módszer neve angolul Proton Induced X-ray Emission: PIXE. (mikroszonda)

### 9.2.2. A karakterisztikus röntgensugárzás energiája

A karakterisztikus röntgenfotonok energiája a kezdeti és a végállapot elektronpályáinak energiakülönbsége. Ezt az atom rendszáma és az energiaszintek tulajdonságai határozzák meg. Az atomok kvantummechanikai leírásában az elektronokat kvantumszámokkal jellemezzük:  $n$  a főkvantumszám,  $l$  a mellékkvantumszám,  $m$  a mágneses kvantumszám és  $s$  a spin-kvantumszám. A mellékkvantumszám és a spinkvantumszám mindketten az elektron perdületét leíró kvantumszámok. Előbbi a pályaperdülethez, utóbbi a saját perdülethez tartozik. A két perdület bonyolult módon képezhető összege a teljes perdület kvantumszám  $j$ . (A kvantummechanikai perdület vektorok összeadásáról lásd: Marx György: Kvantummechanika című könyvét.)

Az elektronok energiaszintjének legfontosabb meghatározója a főkvantumszám, továbbá a  $j$  teljes perdülethez tartozó kvantumszám csak kis mértékben (finoman) befo-

lyásolja az energiát. Az elektronpályák energiáját akkor tudjuk egyszerűen kiszámolni, amikor az egész atomot ionizáljuk annyira, hogy már csak 1 elektronja legyen. Ezek a hidrogénszerű atomok, és elektronjainak energiáját a Bohr-modell és a vele ebből a szempontból azonos eredményre vezető Schrödinger-féle kvantummechanikai kép is nagyjából (a finom effektusoktól eltekintve) helyesen adja vissza:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}E_0 \quad (9.1)$$

Itt  $E_0=13,6$  eV, a hidrogénatom ionizációs energiával egyezik meg. Ha egy atomban több elektron is helyet foglal (ami általában fennáll), akkor az atommag vonzásán túl több hatás is befolyásolja ezt az energiát. Az egyik ilyen, hogy a külső elektronpályákon az atommag  $Z$  töltését már részben leárnyékolják a többi elektronok, egymást taszítja az összes elektron, és a finom effektusok is befolyásolják az energiát. Az egyszerűsített képhez képest az elsőt, a leárnyékolást lehet a legegyszerűbben figyelembe venni, egy effektív rendszám használatával. A többi hatás bonyolult, de szerencsére az első a döntő. A kezdeti pálya főkvantumszámát  $n$ -nel, a végállapot főkvantumszámát  $m$ -mel jelölve a röntgenfotonok energiáját megadó formula:

$$E_X = h\nu = -E_0 \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) Z_{eff}^2. \quad (9.2)$$

Esetünkben a kezdeti állapot a nagyobb energiájú,  $m > n$ , ekkor  $E_X > 0$ . (Ellenkező esetben külső energia befektetésével lehet az elektront nagyobb energiájú állapotba felgerjeszteni.)

### 9.2.3. A karakterisztikus röntgensugárzás elnevezése

Amikor egy atomi elektron megüresedett helyét röntgen vagy gamma-sugárzással hozzuk létre, akkor a legvalószínűbb a legalacsonyabb energiájú  $n = 1$ -es elektron kilökése. (Amennyiben van erre elegendő energiája a bejövő fotonnak.) Ilyenkor keletkeznek a legnagyobb energiájú fotonok. Leggyakrabban az  $n = 1$  héjon lévő lyuk (A Mengyelejev-féle periódusos rendszerben megszokott jelölése  $K$ -héj) az eggyel nagyobb ("legközelebbi")  $n = 2$ -es héj ( $L$ -héj) valamelyik elektronpályájáról töltődik be. Kisebb valószínűséggel az  $n = 3$ -ról ( $M$ -héj), és így tovább. Az elnevezések ennek megfelelően alakulnak:

$$K_\alpha : L \rightarrow K, \quad K_\beta : M \rightarrow K.$$

Ha az  $n = 2$ -es főkvantumszámú  $L$ -héjről ütjük ki az elektront, akkor ismét a legközelebbi héjről történő betöltődés a legvalószínűbb, és ezeket az átmeneteket, ill. karakterisztikus röntgenfotonokat  $L$ -fotonoknak hívjuk:

$$L_\alpha : M \rightarrow L, \quad L_\beta : N \rightarrow L.$$

Valójában a helyzet bonyolultabb és hagyományosan kialakult elnevezés szerint a három legnagyobb gyakoriságú átmenetet szokás  $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma, \dots$  elnevezéssel illetni. Ezekhez igazából nem ilyen egyszerűen megfogalmazható módon rendelhetők az egyes energiaszintek.

Az egyes átmenetek gyakoriságviszonyai. A  $K_\alpha$  átmenetek mindig gyakoribbak a  $K_\beta$  átmenetknél, mert az M héjon lévő elektronok pályája nem annyira hasonlít a K héjon lévő elektronok pályájára (a kvantummechanikai leírásban éppen ez a fontos), mint az N héjon levőkéi. A  $\frac{K_\alpha}{K_\beta}$  arány minden atomra meghatározható állandó, ami a rendszám növekedtével egyre nő. Az  $L$  átmenetek során más a helyzet. Itt általában három közel azonos gyakorisággal keletkező karakterisztikus röntgenfoton keletkezik. Ez alapján lehet a  $K$ -vonalakat megkülönböztetni az  $L$ -vonalaktól. Ezen tulajdonság nélkül a elemek azonosítása nem lenne egyértelmű. Az összetartozó  $K_\alpha, K_\beta$  párok és  $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma$  hármasok mindegyikének azonosításával azonban teljesen egyértelmű a mintában lévő elemek minőségi meghatározása.

#### 9.2.4. A Moseley-törvény

A karakterisztikus röntgen fotonok energiáit először Henry Moseley határozta meg kísérleteiben 1913-ban<sup>1</sup> A karakterisztikus röntgenfotonok előállítását követően, a különböző atomok esetén a kibocsátott fotonok frekvenciáit mérte meg. A frekvencia gyökének függvényében ábrázolta az egyes atomok rendszámait, és nagyon jó közelítéssel egyeneseket kapott a  $K$  és  $L$ -vonalakra külön-külön. (H. G. J. Moseley, M. A. Phil. Mag. (1913), p. 1024, [Moseley cikke](#)) Az egyeneseknek volt tengelymetszete ( $B$ ) a rendszám-tengelyen. Ez azt jelenti, hogy a következő egyenlet segítségével tudta a karakterisztikus röntgenfotonok energiáit leírni:

$$E_X = h\nu = A(Z - B)^2. \quad (9.3)$$

Ez a Moseley-törvény. ([Moseley-törvény a wikipédián](#)) Az  $A$  konstansban a (9.2) formulában meghatározott tagok szerepelnek, és a  $B$  jelentése az effektív rendszám és a rendszám különbsége, azaz a leárnýékolás mértéke.

$$A = -E_0 \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{valamint} \quad Z_{eff} = Z - B. \quad (9.4)$$

Moseley a  $K_\alpha$  vonalak esetében az  $A$  értékére éppen a hidrogénatom 13,6 eV-os ionizációs energiájának 3/4-ét kapta, ahogy a fenti modellből is ez jön ki. Először határozta meg a  $B$  árnyékolási tényezőt a  $K_\alpha$ -vonalakra, ami közel 1-nek adódott. (Akkoriban az elektronpályák elmélete még nem volt kidolgozva.) A méréseket nagy rendszám-tartományra végezte el, az alumíniumtól az ezüstig mérte a  $K$ -vonalakat, valamint a cirkóniumtól az aranyig határozta meg az  $L$ -vonalakat.

<sup>1</sup>Később az I. Világháborúban harcolt, és 27 évesen elesett a török csatamezőn. [Henry Moseley a wikipédián](#)

## 9.3. A karakterisztikus röntgenfotonok mérése

A röntgenfluoreszcencia analízis mérésére szolgáló berendezés három részből áll. Van egy gyűrű alakú gamma-forrás, amely gamma-fotonokat bocsát ki. Ezen fotonok segítségével ütjük ki az atomok lehető legbelső elektronjait. A második egység a mérendő minta, ami általában henger alakú, ez van a rendszer legmagasabb pontján, ahogy a 9.1. ábra is mutatja. A harmadik egység a SiLi detektor, amivel a mintában keletkezett karakterisztikus röntgenfotonokat detektálni tudjuk. A berendezés sematikus ábrája a 9.1. ábrán látható.

### 9.3.1. A forrás

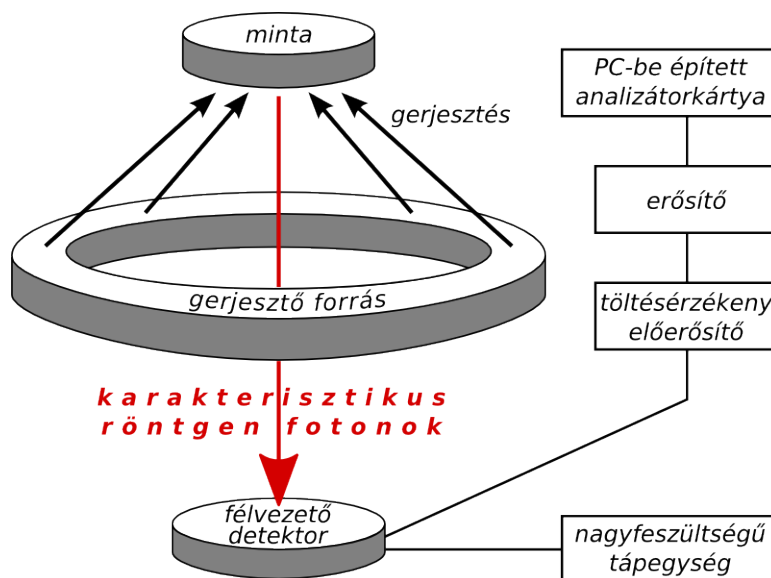
A forrás egy hosszabb felezési idejű zárt sugárforrás, amely évekig használható. A benne lévő izotóp az amerícium 241-es tömegszámú izotópja. A gamma-fotonok energiája 60 keV. Ez a gerjesztő energia. Más forrást is szoktak használni, ez a  $^{125}\text{I}$  atommagokból álló forrás, melynek gamma energiája kb. 30 keV. Ebben az esetben kis bonyodalmat okoz, hogy ez a forrás nem egy, hanem több különböző energiájú gamma-fotont is kibocsát. A két forrás között a felhasználás szempontjából van különbség. Az egyik a felezési idő. A jóds forrás ideje kisebb egy évnél, ezért sűrűn kell cserélni. A másik oldalról viszont az energiája kisebb. Ha a mintában a fotoeffektussal kilökött elektron kötési energiája 30 keV alatti, akkor a jóds forrás nagyobb valószínűséggel löki ki ezt az elektront, ugyanis a fotoeffektus valószínűsége annál nagyobb minél inkább közel van a gerjesztő foton energiája és a kilökött elektron kötési energiája. A forrás egy vas tartóban van elhelyezve, ami a lefelé és oldalra induló gamma-fotonokat elnyeli. Így a forrás nem sugározza be feleslegesen a környezetét.

### 9.3.2. A minta

A minta a hengerszimmetrikus detektálási rendszer szimmetriáját követve középen helyezkedik el. A forrásból induló fotonok a minta bármely pontját elérhetik, és abba be tudnak hatolni. A 60 keV elég kis energia ahhoz, hogy a mintának csak az alsó néhány milliméter rétege lesz besugározva. A módszer a felület környezetében lévő atomokra érzékeny. A gamma-foton többféle reakcióban vehet részt a mintában.

Egyrészt a fotoeffektus szenvedhet a minta bármelyik típusú atomján (általában a minták keverékek). Ilyenkor egy elektron kilöködik (lyuk keletkezik), és megteremtődik a helyzet a karakterisztikus röntgenfoton kibocsátására. Az elektron lyuk betöltődhet egy magasabb energiaszintű elektron átugrásával a lyuk energiaszintjére, vagy a gerjesztési energia úgy is kibocsátódhat, hogy egy vegyértékelektron hagyja el az atomhéjat (Auger-elektronok). Ezeket a mi berendezésünkkel nem lehet detektálni. Ha elektron ugrás következik be, akkor ennek során kibocsátódott foton a tér minden irányába indulhat, és ha a SiLi detektor felé veszi az irányt, akkor jó eséllyel detektáljuk az eseményt.

A minta anyagában keletkezett és a detektor felé haladó röntgenfotonok egy adott távolságot megtesznek még a mintában. Ezen út során többféle esemény történhet velük. a) Elnyelődhetnek a minta anyagában, ez az önabszorpció, ilyenkor foto- vagy Compton-effektussal hatnak kölcsön a további atomokkal. b) Előfordulhat, hogy ha a kibocsátó atom rendszáma a többihez képest nagy, akkor ez a röntgenfoton képes fotoeffektussal másik atom elektronjait kiűteni. Ezen folyamat során végül is a detektorba ez utóbbi atom karakterisztikus röntgenfotonja jut be, holott a gamma-forrás egy másik (nagyobb rendszámú) elemet gerjesztett. Az egyes komponensek a mintában ezáltal egymásra is hatással vannak. Gerjeszthetik egymást (ez utóbbi eset) vagy elnyelhetik a másik sugárzását (előbbi eset). Általánosan ezt hívjuk mátrixhatásnak. A mátrixhatás jelentősen megnehezíti a mintában található elemek analitikailag pontos mennyiségi meghatározását. De a helyzet nem reménytelen, körültekintő mérés során pontos koncentrációkat tudunk kimérni.



9.1. ábra. A röntgenfluoreszcencia kísérleti berendezésének vázlatja (forrás: Pávó Gyula: *Nehézfém tartalom meghatározás laboratóriumi gyakorlat*)

A második eset, ahogy a gamma-foton kölcsönhathat a minta anyagával, a Compton-effektus bármelyik atom valamelyik külső kváziszabad elektronján. Ilyenkor mindegy, hogy milyen rendszámú atomon történik a folyamat, a gamma-foton egy adott szögben szóródik, és ennek megfelelően kisebb energiával továbbhalad. Előfordulhat, hogy ez a Compton-szórt foton pont a SiLi detektor felé indul el, és detektáljuk. A detektált fotonok energiaspektrumában jellegzetes kiszélesedett csúcs mutatja ezen folyamattal járó eseményeket.

A harmadik folyamat, ahogy a gerjesztő gamma-fotonok kölcsön tudnak hatni a mintával az atomon történő rugalmas szóródás. Ilyenkor az atom egésze veszi át az impulzust és energiát. Egy atom tömege azonban már jóval nagyobb, mint egy elektroné, ezért ebben a szóródásban az atom által átvett impulzushoz nagyon kis energia tartozik. Ezért az így szóródott fotonok a detektorba jutva hibán belül a kibocsátó gamma-foton energiájával azonos energiát adnak le. Azon események összességét, amelyek így detektálódnak a SiLi detektorban, rugalmas csúcsnak hívjuk.

### 9.3.3. A detektor

Átnéztük, hogy a forrásban és a mintában milyen folyamatok mehetnek végbe. A harmadik része a detektálási rendszerünknek a SiLi félvezető detektor. Itt két folyamat mehet végbe. Azon fotonok, amelyek valamilyen módon a mintából ide eljutnak legvalószínűbb, hogy fotoeffektussal detektálódnak, így a teljes energiájuk átalakul a szilícium egykristályában elektron-ion párok keletkezésére. A másik eset, ami kisebb valószínűségű, hogy Compton-effektussal detektálódnak. Ez a mintából jövő karakterisztikus röntgenfotonok esetén elhanyagolható mennyiségű, de mindazonáltal a detektor hatáskörében ez a lehetőség precízen bele van számolva. A legtöbb energiaspektrumon jól elkülöníthetőek azok az események, amelyek esetén a mintában Compton-szóródott fotonok a detektorban Compton-szóródással detektálódnak.

A detektorban leadott energia ezzel arányos számú elektron-lyuk pár keltésére fordítódik. Ezeket a félvezető detektorra kapcsolt záróirányú feszültség kitereli az elektródokra, így a beütést egy áramimpulzus követi, melynek időbeli kiterjedése kb. a mikroszekundumos nagyságrendben van. A jelek jobb vizsgálata céljából egy jelformáló egységen is átmegy a jel, így az alakja minden beütésnél azonos lesz. Ebben az esetben a leadott energia a jel amplitúdójával lesz arányos. A jeleket egy amplitúdó analízátorral (analóg-digitál konverter, ADC) egy egész számmá alakítjuk. Ez a mérés végeredménye. Minden egyes beütés egy egész szám, általában 1 és 1028 között. Ezt az egész számot hívjuk csatornaszámmak.

### 9.3.4. Az energiaspektrum

A mérés során az MTA Atommagkutató Intézetében Molnár József vezetésével kidolgozott sokcsatornás analízátort használjuk. Ez közvetlenül egy PC-futó szoftvernek adja át az információt a csatornaszámról, és így a sok beütést ami egy hosszabb mérés során keletkezik egy spektrumba gyűjti. Ennek x-tengelyén a csatornaszám, y-tengelyén pedig a csatornába jutó beütésszám található. Minden mérés első feladata az, hogy a csatornaszámot ismert elemtartalmú minták segítségével, így ismert energiájú csúcsok segítségével kalibráljuk.

Egy adott energiával érkező fotonok a detektorban nem mindig azonos nagyságú jelet keltenek. Ebből az adódik, hogy egy adott energiájú foton detektálásakor a megmért

csatornaszám egy tartományon belül közel normál-eloszlás szerint változik. Ez a „szétkenődés” a mérési bizonytalanság (vagy szlengesen: mérési hiba). A mérési bizonytalanság első számú oka, hogy egy adott eseményben az elektron-lyuk párok keletkezéséhez nem mindig precízen ugyanannyi energia kell. Vannak folyamatok, amelyek elviszik az energiát és nem keletkeznek elektronok és lyukak. Ennek statisztikus ingadozása van. Ez a statisztikus ingadozás azonban mindig jóval kisebb, mint a szcintillációs detektorok esetében. A félvezető detektor energiafelbontása jó. Az energiafelbontás ( $\delta$ ) a szétkenődést leíró normál-eloszlás  $\sigma$ -paraméterével definiálható:

$$\delta = \frac{\sigma}{E}. \quad (9.5)$$

Itt az  $E$  a csúcs középpontjának energiája. Ha a  $\sigma$  értékét csatornaszámban adjuk meg a kalibráció előtt, akkor az  $E$  helyett a csúcs közepének csatornaszámát kell írni. A félvezető detektorok energia-felbontóképessége az alapja a röntgenfluoreszcencia módszer sikerességének.

Az energiaspektrumban nagy rendszámú elemek esetén meg lehet figyelni, hogy a  $K_\alpha$  vonalak felhasadnak. Ez azért van, mert az elektron kiindulási állapota a p-pálya két féle teljes spinű állapot lehet. A pályaperdület és a saját spin két relatív beállása lehetséges. Ezek más energiájúak, ezért a két különböző kezdeti energiáról történő indulás látszódik meg a felhasadt energiájú csúcsokban. Ez a felhasadás a finomfelhasadás. Rendszerint kicsi az értéke, nagy rendszámok esetén várható csak a megjelenése.

## 9.4. A minta összetételének meghatározása

### 9.4.1. Minőségi analízis

A mintában található elemek a kalibrált spektrum egyes csúcsainak energiája alapján határozható meg. Az első részben bemutattuk, hogy ha a K-héjon lévő elektronokat ki lehetett ütni a gerjesztő forrással, akkor  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$  nevű sugárzások keletkeznek. Mindkettőnek jól meghatározott energiája van a Moseley-törvény alapján. Ezért a spektrumban csúcs-párosokat kell keresni, és azonosítani egy adott elemhez. A  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$  vonalak intenzitása is jellegzetes. A  $K_\alpha$  vonalak mindig intenzívebbek, mert közelebbi héjról ugrik át az elektron, mint a  $K_\beta$  vonal esetén, és ennek nagyobb a valószínűsége.

A  $K_\alpha$  és  $K_\beta$  vonalak energiáit táblázatokban lehet megtalálni. Ezek a számok nem függenek a minta összetételétől, a környezet csak a röntgenfotonok számát változtathatja meg, de az energiáját első rendben nem. Természetesen molekulákban más a helyzet. Ott a molekula-elektronpályák függenek attól, hogy milyen másik atommal létesült a kötés.

A nagyobb rendszámú elemek K-elektronjait nem biztos, hogy ki lehet ütni a mintában. A gerjesztő gamma-fotonok energiája nem feltétlenül elegendő. Ilyen esetben az L-héjról lehetséges a kiütés, és ennek eredményeképpen L-vonalaknak megfelelő energiájú



karakterisztikus röntgenfotonok keletkeznek. Ezek általában vonal-hármasokat alkotnak, ellentétben a K-vonalak dublett szerkezetével.

A minőségi meghatározás lényege a nagy csúcsok megkeresése mellett a hozzájuk tartozó kisebb intenzitású csúcsok azonosítása. Sokszor adódik az a helyzet, hogy az egyik csúcs átfed egy másik elem másik csúcsával. Ezekre ügyelni kell, és a táblázat adatait kreatívan kezelve kell meghatározni, az elemösszetételt mennyiségi értékelés nélkül.

### 9.4.2. Mennyiségi analízis

A módszer jól határozható meg mennyiségi analízisre is. A legnagyobb nehézség a korábban bevezetett mátrixhatás precíz számolása. Ezt kiküszöbölendő szokás például nagyon vékony mintát vizsgálni, de vastag minták esetén is működik a mennyiségi meghatározás.

A mintában lévő elemkoncentráció ( $c$ ) esetén a mért csúcs területe arányos lesz  $c$ -vel. A csúcs területe az időtől is nyilván lineárisan függ. A fennmaradó faktorok (ezeket a  $Q$ -ban egyesítettük) a gerjesztő gamma-foton fotoeffektusának valószínűsége, a detektor geometriai elhelyezkedése, a mátrixhatás erősítő és gyengítő szerepe, a röntgenfoton kibocsátás valószínűsége, hamár az elektron-lyukat sikerült előállítani. További effektus a fotonok detektálásának hatásfoka a SiLi detektorban. Összességében az adódik, hogy a mért terület és a koncentráció kapcsolata:

$$T = c \cdot Q \cdot t. \quad (9.6)$$

Egy lehetőség a mátrixhatás nehéz kezelésének elkerülésére a külső standardizálás módszere. Ebben az esetben a nyomelemként a mintában lévő elem ismert mennyiségét adagoljuk a mintához. Ezzel a megfelelő csúcs területének a növekménye ehhez az ismert mennyiségéhez tartozik. Ebből a keresett elem ismeretlen mennyisége meghatározható.

## 9.5. Biztonsági előírások

A mérésen csak azon diákok vehetnek részt, akik előtte baleset- és sugárvédelmi oktatásban részesültek, és erről aláírással nyilatkoztak. Az itt megismertek betartása alapvető fontosságú. A mérés során nagy aktivitású amerícium forrással dolgozunk, amitől ólomüveg árnyékolással védjük magunkat. Minden tevékenységet csak a gyakorlatvezető jelenlétében lehet végezni, az ő instrukcióinak megfelelően. A rendszert megnézni csak óvatosan, nem az ólomüveg mögé hajolva lehet.

## 9.6. Gyakorló kérdések

1. Mi a karakterisztikus röntgensugárzás?
2. Mi az Auger-jelenség?

3. Hogyan jelöljük a különböző alhéjakat?
4. Milyen átmeneteket jelölünk  $K_\alpha$ -val és  $K_\beta$ -val?
5. Melyek a kiválasztási szabályok?
6. Hogyan függ a karakterisztikus röntgen-fotonok energiája a rendszámától? Mit okoz az árnyékolás? (Mi árnyékol mit?)
7. Mi a röntgen-fluoreszcencia jelensége?
8. Mi alapján lehet a mintában lévő elemeket azonosítani?
9. Mi alapján lehet a mintában lévő elemek koncentrációját meghatározni?
10. Mi a mátrixhatás?
11. Mit értünk felbontóképesség alatt?
12. Hogyan lehet elkészíteni a mérőcsatorna energia-kalibrációját?

## 9.7. Mérési feladatok

1. Határozzuk meg egy keverék minta ismert elemeinek csúcsainak meghatározása után a rendszer energiakalibrációját!
2. Határozzuk meg a vas  $K_\alpha$ -vonalára a rendszer energiafelbontóképességét!
3. Határozzuk meg a kapott ismeretlen minták méréséből az őket alkotó főbb elemeket!
4. Határozzuk meg a Moseley-törvény konstansait a mért csúcsok energiáinak ismeretében!
5. Határozzuk meg egy falevél ólomtartalmát külső standardizálással!
6. Bizmut-, ólom- és wolfram-minták mérésével határozzuk meg a Moseley-törvény konstansait L-vonalakra! Értelmezzük az  $A$  és  $B$  konstansok jelentését!

## 10. fejezet

# Pozitron annihiláció vizsgálata (Pávó Gyula és Veres Gábor)

### 10.1. Bevezetés

A pozitron annihilációját fogjuk vizsgálni a laboratórium során, és megismerkedünk a pozitron-emissziós tomográfia (PET) elvi alapjaival. A feladat egy próbababán végzett vizsgálat lesz, melynek során egy idealizált tumor helyét kell megállapítanunk a lehető legnagyobb pontossággal. A meghatározandó mennyiségek:

- a daganat(ok) száma
- a daganatok síkbeli helye:  $(x,y)$  koordináták
- a helymérés pontossága (mérési hibája)
- a daganat(ok) súlyossága (a bennük mérhető relatív aktivitás).

Először áttekintjük a mérés megértéséhez szükséges ismereteket, majd megismerkedünk a mérőberendezéssel.

### 10.2. Elméleti áttekintés

#### 10.2.1. Anyag, antianyag, pozitron

A hétköznapi életben minket körülvevő tárgyakat (és minket magunkat is) főleg protonok, neutronok (melyek atommagokba rendeződnek) és a körülöttük „keringő” elektronok építik fel. A protonok és neutronok nem elemi részecskék, kvarkokból állnak (kétféle kvarkot találhatunk bennük, az  $u$  és  $d$  kvarkokat). Mindezeknek a részecskéknek léteznek *anti-részecskék* is, bár velük ritkábban találkozunk: *anti- $u$*  kvark, *anti- $d$*  kvark, az ezekből

felépülő antiproton és antineutron, stb. Az elektron antirészecskéje (az anti-elektron) másik, gyakrabban használt neve: *pozitron*. Az antirészecskék tömege és élettartama megegyezik a részecske-párjuk tömegével, de elektromos töltésük ellentétes. Így tehát a pozitron töltése pozitív, az antiproton töltése negatív. Ebből a két részecskéből pedig antihidrogén is előállítható, melynek tulajdonságai (pl. spektrumvonalai, tömege) megegyeznek a szokásos hidrogénatoméval.

A pozitron létét 1928-ban P.A.M. Dirac jósolta meg először elméleti úton, majd Carl D. Anderson (10.1. ábrán) detektált először kísérletileg egy elektronéval megegyező tömegű, de elektromosan pozitív töltésű részecskét kozmikus sugárzásban 1932-ben, melyet az elektron antirészecskéjeként, pozitronként kellett értelmezni. A következő évben az



10.1. ábra. Carl D. Anderson (forrás: [www.nobelprize.org](http://www.nobelprize.org))

elektron-pozitron annihilációt is sikerült kimutatni. Mindkét kutató Nobel-díjat kapott felfedezéséért.

A részecskéket tömegükkel, és különféle *kvantumszámaikkal* jellemezzük, rendszerezük (pl. elektromos töltés, spin, paritás, hipertöltés, izospin). A részecskék és a nekik megfelelő antirészecskék kvantumszámai ellentétesek, így egy részecske és egy antirészecske ütközésekor megsemmisíthetik (*annihilálhatják*) egymást. Szemléletesen ez a folyamat ahhoz hasonlóan képzelhető el, mint amikor egy félvezetőben egy szabadon mozgó elektron és egy *elektronhiány* (ahol a kristályrács atomjainak egyikéhez eggyel kevesebb elektron kapcsolódik) találkozik, és az elektron beugrik a pozitív effektív elektromos töltésű lyukba, melynek eredményeképpen mindkét töltéshozdozó „megsemmisül”. Természetesen, megfelelő energiabefektetéssel az elektron újra kilökhető a helyéről, és az eredeti állapot visszaállítható.

Részecske és antirészecske annihilációjakor is hasonló jelenségről van szó. A részecskefizikai vákuum (a kvantummechanikai alapállapot, legalacsonyabb energiájú állapot)

ugyanis nem teljesen „üres”. Szemléletesen úgy képzelhető el, mint részecskék és anti-részecskék „tengere”, amelyben azonban nincs elég energia ahhoz, hogy szabad részecskék és antirészecskék keletkezzenek. A határozatlansági reláció miatt ugyan lehetséges, hogy egy ilyen részecske-antirészecske pár egy nagyon rövid időre létrejöjjön (ez a vákuumfluktuáció), de ezek kívülről befektetett energia hiányában azonnal annihilálódnak is. A pozitron ebben a tengerben tekinthető – a fenti analógiához visszatérve – egy vákuumbeli elektronhiánynak. Előfordulhat tehát, hogy egy szabad elektron „beugrik” a vákuumban levő „elektronhiányba” (ami tulajdonképpen a pozitron), és visszaáll a vákuumállapot, ahol nincs szabad pozitron, sem szabad elektron. Megfelelő energiabefektetéssel ebben az esetben is létrejöhet az ellentétes irányú folyamat, a vákuumból kipolarizálható egy elektron, és a helyén ilyenkor mindig egy „lyuk” (pozitron) marad. Nagy energiájú részecskegyorsítóknál akkora energiával ütköznek össze a felgyorsított részecskék, hogy több száz részecske és antirészecske is keletkezhet ebből a részecskefizikai vákuumból.

Az annihiláció során is megmarad az összenergia és a teljes impulzus. Egy álló (nagyon lassan mozgó) elektron (vagy pozitron) teljes energiája  $E=m_e c^2$ , ahol  $m_e$  az elektron tömege,  $c$  pedig a fénysebesség vákuumban. Tehát egy álló elektron-pozitron pár összenergiája  $2m_e c^2$ . Ez az energia az annihiláció során fotonok (a fény részecskéi, az elektromágneses sugárzás *kvantumai*) formájában sugárzódik ki, melyek nagy energiájuk miatt a  $\gamma$ -fotonok közé tartoznak.

### 10.2.2. Antianyag a természetben

A természetben főleg anyagot, és nem antianyagot találunk, ezért nem látunk látványos, megsemmisülésekből származó nagy mennyiségű és energiájú  $\gamma$ -sugárzást. Ha pl. a Földön jelentős mennyiségű antianyag lenne, akkor az a szokásos anyaggal érintkezve megsemmisülne, így kis idő után már csak szokásos anyagot találnánk. A fentiek szerint annihiláció során jelentős mennyiségű energia szabadulhat fel. Becsüljük meg 1 gramm antiproton és 1 gramm proton annihilációjakor felszabaduló energiát! Ehhez tudnunk kell, hogy a részecskék fizikájában az energiát mindig elektronvolt ( $eV$ ) egységekben mérjük. Ez pontosan az a mozgási energia, melyre egy elektron szert tesz, amikor 1 V gyorsítófeszültséggel felgyorsítjuk. Mivel az elektron töltése  $1,6 \cdot 10^{-19} C$ , ez az energia SI egységekben éppen  $(1,6 \cdot 10^{-19} C) \cdot (1 V) = 1,6 \cdot 10^{-19} J$ . A proton tömege praktikus egységekben 938 millió  $eV/c^2$ . Ebből a fentiek alapján az 1 grammnyi proton és antiproton megsemmisülésekor felszabaduló, elektromágneses sugárzás formájában kisugárzódó energia óriási értéknek adódik:

$$2 \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 938 \cdot 10^6 eV/c^2 \cdot c^2 = 1,1 \cdot 10^{33} eV = 1,8 \cdot 10^{14} J = 50 \text{ millió } kWh = 50 \text{ GWh}$$

Összehasonlításképpen, ez a Paksi Atomerőmű kb. egy napi energiatermelésének felel meg. Az, hogy miért van szinte kizárólag anyag (és nem antianyag) a környezetünkben, a Világegyetem születése (ősrobbanás) utáni anyag-antianyag aszimmetria következménye, melynek oka a modern részecskefizika egyik legfontosabb megválaszolatlan kérdése.

A természetben az antianyag (így a pozitron) a természetes és mesterséges radioaktivi-

tás során keletkezhet (pozitív  $\beta$ -bomlás), illetve a nagy energiájú kozmikus sugárzás részecskéi által a légkörben keltett részecskezápórokban. Részecskegyorsítóknál létrehozott részecskenyalábok ütközésekor elég energia áll rendelkezésre ahhoz, hogy a vákuumból részecske-antirészecske párok keletkezzenek. Az így létrehozott antirészecskék újbóli lelassítás után kis méretű mágneses csapdában tárolhatók. Ezekből bonyolultabb rendszerek, pl. antihidrogén is előállítható.

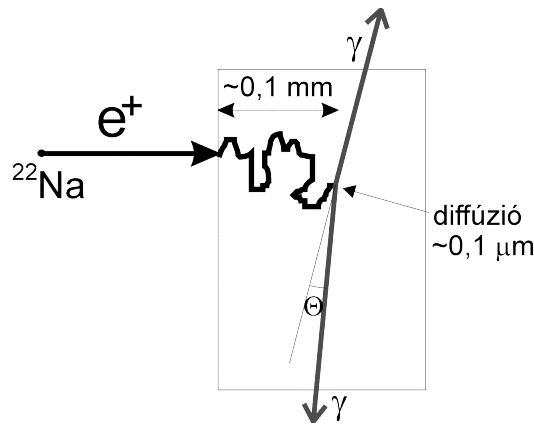
A természetes radioaktív  $\beta$ -bomlás során nemcsak pozitron (vagy elektron), hanem *neutrínó* (vagy *antineutrínó*) is keletkezik, amely rendkívül ritkán hat kölcsön a többi részecskével, így kísérleti szempontból (legalábbis a laboratóriumi gyakorlaton) általában megfigyelhetetlen. A  $\beta$ -bomlás során felszabaduló, jól meghatározott energiát a neutrínó és a pozitron közösen viszik el, véletlenszerű arányban. Ezért a bomlásban keletkezett pozitron energiája nem lesz egy élesen meghatározott érték, hanem egy széles valószínűségeloszlás szerint változik. A maximális pozitron-energia általában nagyságrendileg százezer  $eV$  körül van.

Anyagvizsgálatban gyakran használt  $\beta^\pm$  bomló izotópok például a  $^{22}\text{Na}$  ( $T_{1/2}=2,58$  év, maximális pozitron-energia  $E_{max} = 545$  keV), a  $^{58}\text{Co}$  ( $T_{1/2}=71$  nap,  $E_{max} = 470$  keV) és a  $^{64}\text{Cu}$  ( $T_{1/2}=12,8$  óra,  $E_{max} = 1340$  keV). Az orvostudományban használt izotópok a biológiában fontos elemek  $\beta^\pm$  bomló izotópjai, mint például a  $^{11}\text{C}$  ( $T_{1/2}=20$  perc), a  $^{13}\text{N}$  ( $T_{1/2}=10$  perc), az  $^{15}\text{O}$  ( $T_{1/2}=2$  perc) és a  $^{18}\text{F}$  ( $T_{1/2}=110$  perc). Az orvosi gyakorlatban használt források rövid élettartamúak, így nem terhelik sokáig a páciens szervezetét sugárzással. Rövid élettartamuk miatt a természetben nem léteznek, hanem magreakciókban (részecskegyorsítóknál) kell előállítani ezeket, amely nem lehet túl messze a PET-et (a pozitron-annihiláció orvosi/biológiai alkalmazását) használó kór-háztól. Ezeket az izotópokat cukor-, víz-, vagy ammónia-molekulákba építve juttatják be az emberi szervezetbe. Az onkológiai diagnózisban elsősorban a  $^{18}\text{F}$ , míg az neurológiai vizsgálatokban az  $^{15}\text{O}$  is használatos. A mérés során a laboratóriumban a  $^{22}\text{Na}$  izotópot fogjuk használni.

### 10.2.3. A pozitron annihilációja

A pozitron élettartama tökéletes vákuumban ugyanúgy végtelen, mint az elektroné. A gyakorlatban azonban valamilyen anyagon belül (sok esetben már magában a sugárforrásban vagy annak burkoltában) haladva nagyon rövid idő alatt annihilálódik egy elektronnal. Az annihiláció csak abban az esetben következik be nagy valószínűséggel, ha az elektron és a pozitron relatív sebessége kicsi. Ezért annihiláció előtt a pozitron (elektromos töltése miatt) lelassul, az anyagon belül ionizációval és az atomi elektronok gerjesztésével energiát veszít, termalizálódik. A lassulási, termalizálódási folyamat kb.  $10^{-12}$  s (0,001 ns) alatt játszódik le, és a végén az elektron energiája 0,02-0,03  $eV$  lesz. Ezalatt az idő alatt tipikusan 0,1 mm mélységig jutnak be a pozitronok sugárforrást körülvevő anyagba (orvosi alkalmazás esetén a környező testszövetekbe, sejtekbe).

Az 10.2. ábrán látható ennek a folyamatnak a szemléltetése. A sugárforrásként



10.2. ábra. A pozitron annihilációja

használt  $^{22}\text{Na}$ -ból kilépő pozitronok a téglalappal jelölt anyagban lelassulnak. Ezután még körülbelül  $0,1 \mu\text{m}$  utat diffúzióval tesznek meg a pozitronok, mielőtt egy elektronnal találkoznak és annihilálódnak. Ha az anyag elektronsűrűsége nagy, akkor az annihiláció valószínűsége és a kibocsátott  $\gamma$ -sugárzás intenzitása is nagy lesz.

Az annihiláció során leggyakrabban két foton keletkezik. Idealizált esetben, egy nagyon lassan mozgó elektron és pozitron esetén a kezdeti összimpulzus nagyon kicsi (nulla), az összenergia pedig a fentiek szerint  $2m_e c^2 = 2 \cdot 511 \text{ keV} = 1022 \text{ keV}$ . Ha csak egyetlen foton sugárzódna ki, akkor tehát ennek a fotonnak  $1022 \text{ keV}$  lenne az energiája az energiamegmaradás miatt. A foton egy bizonyos irányba távozna, és mivel a foton impulzusa és az energiája egymással arányos, a teljes rendszer annihiláció utáni összimpulzusa a foton irányába mutatna és értéke nagy lenne ( $1022 \text{ keV}/c$ ). Ez azonban ellentmond az impulzusmegmaradás törvényének, így szükség van a második fotonra. Ekkor az impulzus csak úgy tud megmaradni, hogy a két foton – ebben az ideális esetben – pontosan ellentétes irányban mozog, és mindegyik energiája  $511 \text{ keV}$ . Ekkor a két ellentétes irányú, egyenlő nagyságú impulzusvektor összege nulla lesz. Ez a gondolatmenet érvényes akkor is, ha egy tetszőleges sebességű, de kis relatív sebességű elektron-pozitron pár semmisül meg, hiszen ez az előbbi esettől csak egy egyenes sebességgel mozgó koordináta-rendszerbe való áttéréssel különbözik, és a koordináta-rendszer megválasztásától nem függhet a keletkező fotonok száma.

Megjegyezzük, hogy a fenti gondolatmenet a vákuumra érvényes, de közelítőleg igaz anyagokban is. Ott azonban az impulzusmegmaradás úgy is teljesülhet, hogy a második foton helyett a közelben lévő atommag viszi el a szükséges impulzust. Ebben a ritka esetben előfordulhat egyfotonos annihiláció is.

A lelassult pozitron és az elektron kis valószínűséggel kötött állapotot is alkothat (a hidrogénatomhoz hasonlóan, csak itt a protont a pozitron helyettesíti). Ebben az állapotban a pozitron és az elektron a közös tömegközéppontjuk körül kering. Az esetek

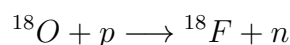
1/3-ában a két részecske spinje ellentétes irányú, az állapot élettartama  $0,125 \text{ ns}$ , és két fotonra bomlik. A valószínűbb állapot pedig az, amikor a spinek egyirányúak, az állapot élettartama  $142 \text{ ns}$ , és az impulzusmomentum megmaradása miatt ez az állapot három fotonra bomlik. Mindez azonban nem változtat azon, hogy a legvalószínűbb folyamat a kétfotonos annihiláció.

A másik fontos jelenség, hogy a két foton egymással bezárt szöge nem pontosan  $180^\circ$ , mivel nem szabad, álló elektronnal, hanem az atomban nagy sebességgel mozgó elektronnal történik az annihiláció, tehát az elektron-positron rendszernek van egy kis kezdeti impulzusa. A pozitron mozgási energiája az annihiláció előtt tipikusan  $0,02 \text{ eV}$ , az atomban kötött elektronné pedig  $10 \text{ eV}$  körüli, míg a fotonok energiája kb.  $511000 \text{ eV}$ . Ebből látszik, hogy a pozitronok kezdeti impulzusa elhanyagolható, és a két foton összipulzusa  $10 \text{ eV}$  körüli lesz. Mivel a fotonok energiája sokkal nagyobb mint az összipulzusuk, az általuk bezárt szög eltérése a  $180^\circ$ -tól ( $\Theta$ ) nagyon kicsi lesz, legfeljebb  $1-2^\circ$ . Ez a szögeloszlás közvetve tehát arról szolgáltat információt, hogy a mintánkban milyen az elektronok sebességeloszlása. Ezt az általunk használt berendezéssel és sugárforrással nem tudjuk kimérni (ahhoz ugyanis nagyon messzire, több méterre kellene helyezni egymástól a detektorainkat, ekkor viszont nagyon nagy aktivitású sugárforrást kellene használnunk). Ha az elektron eredeti impulzusa éppen a kisugárzott fotonok egyenesébe esik, akkor a fotonok által bezárt szög pontosan  $180^\circ$  lesz ugyan, de a fotonok energiája kis mértékben módosul az  $511 \text{ keV}$ -es értékhez képest. Az általunk használt detektorok nem alkalmasak ennek a kis energiakülönbségnek a mérésére, azonban ez, és a fenti szögkorrelációs mérés a modern szilárdtestfizikai vizsgálati módszerek fontos eszköze.

#### 10.2.4. A pozitron-annihiláció orvosi alkalmazása

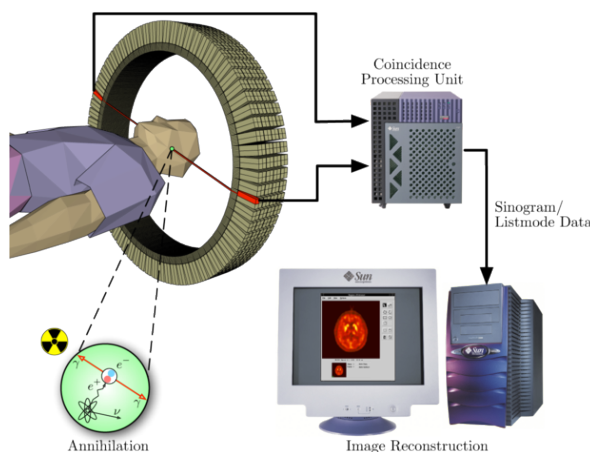
A pozitron annihilációt az orvosi gyakorlatban a pozitron-emissziós tomográfia (PET) során használják fel. A vizsgálatok célja különböző biológiailag aktív területek, pl. daganatok (tumorok) pontos feltérképezése, két-, vagy háromdimenziós képük előállításuk az emberi testen belül műtét nélkül. Ez a pontos diagnózishoz ugyanúgy szükséges, mint a későbbi kezelés megtervezéséhez. A technikát Michael Phelps fejlesztette ki 1975-ben.

A PET vizsgálat első lépése, hogy a beteg szervezetébe rövid felezési idejű radioaktív izotópot juttatnak, mely pozitronokat emittál. Fontos, hogy előzőleg ezt az izotópot be kell ágyazni egy biológiailag aktív molekulába, amely a szervezetben – általában a véráramba bejutva – a megfelelő, vizsgálni kívánt helyre kerülve feldúsul. Az egyik gyakran, az esetek 90%-ában alkalmazott ilyen molekula  $\text{C}_6\text{H}_{11}\text{FO}_5$ , amely a glukóz molekulájában a hatodik oxigén atommag helyett a radioaktív, mesterségesen előállított, 110 perc felezési idejű  $^{18}\text{F}$  izotópot tartalmazza. Ennek előállítása ciklotronokban (kis energiájú részecskegyorsítóknak) történik, ahol protonokkal bombáznak  $^{18}\text{O}$  atommagokkal dúsított vizet ( $\text{H}_2\text{O}$ ). Az





reakcióban keletkező radioaktív fluort összegyűjtik, és a fenti molekulához csatolják különböző kémiai reakciók sorozatával az erre szakosodott radioizotóp laboratóriumokban. Ezután a rövid felezési idő miatt rendkívül gyorsan a PET-et alkalmazó kórházakba szállítják. Mivel a szállítás igen bonyodalmas lehet, az újabb a PET berendezéseket ciklotronnal és miniatűr izotóp-laboratóriummal együtt telepítik. Felnőtteknél általában 200 - 400 MBq aktivitású izotópot adnak be a véráramba. Ez a módosított cukor minden sejtbe bejuthat, amely fokozott mennyiségű cukrot vesz fel, elsősorban az agy, a máj és a legtöbb tumorfajta sejtjeibe, és ott is maradnak a fluor atommag elbomlásáig. Az izotóp bejuttatása után megfelelő idő (kb. egy óra) elteltével a páciens a PET berendezésbe kerül. (10.3. ábra). Kevesebb, mint egy milliméteres út megtétele után a

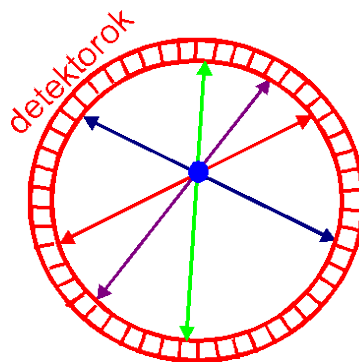


10.3. ábra. A PET diagnosztikai berendezés vázlatja (forrás: [wikipédia](#))

pozitronok a testszövetben lévő elektronokkal egyenként két, egymással majdnem pontosan  $180^\circ$ -os szöget bezáró fotonra annihilálódnak. Ezek az  $511 \text{ keV}$  energiájú fotonok jó eséllyel át tudnak haladni a testszöveteken energiavesztés nélkül, és a páciens körülvevő detektorokba érkezők. A fotonok szilícium fotodiódákkal, vagy szcintillációs detektorral érzékelhetők (a laborgyakorlaton az utóbbi módszert alkalmazzuk).

### 10.3. A PET koincidencia-mérés elve

A PET mérésnél a (páciensbe bejuttatott) sugárforrást több tucat, vagy több száz darab, egy vagy több gyűrű alakban elrendezett detektor veszi körül (10.4. ábra). Ezek a detektorok érzékenyek az annihilációból származó  $511 \text{ keV}$  energiájú fotonokra, és képesek megállapítani, hogy a két ellentétes irányban haladó foton egyszerre érkezett-e a detektorokba, mint ahogy azt az annihiláció esetén várjuk.



10.4. ábra. A detektorok gyűrű alakú elhelyezkedése

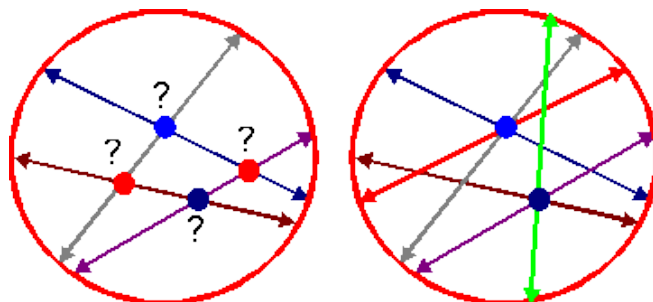
A laboratóriumban is alkalmazott NaI szcintillátor olyan különleges anyag, amely töltött részecske áthaladásakor fényfelvillanást hoz létre a látható fény hullámhossztartományában. A beérkező nagy energiájú foton Compton-effektussal illetve fotoeffektussal hat kölcsön a szcintillátor anyagában lévő elektronokkal, melyek így kiszakadva a kristályból, nagy energiára tesznek szert. Ezek az elektronok már töltöttek, és energiájukat fokozatosan leadva szcintillációs fényt keltenek. Ez a fény a szcintillátorhoz csatlakozó fotoelektron-sokszorozóba jut. A fotoelektron-sokszorozó ablaka vékony fémbevonattal (fotokatóddal) rendelkezik, melyből látható fény hatására fotoeffektussal elektronok szabadulnak ki. Ezek több fokozaton keresztül, összesen néhány száz vagy ezer volt feszültség hatására, a fémelektrodákkal (dinódákkal) ütközve megsokszorozódnak. Az így felszabadult több százezer elektron már érzékeny erősítővel mérhető. A mért jel nagysága arányos lesz a beérkező foton energiájával (esetünkben 511  $\text{eV}$ -vel). Ennek az arányosságnak a segítségével kiválaszthatjuk a minket érdeklő annihilációs fotonokat, és elválaszthatjuk tőlük az esetleg még a detektorunkba jutott más energiájú fotonokat.

A másik nagyon fontos feltétele annak, hogy a detektor jeleit pozitronannihilációnak tulajdonítsuk, hogy a két ellentétes irányú foton egyszerre érkezzon a detektorokba, egyszerre adjon jelet (hiszen egy pillanatban keletkeztek). Ezt az egyidejűséget természetesen csak valamilyen véges pontosságon belül van értelme megkövetelni. Ezt a gyakorlati egyidejűség-kritériumot koincidenziának nevezzük, és pontos definiálásához szükség van a koincidenzia szélességére: arra az időtartamra, amelyen belül érkező két jelet egyidejűnek tekintünk. Általában elegendő néhány száz tíz, vagy száz  $ns$  szélességet alkalmazni, hiszen a fény (vagy gamma-sugárzás)  $1 ns$  alatt vákuumban és levegőben kb.  $30 \text{ cm}$ -t tesz meg (ha tehát nem akarjuk, hogy a maga a koincidenzia érzékeny legyen arra, hogy a mintán belül pontosan hol történt az annihiláció, legalább néhány  $ns$  toleranciára szükség van). A laboratóriumi gyakorlaton néhány  $\mu s$  koincidenzia-szélességet fogunk használni. A koincidenzia megkövetelése nagyban segít kiszűrni a háttérből származó nemkívánatos fotonokat, illetve a  $\beta$ -bomlás során esetleg keletkező egyéb gamma-sugárzást (mint pl. a

$^{22}\text{Na}$  esetében is). Ez különösen a kis aktivitású források esetén nagyon fontos.

A PET-vizsgálat során a cél a befecskendezett radioaktív izotóp koncentrációjának meghatározása (feltérképezése) a térbeli hely függvényében. Először vizsgáljuk meg, mi történik egyetlen radioaktív szemcse jelenléte esetén! A gamma-sugárzás ekkor mindig ugyanabból a pontból (illetve a fentiek alapján egy kb.  $\text{mm}^3$  nagyságú térfogatból) indul ki. A beteget körbevevő, sok érzékeny cella közül két cellára koincidenzában érkezik egy-egy  $511 \text{ keV}$  energiájú foton. Ekkor biztosak lehetünk benne, hogy a radioaktív szemcse valahol a két detektort összekötő egyenes mentén helyezkedik el (mivel a két foton nem pontosan ellentétes irányú, valamint a detektor cellái sem végtelenül kicsik, ez az egyenes inkább egy véges vastagságú cső). Ezt az egyenest nevezzük *válaszegyenesnek*.

Mivel a fénysebesség nem végtelen, a két foton pontos detektorba érkezési ideje kis mértékben függ attól, hogy a válaszegyenes mentén pontosan hol történt az annihiláció. Tehát a két foton beérkezése közötti rendkívül kicsi ( $<1 \text{ ns}$ ) időkülönbséget pontosan mérve máris megállapítható lenne az annihiláció helye. Az ehhez szükséges időfelbontást azonban csak a legmodernebb PET berendezések tudják elérni. Ennek az előnye, hogy sokkal kisebb mennyiségű izotóp bevitele is elegendő a PET térképezéshez, csökkentve ezzel a beteg sugárterhelését. Általában azonban az időkülönbség mérhetetlenül kicsi, és csak a válaszegyenes ismert a koincidenzá-eseményből. (10.5. ábra). Ekkor további



10.5. ábra. A detektorok gyűrű alakú elhelyezkedése

annihilációkat kell detektálnunk. A következő annihiláció ismét megszólaltat majd két detektort, melyeket összekötő egyenesre szintén igaz, hogy a sugárzó szemcse ebben az egyenesben van. Mivel a két válaszegyenes nagy valószínűséggel nem párhuzamos, és a mérési pontosságon belül metszeniük is kell egymást, a metszéspont kijelöli a sugárzó szemcse keresett helyét. Természetesen több új válaszegyenes megmérésevel tovább pontosítható a helymérés. Látható tehát, hogy egyetlen pontszerű sugárforrás helyét nagyon egyszerű meghatározni, és a mérési pontosság növelhető a mérési idő, illetve a beadott izotóp aktivitásának növelésével.

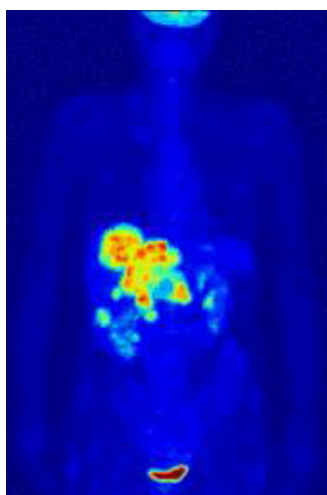
Ha két sugárzó szemcsénk van, akkor már nem elég két válaszegyenes mérése a két szemcse pozíciójának meghatározásához. Három válaszegyenes megmérése, az egyik

szemcse biztos, hogy nulla vagy egy válaszegyenest produkált, így annak a szemcsének a helye nem határozható meg. Négy válaszegyenes mérése sem elég (10.5. ábra bal oldala), mert az egyenesek metszéspontjaiból nem derül ki egyértelműen, hogy hol voltak az annihilációk helyei (az ábrán a négy egyenes ugyanúgy származhatott a két kék, mint a két piros ponttal jelölt helyeken történt annihilációból). Itt tehát már sok (legalább öt) mérést kell végeznünk (10.5. ábra jobb oldala). Sok válaszegyenest meghatározva, meg kell találnunk a térben azt a két metszéspontot, ahol a válaszegyenesek metszik egymást, „besűrűsödnek”. Hasonlóan járhatunk el akkor is, ha nem kettő, hanem több pontszerű sugárforrásunk van.

A valóságban azonban nem néhány pontszerű forrás, hanem a beteg szervezetében valamilyen folytonos eloszlás szerint felgyűlt izotóp-kontinuum térképét kell meghatározunk. Ekkor a beteget képzeletbeli kockákra, cellákra osztják, melyek mindegyikében ismeretlennek tekintik az izotóp-koncentrációt. Ezután nagyon sok válaszegyenest mérnek meg. Annak alapján, hogy az egyes cellákon hány válaszegyenes ment át, számítógép segítségével határozzák meg az egyes cellákban a koncentrációt. A térbeli felbontást javítani, (tehát a cellák méretét csökkenteni) itt is a mérési idő, vagy a beadott izotóp mennyiségének növelésével lehet. (A detektorok méretének csökkentése, vagy számuk növelése ugyanis nagymértékben növelné a berendezés előállítási költségeit). Egy PET-vizsgálat általában csak néhány millió válaszegyenest szolgáltat. Az orvosi PET berendezések nagyon sok detektort tartalmaznak, melyek adatait bonyolult, gyors, és erre a célra épített számítógép és szoftver értékeli ki. Az adatokat korrigálni kell a háttérsugárzásra, az esetleg testen belül kölcsönható fotonokra (pl. Compton-szóródás), a detektorok holtidejére (a detektor minden beütés után egy ideig érzéketlen marad), stb.

A korai PET berendezések egyetlen detektor-gyűrűből álltak a 10.3 ábrának megfelelően, a modern berendezések viszont sok gyűrűből összetett hengerek. Ekkor kétféleképpen lehet háromdimenziós képet alkotni: vagy az egyes gyűrűket külön-külön kezelve állítanak elő kétdimenziós képeket (az emberi test szeleteit), és ezekből rakják össze a 3D képet, vagy eleve megengedik a különböző gyűrűk közötti koincidenkiákat is. Az utóbbi módszer sokkal érzékenyebb, de számításigényesebb is. A végeredmény az izotóp-koncentráció háromdimenziós térképe, melynek segítségével az orvos vagy radiológus értékes információkat kaphat a tumor kiterjedéséről, a betegség súlyosságáról. (10.6. ábra).

Az orvosi PET diagnosztikát általában összekapcsolják más képalkotó eljárásokkal a nagyobb megbízhatóság érdekében, pl. egyszerű röntgen-képekkel, számítógépes röntgentomográfiával (CT), ultrahang-vizsgálattal illetve a PET-nél nagyobb térbeli felbontású, de más típusú információt szolgáltatató mag-mágneses rezonancia (MMR, angolul NMR, MRI - magnetic resonance imaging) eljárással. Míg az MMR pontos anatómiai részleteket jelenít meg a betegről, (hiszen az MMR-hez használható atommagok, pl. hidrogén vagy fluor eleve megtalálhatók a szervezetben nagy mennyiségben), a PET a beteg metabolizmusát deríti fel, pl. egy szokásosnál intenzívebb anyagcserével rendelkező daganatot. A kétfajta háromdimenziós kép egyszerre is elkészíthető, miközben a beteg mozdulatlan



10.6. ábra. PET vizsgálat háromdimenziós eredménye (forrás: [wikipédia](#))

marad, így a kétféle információ összevetéséből nagyon pontosan látható, hogy melyik szerv melyik részét támadta meg a betegség. A daganatok diagnosztizálása mellett a PET fontos szerepet játszik az agy dementiával (a kognitív funkció károsodásával) járó betegségeinek és az Alzheimer kórnak a felismerésében, valamint az agy- és szívműködés tudományos orvosi kutatásában. A kisállatokon végrehajtott gyógyszer-teszteket is gyakran értékeli ki PET segítségével. A PET vizsgálatoknak ez a fajtája annyira fontos a gyógyszeripar számára, hogy külön névvel („kisállat-PET”) illetik ezt a tudományágat. A PET segítségével az állatkísérletek során feláldozott állatok száma is drasztikusan csökkenthető, mivel a gyógyszer-tesztek eredményeit nem az állat elpusztításával járó műtéti úton kell ellenőrizni, és egy állatot többször is fel lehet használni. Az ember számára pedig a PET az MRI-vel és CT-vel szemben a betegségek korai felismerésének lehetőségét nyújtja, ugyanis a PET a beteg szerv funkcionális elváltozásaira is érzékeny, amelyek a betegség kialakulása során általában jóval megelőzik az anatómiai elváltozásokat. Nehézséget jelent, hogy a PET alkalmazása jóval drágább mint a hagyományos CT vagy MRI eljárásoké, így hozzáférhetősége nagyban függ a hozzá kapcsolódó technológia árának leszorításától.

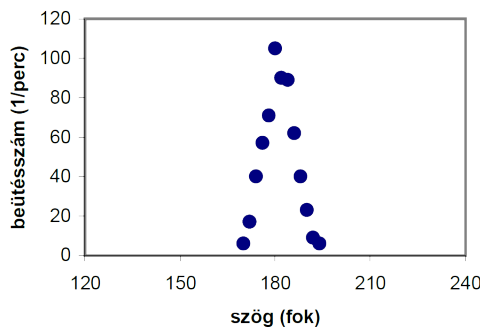
### 10.3.1. Sugárvédelmi megfontolások

A PET vizsgálat nem jár semmilyen műtéti beavatkozással, viszont ionizáló sugárzással kismértékben terheli a szervezetet. A szokásos sugárterhelés vizsgálatonként mindössze  $7\text{ mSv}$ . Érdemes ezt összehasonlítani a mindenki által elszenvedett radioaktív háttér-sugárzással (évente kb.  $2\text{ mSv/év}$ ), a tüdőrontgen vizsgálattal ( $0,02\text{ mSv}$ ), mellkasi CT vizsgálattal (kb.  $8\text{ mSv}$ ), illetve a pilóták és légiutaskísérők kozmikus sugárzásból eredő

terhelésével (2-6 mSv/év). A mi laboratóriumi gyakorlatunkon nagyon kis aktivitású (<0,1 MBq) forrást használunk, melyből származó sugárterhelés a gyakorlat időtartama alatt kb. 0,0001 mSv. Ennek az értéknek kicsinysége ellenére a sugárforrásokkal az ALARA elv szerint mindig tartsuk a lehető legnagyobb távolságot, csipesszel fogjuk meg őket, illetve a források manipulálását bízjuk a mérésvezetőre! Mérés közben csak annyira hajoljunk közel a forráshoz, amennyire és amennyi ideig szükséges! Ha egy méternél távolabb tartózkodunk, akkor a kapott sugárdózisunk már elhanyagolható lesz.

## 10.4. A mérés menete

A fent tárgyalt PET tomográf egyszerűsített modelljével (az ún. pozitronszkennerrel, amelyet a PET előtt használtak az orvosi gyakorlatban) fogunk dolgozni két dimenzióban, mellyel egy próbababán végzünk vizsgálatokat, melynek képzeletbeli vénájába  $^{22}\text{Na}$  izotópot fecskendeztünk (pl. NaCl konyhasó formájában). Az izotóp képzeletben összegyűlt a próbababának abban a részében, ahol a képzeletbeli daganat található. Az lesz a célunk, hogy minél pontosabban megállapítsuk ennek a daganatnak a helyét, illetve az esetleges áttétek helyét, valamint az ezekben mért aktivitások arányát (tehát hogy melyik daganat „súlyosabb” és mennyivel). Eközben a próbababát közvetlenül megérinteni, sérülést okozni neki nem szabad. A próbababa egy átlátszó plexi dobozban foglal helyet, melyet csak a mérésvezető nyithat fel. A doboz tetejére a mérést végzőknek egy megfelelő méretű, téglalap alakú átlátszó írásvetítő-fóliát kell ragasztaniuk, melyre később filctollal rajzolhatnak.

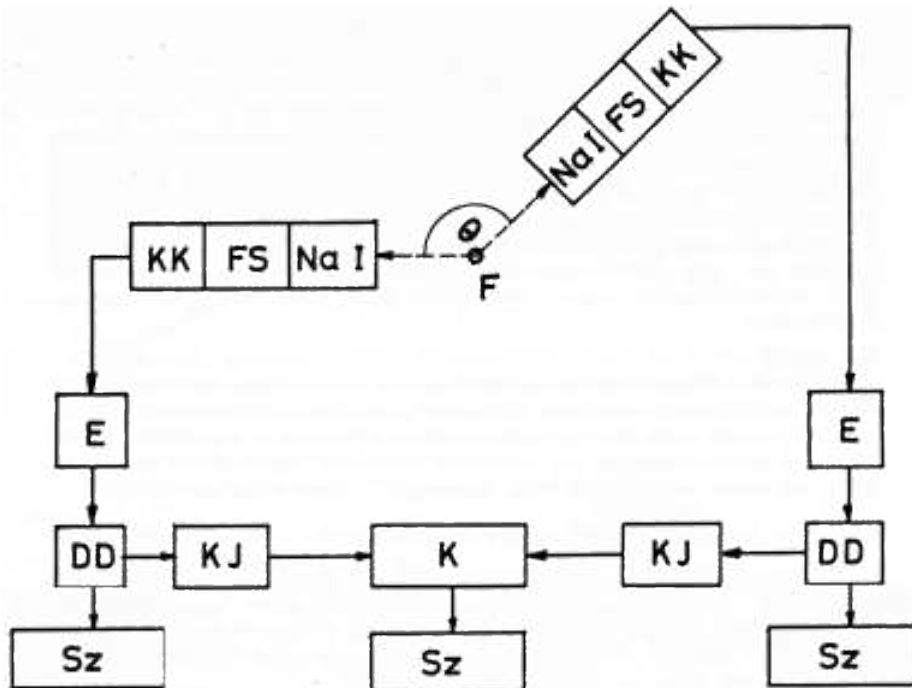


10.7. ábra. A koincidencia-jelek számának függése a két NaI szcintillátor detektor szögétől

A próbababa körül két forgatható gamma-detektor van, melyekkel a fent tárgyaltak szerint koincidencia-eseményeket fogunk mérni. Mivel csak két detektorról van szó, ezek csak akkor fognak koincidenciában jelet adni, ha az ezeket összekötő egyenesre illeszkedik a keresett sugárforrás. Tehát az egyik detektor forgatásával letapogatható a forrás helye: abban a helyzetben fogunk maximális számú koincidenciát mérni percenként, ahol

a két detektor és a forrás egy egyenesbe esik. Az elforgatás szögének függvényében ábrázolva a koincidenenciák percenkénti számát tehát egy csúcsot kapunk, melynek helye az általunk keresett szögnél lesz (10.7. ábra). A csúcs szélessége egyrészt a sugárforrás kiterjedésének, másrészt a detektoraink méretének, harmadrészt a forrás és a detektorok távolságának függvénye.

A mérési összeállítás a 10.8. ábrán látható:



10.8. ábra. A mérőberendezés logikai rajza: F: gamma-forrás, (próbababa); NaI: szcintillátor, FS: fotoelektron-sokszorozó; KK: illesztő áramkör, E: erősítő, DD: differenciáldiszkriminátor, KJ: késleltető és jelformáló áramkör, K: koincidenencia-egység; Sz: számoló

Méréseinkhez olyan szcintillációs mérőfejeket használunk, amelyekben a fotoelektron-sokszorozóra NaI(Tl) szcintillátor kristály illeszkedik. Az egyik detektort a mérés alatt nem fogjuk mozgatni (álló detektor), a másik helyzete ehhez képest  $140^\circ$ -tól  $220^\circ$ -ig állítható (mozgó detektor). A detektorok szögét a beépített szögmérő segítségével pontosan beállíthatjuk. A detektorok feszültségét (kb.  $820\text{ V}$ ) egyetlen közös tápegység adja. Az egyes detektorágak erősítése nagyjából azonosra van állítva.

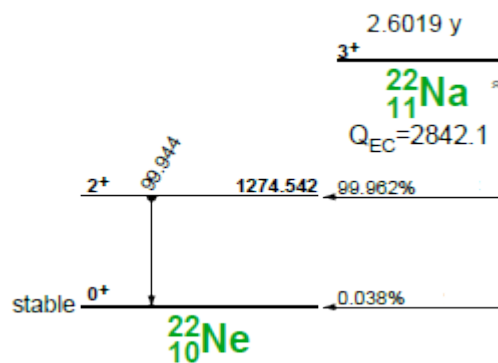
A két energia-analizáló ág erősítői és differenciál diszkriminátorai (DD) két hasonló egységben foglalnak helyet. A DD-vel választhatjuk ki a mérés során a mérni kívánt teljes energiájú csúcsot. A DD differenciál üzemmódban akkor ad ki jelet, ha a bemenetére adott elektromos impulzus amplitúdója egy  $(V, V+dV)$  tartományba esik.  $V$ -t alap-



szintnek nevezzük, és értéke egy potenciométerrel finoman szabályozható a 0,1–10 V tartományban. A  $dV$  értéke a csatornaszélesség. Ennek értékét egy, az előzőhöz hasonló potenciométerrel szabályozhatjuk a 0,01–1 V tartományban, azaz ennél a tízszer körbetekerhető potenciométernél az előzőhöz képest egy 10-es osztás van! Oszilloszkópon megvizsgálhatjuk az erősített jeleket, továbbá a DD kimenetéről jövő uniform impulzusokat.

A DD-kból kijövő jeleket kettéosztjuk, és az egyik ágon számolhatjuk a két detektor jeleit külön-külön. A másik ágban az álló detektor jelei közvetlenül, a mozgó detektor jelei késleltetés után a koincidencia-egységbe jutnak, és a koincidencia-egység kimenő jeleit is számláljuk. A mérési berendezésbe beállított negyedik számlálón a mérési időt láthatjuk. A beállítások után egy gombnyomással indíthatjuk a mérőrendszert, mely így egyszerre méri az időt és a beütésszámokat.

A számlálók, erősítők, nagyfeszültség a mérés előtt megfelelően be vannak állítva. Ha mégis szükséges lenne ezek állítása, a mérésvezetőtől kérjünk segítséget!



10.9. ábra. A  $^{22}\text{Na}$  izotóp bomlási sémája:  $^{22}_{11}\text{Na}$  kezdeti- és  $^{22}_{10}\text{Ne}$  a végállapot; 2,6019 a felezési idő [év]; a ”%”-al jelölt mennyiségek az illető átmenetek valószínűségei; 1274,542 a  $\gamma$ -foton-,  $Q_{EC}$  az elektron befogási reakcióban felszabaduló energia [keV];  $0^+$ ,  $2^+$ ,  $3^+$ , az állapotok spinjei

A  $^{22}\text{Na}$  atommag 2,61 év felezési idővel  $^{22}\text{Ne}$  atommagra bomlik, miközben pozitront sugároz ki. Ennek az annihilációjából két 511 keV-es foton származik. A bomlás során ezekkel lényegében egyszerre egy harmadik, 1280 keV energiájú foton is keletkezik, amikor a  $^{22}\text{Ne}$  mag az alapállapotába kerül (10.9. ábra).

Ezért fontos, hogy detektorunkat úgy állítsuk be, hogy csak az 511 keV körüli energiatartományban legyen érzékeny! Ez a fent említett differenciál diszkriminátorokkal elérhető. A megfelelő V és  $dV$  értékek úgy állapíthatók meg, hogy a mérés előtt  $dV$ -t nem



változtatva és a  $V$  alapszintet lépésenként növelve felvesszük a  $^{22}\text{Na}$  által kisugárzott fotonok energia-spektrumát (az egyoldali beütésszámokat ábrázoljuk a  $V$  függvényében). Ebben az  $511\text{ keV}$  és  $1280\text{ keV}$  energiájú csúcsok jól láthatók.  $V$  és  $dV$  értékét ezután úgy kell beállítanunk, hogy az  $511\text{ eV}$ -es csúcs  $V$  és  $V+dV$  között legyen. Ezt az eljárást mindkét detektorra el kell végezni.

## 10.5. Ellenőrző kérdések

1. Mekkora a pozitron tömege (magfizikában szokásos egységekben) és elektromos töltése?
2. Mi történik egy elektron és egy pozitron találkozásakor?
3. Az annihiláció során hány és milyen részecske keletkezik?
4. Mekkora az annihiláció során keletkező részecskék energiája?
5. Mekkora az annihiláció során keletkező részecskék mozgási iránya által bezárt szög?
6. Mekkora az annihiláció során keletkező részecskék sebessége?
7. Mekkora a pozitron élettartama vákuumban és anyagban?
8. Kb. hány kilogramm (egész kg-ra kerekítve) antianyag található a Földön?
9. Hol található antianyag a természetben?
10. Milyenfajta béta-bomlásokat ismerünk, és milyen részecskék keletkeznek ezek során?
11. Soroljunk fel egy anyagvizsgálatban és két orvostudományban használt  $\beta^\pm$ bomló izotópot!
12. Mekkora az orvosi gyakorlatban (PET) használt izotópok felezési ideje?
13. Keletkezhet-e egyetlen foton a pozitron annihilációjakor, és hogyan?
14. Keletkezhet-e három foton a pozitron annihilációjakor, és hogyan?
15. Annihilálódhat-e a pozitron, ha protonnak ütközik?
16. Mi határozza meg az annihilációban keletkező fotonok által bezárt szög  $180$  foktól való eltérését?
17. Általában milyen és mekkora aktivitású izotópot juttatnak be a PET vizsgálatnál a beteg szervezetébe?

18. Át tudnak-e haladni az annihilációból származó fotonok az emberi testszöveteken?
19. Pontosan hogyan érzékeli a fotonokat a detektorunk?
20. Mekkora utat tesz meg a gamma-sugárzás 1 ns alatt?
21. Mi a koincidencia-módszer lényege?
22. Mi a válaszgyenes, és miért van vastagsága?
23. Legalább hány válaszgyenes mérése szükséges egy pontszerű sugárforrás lokalizálásához?
24. Legalább hány válaszgyenes mérése szükséges két pontszerű sugárforrás lokalizálásához?
25. Milyen korrekciók szükségesek a valóságos, emberen végzett PET vizsgálat adatainak kiértékelésekor?
26. Milyen más képalkotó eljárásokkal alkalmazzák egyidejűleg a PET diagnosztikát?
27. Orvosi szempontból milyenfajta információt szolgáltat a PET, és milyen az MRI?
28. Soroljunk fel legalább kétfajta betegséget, melyek diagnosztizálásában hasznos a PET!
29. Mi a kisállat-PET jelentősége?
30. Mennyire súlyos sebészi beavatkozást jelent pontosan egy PET-vizsgálat?
31. Mekkora sugárdózist kap a PET-vizsgálat során egy beteg? Mekkora a háttér-sugárzás miatt elszenvedett ionizáló sugárdózis évente?
32. Hogyan kell majd minimalizálnunk a laboratóriumi gyakorlat során minket érő sugárzás dózisát? Kb. mekkora dózist jelent ez?
33. Miért és hogyan alkalmazunk forgatható detektort a mi mérésünk során?
34. Mi a differenciál diszkriminátor feladata?
35. Összesen hány foton sugárzódik ki a  $^{22}\text{Na}$  egyetlen bomlása során?
36. Mit kell látnunk a  $^{22}\text{Na}$  fotonenergia-spektrumán?
37. Hogyan állapítható meg a próbababa daganatának helye és annak mérési hibája?
38. Mit kell feltétlenül tartalmaznia a PET mérési jegyzőkönyvnek?

## 10.6. Mérési feladatok

1. Kérjük meg a mérésvezetőt, hogy a próbababát helyezze el a tartódobozban! Ragasszunk átlátszó fóliát a doboz tetejére, és rajzoljuk be a próbababa kontúrját a lapra szaggatott vonallal! A dobozt erősítsük a helyére (a közepén található menetes csavarra)! Kapcsoljuk be a NIM egységet és a nagyfeszültségű tápegységet!
2. Mérjük ki a  $^{22}\text{Na}$  fotonenergia-spektrumát az egycsatornás differenciál diszkriminátorok segítségével! A két diszkriminátor csatornaszélességét állítsuk 0,1 V-ra, a mérési időt pedig állítsuk 0,2 percre (12 s)! A differenciál diszkriminátorok alapszintjét 0,1 V-tól 0,1 voltonként változtatva mérjük ki a  $^{22}\text{Na}$  spektrumát mindkét detektorban! Figyelem: Azonos potenciométer állásnál a csatornaszélesség csak az alapszint tizedrésze!
3. A spektrum felvétele után az alapszint és a csatornaszélesség beállításával fogjuk be a  $^{22}\text{Na}$  izotóp 511 keV energiájú annihilációs  $\gamma$  vonalát (ezt a csúcsot a fotonenergia-spektrum alakjából lehet felismerni, hiszen tudjuk, hogy csak 511 és 1280 keV-nél vannak teljes energiás csúcsok)! Állítsuk a mérési időt 1 percre, és állítsuk a detektorok érzékeny felületét kb. 20 cm-re a forgástengelytől!
4. A mozgó detektor szögállását  $140^\circ$ -ról 5 fokonként (szükség esetén sűrűbben)  $220^\circ$ -ig változtatva mérjük meg a szög függvényében a koincidenziák számát! Ábrázoljuk a koincidenziák számát a szög függvényében (mm-papíron vagy számítógéppel)! Állapítsuk meg minél pontosabban a csúcs(ok) helyét, és ennek a szögnek a mérési hibáját!
5. Állítsuk a mozgó detektort az előbbieket szerint megállapított szöghelyzetbe, és húzzunk ki cérnát a detektorok középpontjai között! A cérna mentén rajzoljuk be a doboz tetejére ragasztott fóliára az így kapott *válaszegyenest*!
6. Forgassuk el a próbababát (dobozzal együtt) kb.  $60^\circ$ -kal! Ismételjük meg a 4.) és az 5.) pontokat, így megkapjuk a második *válaszegyenest*!
7. Ismételjük meg a 6.) pontot, így megkapva a harmadik *válaszegyenest*!
8. Állapítsuk meg a *válaszegyenesek* metszéspontjaiból a sugárforrás kétdimenziós helyét! Állapítsuk meg a helymérés pontosságát egyrészt abból, hogy a *válaszegyenesek* milyen pontosan metszik egymást, másrészt az 5.) pontban megállapított szögmérési pontosságból! Hasonlítsuk össze a kétféleképpen kapott mérési hibát! Állapítsuk meg, hogy a próbababa mely testrészén találtunk (képzeletbeli) daganatot! Ha több ilyen is van, akkor becsüljük meg az egyes daganatokban felgyűlt  $^{22}\text{Na}$  izotóp aktivitásának arányát és próbáljuk meg a daganatok térbeli kiterjedését is rangsorolni! (Melyik a nagyobb?)

9. A mérés után kapcsoljuk ki a nagyfeszültséget és a NIM egységet, távolítsuk el a dobozról a fóliát, és annak fénymásolatát mellékeljük a jegyzőkönyvhöz! A daganat(ok) helyének  $(x,y)$  koordinátáit és azoknak mérési hibáját is adjuk meg úgy, hogy a fólia bal alsó sarkát tekintjük a koordináta-rendszer origójának, vízszintes oldalát  $x$ -tengelynek, függőleges oldalát  $y$ -tengelynek!

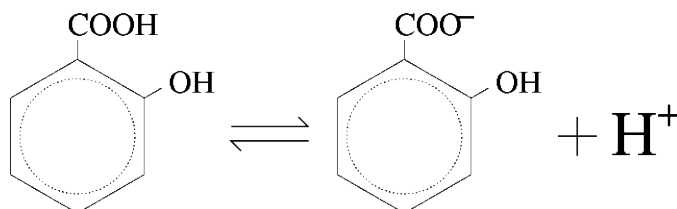
A jegyzőkönyvnek tartalmaznia kell a fenti lépések rövid leírását (dokumentálását), minden számadat táblázatos és grafikonos ábrázolását (tengelyfeliratokkal és mértékegységekkel), a végeredményt és annak hibáját, a fólia fénymásolatát, a gyakorlat alatt készített ábrákat legalább annyi magyarázattal, amennyiből azok mibenléte megérthető, és amennyiből kiderül, hogy a jegyzőkönyv szerzője pontosan értette, amit leírt. Mivel a próbababában a források minden mérésnél máshol vannak, ne vegyük igénybe mások mérőcsoportok „segítségét”! Nem kell, és nem is szabad idézni a mérésleírásból 1-2 mondatnál többet.

# 11. fejezet

## Spektrofotometria (Czirók András)

### 11.1. Bevezetés

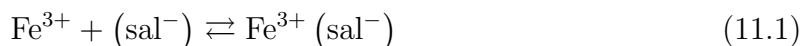
Látható és ultraibolya tartományban végzett spektroszkópai méréseket gyakran alkalmaznak oldatkomponensek koncentrációjának meghatározására. A laboratóriumi gyakorlat során egy oldatsorozat abszorpciós spektrumaiból egy nemlineáris, többparaméteres görbeillesztési eljárást alkalmazva meghatározzuk egy kémiai reakció egyensúlyi állandóját. Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggéséből a reakció termodinamikai jellemzőit becsüljük meg.



11.1. ábra. Szalicilsav

Amikor vasiont tartalmazó vas-ammónium-szulfát ( $\text{Fe}^{3+}(\text{NH}_4^+)(\text{SO}_4^{2-})_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ ) oldatot összekeverünk szalicilsav (2-hidroxibenzoé sav, 11.1. ábra) oldattal, akkor egy lila színű komplex képződik. Az oldószer mindkét esetben 2mM sósav (HCl), a pH értéke megközelítőleg 2, 5. Ilyen körülmények között a szalicilsav hidroxil csoportja nem disszociál és a karboxil csoport ( $-\text{COOH}$ ) is csak részlegesen.

A komplexet a szalicilsav anionja képezi a vasionnal, a következő egyensúlyi reakció során:



Ha az oldatban lévő A anyag koncentrációját  $[A]$  jelöli, akkor az időegység alatt bekövetkező asszociációk száma  $k_1[\text{Fe}][\text{sal}]$ . Ha minden komplex egységnyi idő alatt ugyanakko-

ra valószínűséggel bomlik fel, akkor a disszociációk száma időegységenként  $k_2[\text{komplex}]$ . Egyensúly esetén az asszociációk és disszociációk száma egyenlő:

$$k_1[\text{Fe}][\text{sal}] = k_2[\text{komplex}] \quad (11.2)$$

A (11.2) egyenlet kapcsolatot teremt az egyensúlyban lévő reakciókomponensek koncentrációi között:

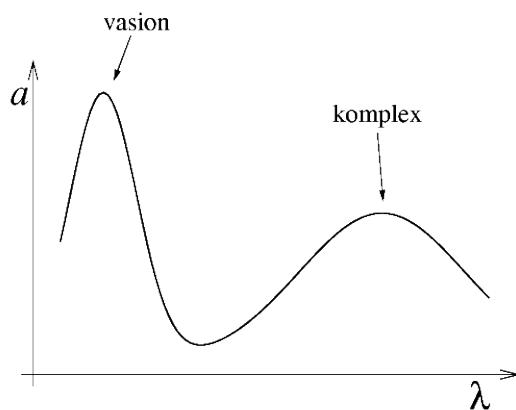
$$\frac{[\text{komplex}]}{[\text{Fe}][\text{sal}]} = \frac{k_1}{k_2} = K, \quad (11.3)$$

ahol  $K$  a reakció egyensúlyi állandója.

Ha  $x$ ,  $y$  és  $z$  jelöli az oldatba bémért vas és szalicil, valamint a kialakult komplex koncentrációját, akkor az oldott állapotban lévő vas koncentrációja  $x - z$ . Hasonlóan, a komplexen kívüli szalicil koncentrációja  $y - z$ . Ezekkel a változókkal kifejezve az egyensúlyi állandó:

$$K = \frac{z}{(x - z)(y - z)}. \quad (11.4)$$

Azaz  $x$ ,  $y$  ismeretében és  $z$  mérésével  $K$  egyszerűen számolható.



11.2. ábra. Az oldat abszorpciós spektrumának vázlata

A komplex koncentrációjára abszorpciós spektrumok segítségével fogunk következtetni. Amint a 11.2. ábra vázolja, a szalicilát-ionnak ebben a hullámhossztartományban nincs abszorpciója, a vashoz tartozó csúcs 350 nm alatt található, míg a komplexhez tartozó csúcs ( $\lambda_*$ ) 500 – 550 nm között van.

Ha az oldatban lévő anyagok abszorpciós csúcsai jól elkülönülnek, akkor az anyagra jellemző abszorpciós csúcs nagysága ( $a_* = a(\lambda_*)$ ) és az anyag koncentrációja között a Lambert–Beer-törvény teremt kapcsolatot:

$$a_* = a(\lambda_*) = \log_{10}(I_0/I) = \varepsilon \ell [\text{komplex}], \quad (11.5)$$

ahol  $I_0$  és  $I$  a beeső illetve átérésztett fény intenzitása,  $\varepsilon$  a komplex abszorpció (extinkciós) állandója és  $\ell$  az optikai úthossz (a mintatartó küvetta szélessége). Vagyis,  $a_*$  és  $z$  között egy egyszerű egyenes arányosság áll fenn, amit (11.4) alapján az alábbi formában írhatunk:

$$a_* \sim z = K(x - z)(y - z). \quad (11.6)$$

## 11.2. Egyensúlyi állandó meghatározása ekvimoláris oldatok keveréseiből

A (11.6) kifejezésben az arányossági tényező értéke  $1/\varepsilon\ell$ . Mivel  $\varepsilon$  általában nem ismert, ezért a  $K$  egyensúlyi állandó értékét az alábbi módon, ekvimoláris ( $x + y = c_0 = \text{const}$ ) oldatok  $a_*$  abszorpció adataiból kétparaméteres görbeillesztéssel határozzuk meg.

Először olyan dimenziótlan mennyiségeket vezetünk be, amelyek az  $x$ ,  $y$ ,  $z$  változókat  $c_0$ -hoz viszonyítják.

$$x = (1/2 + \xi)c_0 \quad (11.7)$$

$$y = (1/2 - \xi)c_0 \quad (11.8)$$

$$z = \zeta c_0 \quad (11.9)$$

$$K = \kappa/c_0 \quad (11.10)$$

ahol  $-1/2 \leq \xi \leq 1/2$  a keverési arányt jellemzi,  $0 \leq \zeta \leq 1$  pedig megadja, hogy az oldat mekkora hányada alkot komplexet. Ezekkel az új változókkal a koncentrációk közötti (11.6) összefüggés az alábbi alakra hozható:

$$a_* \sim \zeta = \kappa [1/4 - \xi^2 + \zeta^2 - \zeta]. \quad (11.11)$$

A másodfokú egyenletet megoldva:

$$2\zeta = k \pm \sqrt{k^2 - 1 + 4\xi^2}, \quad (11.12)$$

ahol:

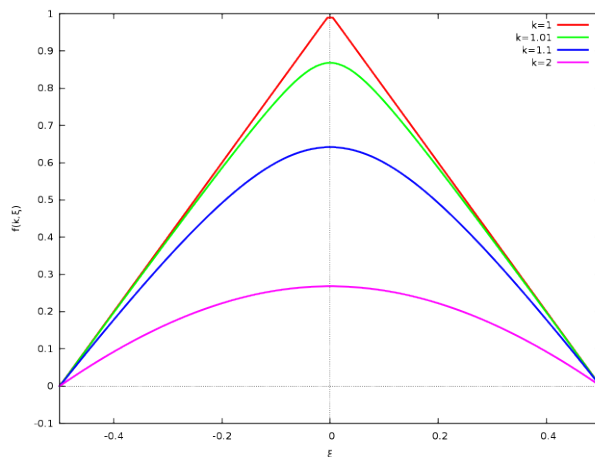
$$k = (1 + \kappa)/\kappa > 1. \quad (11.13)$$

Mivel egykomponensű oldatok esetén nem képződik komplex,  $\xi = \pm 1/2$  esetén  $\zeta = 0$ . Ezért (11.12)-ben a kisebbik gyököt kell megtartanunk:

$$2\zeta = k - \sqrt{k^2 - 1 + 4\xi^2}. \quad (11.14)$$

A jobb oldalon álló

$$f(k; \xi) = k - \sqrt{k^2 - 1 + 4\xi^2} \quad (11.15)$$



11.3. ábra.  $f(k; \xi)$  értékei  $\xi$  függvényében, a  $k$  paraméter néhány értékénél

kifejezés  $\xi$  függvényében a 11.3. ábrán vázolt görbesereget írja le. A görbék alakját a  $k$  paraméter határozza meg:

$$\lim_{k \rightarrow 1} f(k; \xi) = 1 - 2|\xi|. \quad (11.16)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(k; \xi) \sim \text{const} - \xi^2 \quad (11.17)$$

A mérés során különböző oldatokat készítünk úgy, hogy  $x + y$  állandó maradjon. Ilyen oldatsorozatot legegyszerűbben azonos töménységű (2.5mM) kiindulási oldatok összekéverésével nyerünk. A kísérletileg meghatározott  $a_*$  értékeket a  $\xi$  keverési arány függvényében ábrázolva egy olyan görbét kapunk, ami (11.11) alapján arányos az  $f(k; \xi)$  kifejezéssel. Ha az arányossági tényezőt  $C$  jelöli, akkor a  $Cf(k; \xi)$  kétparaméteres kifejezés illesztésével  $k$ , majd abból a  $K$  egyensúlyi állandó is meghatározható. Az illesztési hibából, valamint  $x$ ,  $y$  és  $a_*$  hibájából  $K$  hibája megbecsülhető.

### 11.3. Egyensúlyi állandó meghatározása eltérő töménységű oldatok keveréseiből

Ha a kiindulási oldatok töménysége nem azonos, akkor a fenti gondolatmenetet általánosíthatjuk egy háromparaméteres illesztési eljárásá. Tételezzük fel, hogy a vasoldat töménysége ismeretlen,  $c_0$  egységekben  $d$ . Ekkor a  $\xi$  keverési arányú vasoldat koncentrációja:

$$x = (1/2 + \xi)dc_0, \quad (11.18)$$

míg a szaliciloldaté változatlanul:

$$y = (1/2 - \xi)c_0. \quad (11.19)$$



Az új  $d$  ismeretlenre is illeszteni fogunk. A (11.9) és (11.10) transzformációk segítségével átírhatjuk a (11.6) kifejezést:

$$a_* \sim \zeta = \kappa [(1/2 + \xi)d - \zeta] [1/2 - \xi - \zeta] \quad (11.20)$$

alakra. A  $\zeta$ -ban másodfokú egyenletet nullára rendezve a

$$0 = \kappa\zeta^2 + (-\kappa d/2 - \kappa d\xi - \kappa/2 + \kappa\xi - 1)\zeta + \kappa d/4 - \kappa d\xi^2 \quad (11.21)$$

kifejezésre jutunk. A gnuplot programmal az illesztés menete:

```
gnuplot> a=1.0
gnuplot> d=1.0
gnuplot> k=1.5
gnuplot> B(x,k,d)=-k*d/2 - k*d*x -k/2 + k*x - 1
gnuplot> C(x,k,d)=k*d/4 - k*d*x**2
gnuplot> f(x,k,d,a)=a/(2*k)*(-B(x,k,d)-sqrt(B(x,k,d)**2 - 4*k*C(x,k,d)))
gnuplot> fit f(x,k,d,a) 'data.dat' via k,d,a
```

## 11.4. Az egyensúlyi állandó hőmérséklet-függése

Állandó nyomáson és hőmérsékleten végbemenő spontán folyamatok során a Gibbs szabadenergia:

$$G = U - TS + pV \quad (11.22)$$

csökken, termodinamikai egyensúlyban  $G$  minimális. A

$$\mu_i = \frac{\partial G}{\partial N_i} \quad (11.23)$$

kémiai potenciál jellemzi, hogy egy  $i$  típusú részecskét a rendszerbe helyezve mennyire változik meg annak Gibbs szabadenergiája. Egy reakciólépés során a reagensek eltűnnek, a reakciótermékek pedig megjelennek a rendszerben. A reakció során  $G$  változását így

$$\Delta G = \sum_i \nu_i \mu_i \quad (11.24)$$

adja, ahol a  $\nu_i$  mennyiségek a reakció sztöchiometriai állandói. A (11.1) reakció során ezek rendre -1,-1 és 1 (két anyag eltűnik, egy keletkezik). Ha a rendszer egyensúlyban van, akkor egy reakciólépés bekövetkeztekor  $G$  nem változik:

$$0 = \Delta G = \sum_i \nu_i \mu_i. \quad (11.25)$$

Ideális gázok és oldatok esetén a komponensek kémiai potenciálját a

$$\mu_i = kT \ln \frac{c_i}{c_i^*} \quad (11.26)$$

kifejezés adja, ahol  $c$  jelöli a koncentrációt,  $c^*$  pedig egy hőmérsékletfüggő, anyagra jellemző mennyiség. A gyakorlatban (11.26) helyett a

$$\mu_i = \mu_i^o + kT \ln c_i/c_o \quad (11.27)$$

kifejezés hasznosabb, ahol  $\mu_i^o$  jelöli az anyag "standard" körülmények ( $25^\circ\text{C}$ , légköri nyomás,  $c_o = 1\text{mol}/\ell$  koncentráció) között vett kémiai potenciálját.

A (11.27) és (11.25) kifejezéseket összevetve:

$$0 = \sum_i \nu_i \mu_i^o + kT \sum_i \ln(c_i/c_o)^{\nu_i} \quad (11.28)$$

adódik. Az első összeg a reagensek és a végtermékek standard körülmények között vett kémiai potenciáljainak a különbsége, ami a reakcióra jellemző állandó:

$$\Delta\mu^o = \sum_i \nu_i \mu_i^o. \quad (11.29)$$

A második összegben pedig megjelenik a reakció egyensúlyi állandója:

$$\ln \frac{K}{c_o^p} = \sum_i \ln(c_i/c_o)^{\nu_i} \quad (11.30)$$

ahol  $p = \sum_i \nu_i$ , az egyensúlyi állandó dimenziójától függő érték (esetünkben  $p = -1$ ). Ezek az egyenletek kapcsolatot teremtenek a reakció termodinamikájára jellemző  $\Delta\mu^o$ , valamint az egyensúlyi állandó között:

$$-kT \ln \frac{K}{c_o^p} = \Delta\mu^o = \sum_i \nu_i \mu_i^o. \quad (11.31)$$

A *reakcióhő* a reakció során (állandó nyomáson) bekövetkező entalpiaváltozás. A reakcióhő meghatározásához kihasználjuk, hogy ideális gázokra és oldatokra  $\mu = G/N$ , ezért:

$$\mu = h - Ts, \quad (11.32)$$

ahol  $h$  és  $s$  az egy molekulára jutó entalpia és entrópia. Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggése (11.31) alapján:

$$\frac{\partial}{\partial T} \ln \frac{K}{c_o^p} = - \sum_i \nu_i \frac{\partial}{\partial T} \frac{\mu_i^o}{kT}. \quad (11.33)$$

Ahhoz, hogy a (11.33) egyenletben szereplő deriváltakat ki tudjuk értékelni, deriváljuk a Gibbs szabadenergiát definiáló (11.22) egyenletet  $T$  szerint, a nyomást állandó értéken tartva:

$$\frac{\partial G}{\partial T} = \frac{\partial U}{\partial T} - S - T \frac{\partial S}{\partial T} + p \frac{\partial V}{\partial T}. \quad (11.34)$$

Az energiamegmaradás miatt reverzibilis folyamatokra

$$dU = TdS - pdV \quad (11.35)$$

teljesül, ezért a hőmérséklet megváltoztatását kifejező deriváltakra is fennál:

$$\frac{\partial U}{\partial T} = T \frac{\partial S}{\partial T} - p \frac{\partial V}{\partial T}. \quad (11.36)$$

A fenti összefüggést (11.34) kifejezésbe helyettesítve

$$\frac{\partial G}{\partial T} = -S \quad (11.37)$$

adódik, egy részecskére jutó mennyiségekkel számolva:

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} = -s. \quad (11.38)$$

A deriválást elvégezve (11.33)-ben, (11.38) és (11.32) felhasználásával

$$\frac{\partial}{\partial T} \frac{\mu_i^o}{kT} = \frac{1}{kT} \frac{\partial \mu_i^o}{\partial T} - \frac{\mu_i^o}{kT^2} = -\frac{s_i^o}{kT} - \frac{h^o - Ts^o}{kT^2} = -\frac{h^o}{kT^2} \quad (11.39)$$

adódik. Mivel a reakció során bekövetkező entalpiaváltozás (reakcióhő) a kiindulási anyagok és a végtermékek entalpiáinak a különbsége,

$$\Delta h = \sum_i \nu_i h_i^o. \quad (11.40)$$

A (11.33), (11.39) és (11.40) egyenletek összevetéséből kapjuk a van't Hoff összefüggést:

$$\frac{\partial}{\partial T} \ln \frac{K}{c_o^p} = \frac{\Delta h}{kT^2}. \quad (11.41)$$

Ha  $\Delta h > 0$ , a reakciótermékek keletkezésékor hőelvonás történik (endoterm reakció). Amennyiben tehát  $K$  hőmérsékletfüggése ismert, ebből a reakcióhoz szükséges hőmennyiség, a reakcióhő meghatározható.

## 11.5. Gyakorló kérdések

1. Mi a spektroszkópiai mérések alapelve? Mi definiálja az optikai spektroszkópiát?
2. Detektálás szempontjából milyen fajtái vannak az optikai spektroszkópiának?
3. Látható fényvel milyen gerjesztéseket tudunk elérni az anyagban?
4. Ismertesse a Lambert–Beer-törvényt!
5. Hogyan definiáljuk az abszorpciót, illetve a transzmissziót?
6. Hogyan befolyásolhatja a mérési spektrumot a fény szóródása?
7. Mi a kétutas spektroszkópia elve és mik az előnyei?
8. Ha egy reakcióhoz  $n$  komponens találkozása szükséges, híg oldatokban és gázokban hogyan függ a komponensek koncentrációjától az egységnyi idő alatt lezajló reakciólépések száma?
9. Mi az egyensúlyi állandó?
10. Miket nevezünk ekvimoláris oldatoknak?
11. Mit jelöl az 1mM, "egy millimólos" koncentráció?
12. Mi a kémiai potenciál? Hogy függ a híg oldatok/ideális gázok kémiai potenciálja a koncentrációjától?
13. Mi egy reverzibilis kémiai reakció egyensúlyának termodinamikai feltétele?
14. Hogyan változhat a reakció egyensúlya a hőmérséklet függvényében? Hogyan osztályozhatjuk a reakciókat ilyen tekintetben?
15. Mit ír le a van't Hoff-egyenlet?
16. Hogy függ a leírt mérés pontossága a kiindulási oldatok töménységétől?
17. Hogy változik az abszorpciós spektrum, ha a vas 10%-a kicsapódik az oldatból?
18. Hogy változna az abszorpciós spektrum ha a vizsgált reakció komponenseinek a koncentrációit megduplázzuk?
19. Mi történik egy- vagy többparaméteres görbeillesztés során? Mik a bemenő adatok, mi az eredmény, és mi határozza meg?
20. Ha A és B mennyiség hibái  $dA$  és  $dB$ , becsüljük meg a hibáját az  $A/(A+B)$  kifejezésnek!

## 11.6. Mérési feladatok

1. Határozzuk meg a reakció egyensúlyi állandóját  $T = 20^\circ \text{C}$  hőmérsékleten! Tételezzük föl, hogy a vas alapoldat koncentrációja nem pontos. Becsüljük meg a vas-oldat koncentrációját a szalicilsav alapoldat koncentrációjához képest!
2. Számítsuk ki az oldat extinkciós állandóját a legnagyobb elnyelést adó keverési aránynál! A fény a mintában  $\ell = 1 \text{ cm}$  utat tesz meg, a mérőküvetta méreteiből adódóan.
3. Határozzuk meg az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggését a  $15 - 60^\circ \text{C}$  tartományban,  $5^\circ \text{C}$  mintavételezéssel, a számított extinkciós állandó segítségével! A van't Hoff egyenletet felhasználva becsüljük meg a reakcióhőt! Mennyi a reakció során bekövetkező entrópiaváltozás?

Felhasznált oldatok:

1. 2 mM sósav oldat. Segítségével az alábbi oldatok oly módon készülnek, hogy a tömegmérés pontossága 0,003 g-on belül legyen.
2. 2,5 mM  $\text{Fe}^{3+}$  oldat (250 ml 2 mM HCl oldatban feloldva 0,301 g vas-ammónium-szulfát).
3. 2,5 mM szalicilsav oldat (250 ml 2 mM HCl oldatban feloldva 0,086 g szalicilsav).

A mérés során referencia mintaként a sósav oldatot használjuk. Az alapvonalat úgy határozzuk meg, hogy a spektrométer mindkét mintatartójába a referencia oldatot töltjük. Az oldatsorozat elkészítéséhez az 1 : 9, 2 : 8, ..., 9 : 1 keverési arányokat javasoljuk.

## 12. fejezet

# Infravörös spektroszkópia (Czirók András)

### 12.1. Bevezetés

Az infravörös (IR) spektroszkópiában  $\lambda = 3 - 30 \mu\text{m}$  hullámhosszú ( $E = 0,05 - 0,5 \text{ eV}$  energiájú, azaz  $\tilde{\nu} = 400 - 4000 \text{ cm}^{-1}$  hullámszámú <sup>1</sup>) sugárzást bocsátunk a mintára. Ezzel az energiával a molekulák rezgési és forgási energiaszintjeit tudjuk gerjeszteni, és az elnyelési spektrum vizsgálatával elsősorban a kémiai kötésekre vonatkozó információkhoz juthatunk. A spektrum jellegzetességeit felhasználva azonosíthatunk molekulákat, vizsgálhatjuk szimmetria-tulajdonságaikat.

A lehető legegyszerűbb, infra-aktivitással (infravörös fényt elnyelő) rendelkező rendszer egy kétatomos molekula gáza. A molekula energiáját az elektron-, a vibrációs- és rotációs állapota határozza meg:  $E = E_e + E_v + E_r$ .  $E_v$  nagyságrendje  $\sim 0,1 \text{ eV}$  ( $H_2$  elektron-alapállapot esetén  $0,273 \text{ eV}$ ), ami egy nagyságrenddel kisebb mint az elektron-állapotból származó energiák ( $1 - 10 \text{ eV}$ ).  $E_r$  a  $10^{-3} - 10^{-4} \text{ eV}$  nagyságrendbe esik, tehát:  $E_e > E_v > E_r$ . Ebből következik, hogy az elektronszerkezet energiaszintjei távolabb helyezkednek el, mint a vibrációs szintek, továbbá a vibrációs szintek távolabb helyezkednek el, mint a rotációs szintek (12.1. ábra). Infravörös gerjesztés hatására az elektronszerkezet nem változik ( $h\nu < E_e$ ), így a továbbiakban feltételezzük, hogy a molekula szobahőmérsékleten elektron-alapállapotban van.

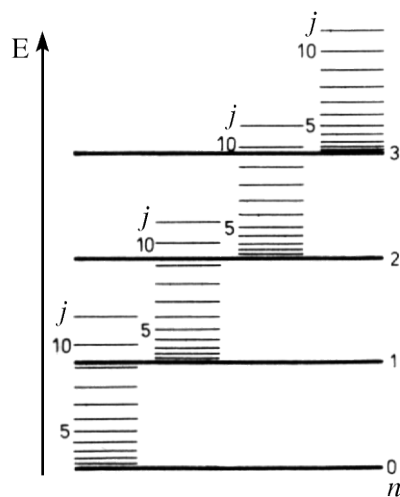
Az infra-aktivitás feltételei, röviden összefoglalva:

1. A molekularezgések és a fény kölcsönhatásának feltétele, hogy a rezgési módusban a molekula elektromos dipólmomentuma megváltozzon.
2. A gerjesztéshez szükséges, hogy a gerjesztő fény energiája megegyezzen a végső és a kiindulási állapotok energiájának különbségével:

$$\hbar\omega = |E_v - E_k|. \quad (12.1)$$

---

<sup>1</sup> $E = h\nu = hc\tilde{\nu} = hc/\lambda$



12.1. ábra. Molekulák rezgési ( $n$ ) és forgási ( $j$ ) energiaszintjei

3. Az átmenet során a rezgési ( $n$ ) vagy a forgási ( $j$ ) kvantumszámnak  $\pm 1$ -et kell változnia.

$$\Delta n = \pm 1 \quad \Delta j = \pm 1$$

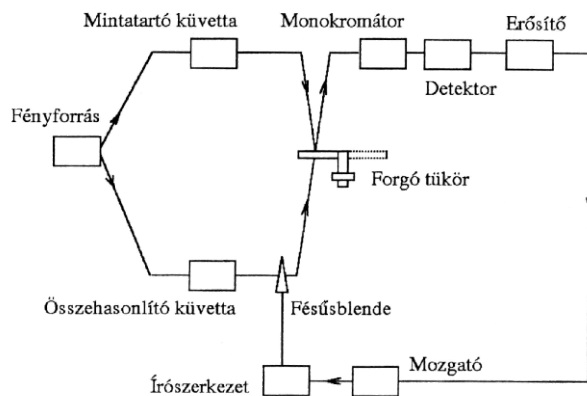
Anharmonikus oszcillátor esetén  $n$  megváltozása tetszőleges lehet.

## 12.2. A kétutas spektrométer működési elve

### 12.2.1. A berendezés fényútja

Az optikai kiegyenlítés elvén működő spektrofotométer blokkdiagramját a 12.2. ábra mutatja.

A fényforrás sugarai tükrök segítségével kettéosztva haladnak át az egyes fényutakban elhelyezett mintatartókon. Az egyik anyagminta a vizsgálat tárgya, a másik pedig a referencia anyag, amely lehetőség szerint nem abszorbeál. A két minta azonos optikai hosszat reprezentáló küvettában van elhelyezve. Az áthaladás után a két sugár egy forgó szektortükrő, az ún. Littrow-tükrő segítségével egyesül. A négy körcikkre osztott tükrő minden második szektora el van távolítva, így az egyesített fénysugár időben szaggatva hol az egyik, hol a másik sugarat engedi át. Az egyesített sugár a monokromátor belépő részére esik.



12.2. ábra. Optikai kiegyenlítés elvén működő infravörös spektrométer elvi rajza

A monokromátorból kijövő fényt a detektor elektromos jellé alakítja. Amennyiben adott hullámhosszon a minta elnyel, a két fénysugár intenzitása között különbség lép fel, így a detektor váltakozó feszültségű jelet ad. (A detektor hőtehetetlensége miatt ez egy integrált négyszögjel.) Ezt a jelet erősítve és fázisát analizálva hibajelet állíthatunk elő, mellyel az intenzitások kiegyenlítését vezérelhetjük. Erre a célra szokás ún. fésűsblendét használni, amely egy tengely körül forgatható, spirálisan áttört körlemez, melynek forgatásával az átengedett fény intenzitása változtatható. A fésűsblende forgatása írószerkezetet hajt meg, amely így a kompenzáció mértékét regisztrálja.

### 12.2.2. Fényforrás

Fényforrásként ritka földfém oxidjából (Nernst-lámpa), vagy szilíciumkarbidból (Globar), esetleg fémből (ródiom-, vagy platinatekeres) készült ellenállást használnak, melyeknek 1100–1600 K az üzemi hőmérséklete. A mérésnél használt berendezés 1300 K fokokos nikkkel-krómium fényforrást tartalmaz.

### 12.2.3. Monokromátor

A monokromátor optikai rács, vagy infravörös fényre átlátszó anyagból készült prizma. (Az átlátszóság viszonylagos, mert a prizma anyaga is rendelkezik valahol elnyelési spektrummal.) A korszerűbb spektrométerekben rácsot és több prizmat használnak, melyeket a hullámhossz-tartománytól függően lehet automatikusan váltani. Több prizma-anyag nagy vízdoldhatósága miatt a spektrométer jól zárt dobozba van beépítve, és a belső zárt térben gondoskodnak a levegő szárazon (és a környezethez képest melegen) tartásáról.



### 12.2.4. Detektor

Az infravörös sugárzás detektálása hőhatáson alapul. A detektor termopár, ill. ebből képzett sorozat (oszlop); hőmérsékletfüggő ellenállás (bolométer) vagy nagy érzékenyséű gázhőmérő (Golay-cella) lehet. A detektálandó termikus teljesítmény nagyon kicsi ( $\approx 10^{-9}$  W), ami a detektorral szemben magas követelményeket támaszt.

## 12.3. Kéttomos molekulák rezgési és forgási átmene- tei

IR spektroszkópiával jól tanulmányozhatóak a hidrogén-halogenidek. Ezekre a molekulákra felállítható egy elegendően egyszerű modell ahhoz, hogy az atomok távolságát, illetve a kötés erősségét jó pontossággal meghatározhassuk.

### 12.3.1. Merev pörgettyű

A kéttomos (szükségképpen lineáris) molekulák forgásához tartozó kvantummechanikai energiaszintek:

$$E_{rot}(j) = \frac{\hbar^2}{2\Theta} j(j+1). \quad (12.2)$$

A tehetetlenségi nyomatékot ( $\Theta$ ) a következőképpen tudjuk kiszámolni: jelölje a két atom tömegét  $m_1$  és  $m_2$ . Koordinátarendszerünk origójaként válasszuk a tömegközéppontot és a két atom középpontját jelölje  $\vec{r}_1$  és  $\vec{r}_2$ . Az x tengely mutasson az  $\vec{r}_2 - \vec{r}_1$  irányba. Ezen a tengelyen az atomok pozícióját elegendő egy-egy számmal jelölni ( $r_1 = |\vec{r}_1|$  és  $r_2 = |\vec{r}_2|$ ). Ekkor teljesül, hogy:

$$r_{tkp} = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2} = 0. \quad (12.3)$$

Ebben a rendszerben, a tömegközépponton átmenő, x tengelyre merőleges tengelyre a tehetetlenségi nyomaték:

$$\Theta = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2. \quad (12.4)$$

Bővítsük a fenti kifejezést  $(m_1 + m_2)/(m_1 + m_2)$ -vel:

$$\begin{aligned} m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 &= \frac{m_1 r_1^2 m_1 + m_1 r_1^2 m_2 + m_2 r_2^2 m_1 + m_2 r_2^2 m_2}{m_1 + m_2} \\ &= \frac{m_1^2 r_1^2 + m_2^2 r_2^2 + (r_1^2 + r_2^2) m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (12.5)$$

(12.3) alapján  $m_1 r_1 + m_2 r_2 = 0$ , ezért  $m_1^2 r_1^2 + m_2^2 r_2^2 = -2m_1 r_1 m_2 r_2$ , vagyis:

$$\begin{aligned} \frac{m_1^2 r_1^2 + m_2^2 r_2^2 + (r_1^2 + r_2^2) m_1 m_2}{m_1 + m_2} &= (-2r_1 r_2 + r_1^2 + r_2^2) \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \\ &= (r_1 - r_2)^2 \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (12.6)$$

Új változóként vezessük be a két atom távolságát:  $r = r_1 - r_2$ , valamint a redukált tömeget:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (12.7)$$

Ezekkel a változókkal:

$$\Theta = \mu r^2. \quad (12.8)$$

Vezessük be a

$$\tilde{B} = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (12.9)$$

forgási állandót<sup>2</sup>. Ezzel a jelöléssel az energia:

$$E_{rot}(j) = \tilde{B} j(j+1). \quad (12.10)$$

### 12.3.2. Rezgő pörgettyű

Kihaszználhatjuk, hogy a rezgés frekvenciája legalább egy nagyságrenddel nagyobb, mint a forgásé, azaz egy körülfordulás alatt a molekula sok rezgést végez<sup>3</sup>. Ezért a rotációs állandóban szereplő mag-mag távolság helyére egy átlagos mag-mag távolságot,  $\langle r^2 \rangle$ , írhatunk be. A rezgő pörgettyű energiája tehát:

$$E(n, j) = E_{rezg}(n) + \tilde{B} j(j+1), \quad (12.11)$$

ahol:

$$\tilde{B} = \frac{\hbar^2}{2\mu \langle r^2 \rangle}. \quad (12.12)$$

Ha az egyensúlyi mag-mag távolságot  $r_e$  jelöli, akkor a rezgés során:

$$r = r_e + \xi \quad (12.13)$$

ahol  $\xi$  jelöli a rezgés kitérését, és harmonikus rezgés esetén  $\langle \xi \rangle = 0$ . Ezekkel a jelölésekkel:

$$\langle r^2 \rangle = \langle r_e^2 + \xi^2 + 2r_e \xi \rangle = r_e^2 + \langle \xi^2 \rangle + 2r_e \langle \xi \rangle \quad (12.14)$$

Harmonikus rezgés esetén az utolsó tag zérus, de a molekula rezgése egy, a rezgés amplitúdójától függő korrekciót eredményez a tehetetlenségi nyomatékban.

<sup>2</sup>A spektroszkópiában szokásos forgási állandó:  $B = \frac{1}{hc} \tilde{B}$ .

<sup>3</sup>A rezgés frekvenciája,  $\omega_r$ , a besugárzás frekvenciájának nagyságrendjébe esik, ami pl. HCl esetén  $\sim 60$  THz. Az ekvipartíció tétele alapján a forgás frekvenciája  $\omega_f = \sqrt{k_B T / \Theta} \sim 1$  THz

### Harmonikusan rezgő pörgettyű, a forgás és rezgés csatolása nélkül

Ha a (12.14) korrekciótól eltekintünk,  $\langle r^2 \rangle = r_e^2$  és a forgási energia független a rezgési állapottól. Ennek megfelelően az abszorpciós spektrumban minden egyes rezgési abszorpciós vonal körül egy tiszta forgási spektrumot várunk. Az  $n, j$  rezgési és forgási kvantumszámokkal jellemzett állapot energiája:

$$E(n, j) = \hbar\Omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \tilde{B}j(j+1), \quad (12.15)$$

ahol a  $D$  „rugóállandójú” oszcillátor frekvenciája:

$$\Omega^2 = D/\mu. \quad (12.16)$$

Ha az abszorpció megváltoztatja a molekula forgási állapotát  $j$ -ről  $j'$ -re, akkor egyrészt az impulzusmomentum megmaradása miatt:

$$\Delta j = \pm 1, \quad (12.17)$$

másrészt a kvantumszámok nem lehetnek negatívak:

$$j, j' \geq 0. \quad (12.18)$$

Ezek figyelembevételével két esetet különböztethetünk meg (lásd bővebben a B.5.2. függelékben):

R-ág: Ha  $j' = j + 1$ , akkor a forgási energia megváltozása:

$$\tilde{B}[(j+1)(j+2) - j(j+1)] = 2\tilde{B}(j+1). \quad (12.19)$$

Ebben az esetben  $j \geq 0$ , tetszőleges természetes szám.

P-ág: Ha  $j' = j - 1$ , akkor a forgási energia megváltozása:

$$\tilde{B}[(j-1)j - j(j+1)] = -2\tilde{B}j. \quad (12.20)$$

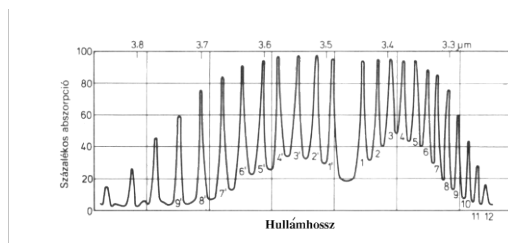
Mivel  $j' \geq 0$ , ebben az esetben  $j \geq 1$ .

A forgási abszorpciós vonalak tehát  $2\tilde{B}$  távolságra követik egymást. A sorozatban egy vonal hiányzik (nullrés), annál az energiánál ami a forgási állapotot változatlanul hagyná ( $j' = j$ ).

## Harmonikusan rezgő pörgettyű, a forgás és rezgés csatolásával

A kísérletileg mért spektrumok vonalai nem egyenlő távolságra követik egymást (12.3. ábra), azaz a fenti modellt finomítani kell. A forgási és rezgési állapotok több módon csatlódhatnak: nagyobb rezgési energia (amplitúdó) megnöveli a molekula tehetetlenségi nyomatékát, de a gyors forgáshoz tartozó centrifugális erő is módosíthatja a rezgés harmonikus potenciálját. Ezen kívül, a molekularezgések nem harmonikusak, ami szintén eltolja az egyensúlyi magtávolságot az  $n$  kvantumszám függvényében. Itt csak az első esettel foglalkozunk, azaz figyelembe vesszük, hogy a (12.15) kifejezésben  $\tilde{B}$  nem állandó, hanem a (12.12) kifejezés szerint függ a rezgés amplitúdójától, azaz az  $n$  kvantumszámtól:

$$E(n, j) = h\Omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \tilde{B}_n j(j+1). \quad (12.21)$$



12.3. ábra. A HCl forgási spektruma az  $n : 0 \rightarrow 1$  rezgési átmenet körül

Harmonikus rezgés elektromágneses térrel történő kölcsönhatása során az  $n$  kvantumszám megváltozása  $\pm 1$ . Feltételezve, hogy szobahőmérsékleten (25 meV) a molekula alapállapotban van, az  $n \rightarrow n' = 0 \rightarrow 1$  átmenetet vizsgáljuk. Ha a forgási állapot megváltozása  $j \rightarrow j'$ , akkor az energia megváltozása (12.21) kifejezés alapján  $E(1, j') - E(0, j)$ .

R-ág ( $j \geq 0$ ): Ha  $j' = j + 1$ , akkor a forgási energia megváltozása:

$$\tilde{B}_1(j^2 + 3j + 2) - \tilde{B}_0(j^2 + j) = (\tilde{B}_1 - \tilde{B}_0)(j + 1)^2 + (\tilde{B}_1 + \tilde{B}_0)(j + 1) \quad (12.22)$$

P-ág ( $j \geq 1$ ): Ha  $j' = j - 1$ , akkor a forgási energia megváltozása:

$$\tilde{B}_1(j^2 - j) - \tilde{B}_0(j^2 + j) = (\tilde{B}_1 - \tilde{B}_0)j^2 - (\tilde{B}_1 + \tilde{B}_0)j \quad (12.23)$$

A két formula közös alakra hozható ha a P-ágban az  $x = -j$ , az R-ágban pedig az  $x = j + 1$  helyettesítést elvégezzük (vagyis  $x$  az abszorpció csúcsok sorszáma):

$$\Delta E = \hbar\Omega + (\tilde{B}_1 + \tilde{B}_0)x - (\tilde{B}_0 - \tilde{B}_1)x^2. \quad (12.24)$$

A csatoltan forgó-rezgő pörgettyű modellben a forgási szintek energiáit tehát egy másodfokú kifejezés (Fortrat parabola) adja meg.

## 12.4. Gyakorló kérdések

1. Az anyag mely szabadsági fokai változnak infravörös elnyelés során?
2. Mottól meddig tart az infravörös hullámhossz-tartomány? Energetikailag hogyan viszonyul a látható fényhez az infravörös?
3. Mi az optikai kiegyenlítés elve?
4. Mi a funkciója és hogyan működik a monokromátor? Milyen két alaptípusa létezik a fény spektrális felbontásának? Infravörös spektroszkópiában mire kell külön tekintettel lenni az optikai elemek megválasztásánál?
5. Min alapul az infravörös fény detektálása?
6. Mi a spektroszkópiában gyakran használt hullámszám és term-energia definíciója?
7. Írja föl egy harmonikus oszcillátor kvantált energiaszintjeit! Mikor alkalmazható ez a képlet molekulák leírására?
8. Írja föl egy kétatomos molekula kvantált forgási energiáját! Definiálja a forgási állandót!
9. Milyen összefüggés teljesül a fény frekvenciájára abszorpció esetén? Mi az infravörös elnyelés feltétele?
10. Milyen részekre oszthatjuk egy kétatomos molekula infravörös elnyelési színeképét? Mi jellemzi ezeket a részeket?
11. Hogyan függ a mérés ideje a mérési tartománytól, a spektrális felbontás részletességétől és a spectrum jel-zaj arányától?
12. Mi történik egy- vagy többparaméteres görbeillesztés során? Mik a bemenő adatok, mi az eredmény, és mi határozza meg?
13. Ha A és B mennyiség hibái  $dA$  és  $dB$ , becsüljük meg a hibáját az  $A/\sqrt{A+B}$  kifejezésnek!

## 12.5. Mérési feladatok

A következőkben használjuk a spektroszkópiában elterjedt hullámszám jelölést:

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{\omega}{2\pi c} \quad (12.25)$$

ahol  $c$  a fénysebesség,  $\omega$  a körfrekvencia és  $\nu$  a frekvencia. A hullámszám szokásos mértékegysége:  $cm^{-1}$ , avagy *hullámszám*. Ekkor kényelmesebb az energiát *term*-energiába átírni:

$$T = \frac{1}{hc}E. \quad (12.26)$$

A forgási állandó szokásos definíciója:

$$B = \frac{1}{hc}\tilde{B} = \frac{\hbar}{4\pi c\Theta} = \frac{h}{8\pi^2 c\Theta}. \quad (12.27)$$

### 12.5.1. A mérőberendezés beállításai

A mérőberendezésen beállítható paraméterek a mérendő hullámszám-tartomány ( $\nu$ -*start*,  $\nu$ -*stop*,  $cm^{-1}$  egységekben), a monokromátor rés szélessége (*slit*, relatív egységekben), az egyes monokromátor-állásoknál eltöltött iterációs idő (*IT*). Ezen felül átállíthatjuk a ki-iratásnál a 100%-hoz tartozó transzmissziót a *zeroadj* paraméterrel, és megadhatunk egy hullámszám-irányú (*expX*) és abszorpció-irányú nyújtást (*expY*) is. Hosszabb spektrumokat két léptékben nyomtatunk: 4000 és 2000 hullámszám között a spektrumot tömöríthetjük a *FORM* kapcsoló aktiválásával. Ekkor ebben a tartományban a hullámszám léptéke kétszer sűrűbb, mint a 2000  $cm^{-1}$  alatti tartományban. Az egyes méréseknél a javasolt paraméter-beállítások fel vannak tüntetve.

### 12.5.2. Kalibráció

A berendezés a mérések során a monokromátor rés-szélességét a hullámszám függvényében változtatja annak érdekében, hogy minden egyes mérési ponton az azonos mérési idő alatt azonos energiájú sugárzás essen a detektorra (természetesen üres mintatartó mellett). Ehhez üres minta- és referenciatartókkal 66 hullámszámon megméri az átáramló energiát, adott rés-szélesség mellett. A továbbiakban a kapott energia-értékeknek megfelelően szabályozza a rés szélességét. Természetesen van lehetőség a rés szélességének relatív állítására, valamint beállíthatunk fix rés-szélességet is (a  $\tilde{\nu}$  billentyű aktiválásával).

A kalibrációt a 0.01-es program futtatásával végezhetjük el: billentyűzzük be alapállapotban a szám-billentyűzetten a program számát (0.01), majd nyomjuk meg a *start* / *stop* gombot. A berendezés a kalibrációt innen automatikusan elvégzi.

### 12.5.3. Alapvonal vizsgálata

Készítsünk felvételt azonos mérő és referencianyalábokkal! A méréseket nem vákumban végezzük, ezért a referencia és a mérőnyaláb útjában is elvileg azonos mennyiségű levegő található, így nem kapnánk jelet. Ennek ellenére a mérés során látunk abszorpciót,

aminek egy lehetséges magyarázata, hogy a mérő és referencia úthosszak nem azonos hosszúak. Mi okozhatja az abszorpciót?

Mérési tartomány és javasolt beállítások:  $\tilde{\nu} : 4000 - 400 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ , slit: 12, IT: 0, 5, zeroadj: 105, expY: 100, expX: 1, FORM ON

#### 12.5.4. Polisztírol fólia IR spektruma

A polisztírol teljes közép-infra spektrumában több csúcs-komplexet is találhatunk. Az irodalomban ezen csúcsok elnyelési hullámszámai ismertek.

Javasolt tartományok és paraméter-beállítások:

$\tilde{\nu} : 4000 - 400 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ , slit: 12, IT: 0, 5, zeroadj: 105, expY:100, expX: 1, FORM ON

#### 12.5.5. A $C_{60}$ fullerén molekula infravörös spektruma

Fullerénből nem lehetséges fóliát gyártani, így egy műanyag pogácsába van keverve. A mérőhelyen egy üres pogácsa is található, amit referenciaként használhatunk.

Javasolt beállítások:

$\tilde{\nu} : 1500 - 500 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ , slit: 12, IT: 3, zeroadj: 105, expY: 100, expX: 5, FORM OFF

#### 12.5.6. A HCl molekula IR spektrumának elemzése

- Javasolt beállítások:

$\tilde{\nu} : 3100 - 2650 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ , slit: 1, 6, IT: 3,  $\Delta\nu : 0.8 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ , zeroadj: 80, expY: 200, expX: 20, FORM OFF

- A spektrumon az  $n : 0 \rightarrow 1$ ,  $J : j' \rightarrow j''$  átmenetekhez tartozó abszorpciókat látjuk. A molekulát rezgő pörgettyűként írhatjuk le. Azonosítsuk a nullrészt és az egyes átmeneteket! Miért hasadnak fel a csúcsok?
- A Fortrat-parabola paramétereinek illesztésével határozzuk meg a nullréshez tartozó energiát (eV vagy kT egységekben), valamint a molekula forgási energiájára jellemző  $B_0$  és  $B_1$  paramétereket!
- A nullrés energiájának ismeretében becsüljük meg a molekula „rugóállandóját”!
- Tételezzük fel, hogy az  $n$ -ik rezgési állapotban  $\langle \xi^2 \rangle \approx a(n + 1/2)$ , ahol  $a$  egy arányossági tényező. A  $B_0$  és  $B_1$  paraméterekből becsüljük meg az egyensúlyi magtávolságot és a korrekciót jellemző  $a$  paramétert! Kompatibilis ez az érték a rugóállandóra kapott értékkel?

## 13. fejezet

# Molekulamodellezés (Koltai János és Zólyomi Viktor)

### 13.1. Bevezetés

Fizikai rendszerek kvantummechanikai leírása során az első lépés mindig a Schrödinger-egyenlet megoldása. Ezen egyenlet azonban nagyon kevés rendszerre oldható meg egzaktul (harmonikus oszcillátor, hidrogénatom, hidrogén-molekulaion, ...). Már a két elektront tartalmazó héliumatom alapállapota is csak egy rekurzív formula segítségével állítható elő, amely az összes Laguerre-polinomot tartalmazza [1]. Többelektronos atomok vagy molekulák esetében mindig közelítésekre szorulunk. A mérés során a hallgató a variációs elvre épülő módszerekkel, egy kvantumkémiai program segítségével fog különböző egyszerű molekulákra számítási feladatokat elvégezni. A mérés célja alapvetően az, hogy betekintést nyújtson a számítógépes molekulafizika módszereibe és gyakorlatába. A módszerek háttérében álló fizikai alapelvek teljes megértéséhez elengedhetetlenül szükséges a kvantummechanika ismerete, ezért az alábbiakban – a levezetések mellőzésével – rövid kvalitatív összefoglalót adunk a mérési feladatok szempontjából legfontosabb alapelvekről, melyek már a Schrödinger-egyenlet és a variációs elv ismeretében nagyjából megérthetőek.

### 13.2. Sokelektronos rendszerek leírása

#### 13.2.1. A Schrödinger-egyenlet sokelektronos rendszerekre

Egy  $N_n$  atommagból és  $N_e$  elektrontól álló molekula stacionárius Schrödinger-egyenlete (relativisztikus korrekciók elhanyagolásával) az alábbi alakban írható fel:

$$H\Psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{N_n}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}) = E\Psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{N_n}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}), \quad (13.1)$$



ahol  $\vec{R}_\alpha$ -val jelöltük a magok, és  $\vec{r}_i$ -vel az elektronok koordinátáit. A Hamilton-operátor a következő alakban írható:

$$H = T + U_{e-e} + U_{e-n} + U_{n-n}, \quad (13.2)$$

ahol  $T, U_{e-e}, U_{e-n}$  és  $U_{n-n}$  rendre a teljes kinetikus energia (elektronoké és magoké), a teljes potenciális energiának az elektron-elektron taszításból eredő járuléka, a teljes potenciális energiának az elektron-atommag vonzásából eredő járuléka, és a teljes potenciális energiának az atommag-atommag taszításból eredő járuléka:

$$T = T_{elektron}^{total} + T_{mag}^{total} = \sum_{i=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + \sum_{\alpha=1}^{N_n} -\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_\alpha \quad (13.3a)$$

$$U_{e-e} = \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (13.3b)$$

$$U_{e-n} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_n} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_\alpha}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \quad (13.3c)$$

$$U_{n-n} = \sum_{\alpha<\beta} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|}. \quad (13.3d)$$

A fenti formulákban  $m_e$  az elektron tömege,  $M_\alpha$  az  $\alpha$ -adik atommag tömege,  $\Delta_i$  az  $i$ -edik elektron koordinátáiban ható,  $\Delta_\alpha$  az  $\alpha$ -adik atommag koordinátáiban ható Laplace-operátor,  $e$  az elemi töltés,  $Z_\alpha$  pedig az  $\alpha$ -adik atommag rendszáma. A továbbiakban a (13.1) egyenlet közelítő megoldásáról lesz szó.

### 13.2.2. A Born–Oppenheimer-közelítés

A (13.3a) egyenlettel adott teljes kinetikus energia az elektronok és magok kinetikus energiájának összege. Mivel az atommagok tömege már a legkönnyebb magtömegű hidrogén esetén is több mint 1000-szer nagyobb az elektronokénál, a kinetikus energiába az elektronok adják a döntő járulékot. Úgy is mondhatjuk, a magok sokkal lassabban mozognak az elektronoknál. Ezért az elektronok szinte pillanatszerűen át tudnak rendeződni, amint a magok elmozdulnak. Így jó közelítéssel az elektronok a magok pillanatnyi helyzetének megfelelő potenciáltérben mozognak, a magok pedig a hozzájuk képest nagyságrendekkel gyorsabban mozgó elektronok kiátlagolt potenciáltérét érzékelik. A molekula teljes hullámfüggvénye közelítőleg az atommagokat leíró hullámfüggvény és az elektronokat leíró hullámfüggvény szorzataként írható:

$$\Psi = \Psi_e(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{N_n}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}) \Psi_n(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{N_n}), \quad (13.4)$$

ahol az elektronokat leíró  $\Psi_e$  paraméterekként tartalmazza az aktuális magkonfigurációnak megfelelő magkoordinátákat is. Triviális átalakítással látszik, hogy vezető rendben a (13.1) Schrödinger-egyenlet az alábbi két egyenletre esik szét:

$$(T_{elektron}^{total} + U_{e-e} + U_{e-n} + U_{n-n})\Psi_e = E_e(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{N_n})\Psi_e \quad (13.5a)$$

$$(T_{mag}^{total} + E_e(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_{N_n}))\Psi_n = E\Psi_n, \quad (13.5b)$$

ahol  $E_e$  az elektronok teljes energiája, míg  $E$  az egész molekula teljes energiája. Az egzakt hullámfüggvény ilyen módon való közelítését nevezzük Born–Oppenheimer-közelítésnek. Egy fontos megjegyzést kell tennünk az elnevezésekkel kapcsolatban. A Born–Oppenheimer-közelítés azon alapszik, hogy az elektronok pillanatszerűen alkalmazkodnak a magok pillanatnyi konfigurációjához, azaz „adiabatikusan” követik a magok mozgását. Ezért szokás – tévesen – a Born–Oppenheimer-közelítést adiabatikus közelítésnek is nevezni. Szigorúan véve adiabatikus közelítésnek mást nevezünk. A (13.5) egyenletek levezetésekor elhanyagoltunk olyan tagokat, melyek az elektronok hullámfüggvényének a magkoordináták szerinti deriváltjait tartalmazták; a Born–Oppenheimer-közelítés ezeket teljesen elhanyagolja, de részlegesen (átlagosan) mégis figyelembe vehetők. Ugyanis ezen tagokat az elektronok koordinátái szerint kiátlagolhatjuk a (13.5a) egyenlet megoldása után, és hozzávehetjük a (13.5b) egyenlethez [2]. Ezt nevezzük helyesen adiabatikus közelítésnek.

### 13.2.3. A variációs elv és gyakorlati alkalmazása

Ha a Schrödinger-egyenlet túl bonyolult ahhoz, hogy egzaktul megoldjuk, két elterjedt módszert alkalmazhatunk a közelítő megoldására. Az egyik a perturbációszámítás (lásd pl. [2]), a másik a variációs elv. Tegyük fel, hogy a (13.1) egyenlet egzakt megoldása a  $\{\Psi_i\}$  teljes ortonormált függvényrendszer, és az alapállapotú megoldása  $\Psi_0$ . Ekkor, ha veszünk egy tetszőleges  $\Phi$  hullámfüggvényt, az kifejezhető a  $\{\Psi_i\}$  függvények szerint az alábbi módon:

$$\Phi = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \Psi_i, \quad (13.6)$$

ahol a  $c_i$  együtthatókra a normálási feltétel miatt teljesül, hogy

$$\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2 = 1. \quad (13.7)$$

Ha a rendszer a  $\Phi$  állapotban van, energiáját az alábbi várható érték adja meg:

$$E_{\Phi} = \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} c_i^* c_j \langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle. \quad (13.8)$$

Mivel  $\Psi_j$  sajátfüggvénye  $H$ -nak  $E_j$  sajátértékkel,  $\langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle = E_j \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = E_j \delta_{ij}$ , ezért

$$E_\Phi = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} c_i^* c_j E_j \delta_{ij} = \sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2 E_i. \quad (13.9)$$

Mivel  $E_0 \leq E_i$ , ezért nyilvánvalóan

$$E_\Phi = \sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2 E_i \geq \sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2 E_0 = E_0 \sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2. \quad (13.10)$$

Végül a (13.7) normafeltétel miatt  $E_\Phi \geq E_0$ . Más szóval, tetszőleges  $\Phi$  próbafüggvénnyel képezve a Hamilton-operátor várható értékét, a kapott  $E_\Phi$  nagyobb egyenlő az egzakt alapállapot energiánál, ahol az egyenlőség kizárólag akkor teljesül, ha  $\Phi$  maga az egzakt alapállapot hullámfüggvény.

A gyakorlatban a variációs elvet a következőképpen alkalmazzuk: veszünk egy alkalmasan választott paraméteres  $\Phi(a_i)$  hullámfüggvényosztályt, és képezzük az  $E_\Phi$  várható értéket. Majd  $E_\Phi$ -t minimalizáljuk az  $a_i$  paraméterek szerint. Ekkor megkapjuk az alapállapot hullámfüggvénynek a  $\Phi(a_i)$  típusú paraméteres függvényosztállyal való lehetséges legjobb közelítését. Ha  $\Phi(a_i)$ -t megfelelően választottuk, akkor az így kapott hullámfüggvény megfelelően jó közelítése az alapállapotnak.

A variációs elv kiterjeszhető gerjesztett állapotokra is, feltéve hogy ismert az alapállapot hullámfüggvény, vagy annak elegendően jó – például variációs – közelítése. Belátható, hogy ha a variációs elvet a fent vázolt séma szerint alkalmazzuk egy olyan  $\Phi'(a_i)$  függvényosztállyal, mely ortogonális az alapállapotra, akkor megkapjuk az első gerjesztett állapotnak a  $\Phi'(a_i)$  típusú paraméteres függvényosztállyal való lehetséges legjobb közelítését. Ez az eljárás magasabb gerjesztett állapotok vizsgálatára is folytatható.

### 13.2.4. Geometria optimalizálás, Hellmann–Feynman-tétel

Egy molekula alapállapotának meghatározásakor fontos kérdés a legkedvezőbb magkonfiguráció, azaz az optimális geometria meghatározása. Ha adott magkonfiguráció mellett meghatározzuk az elektronikus hullámfüggvényt, a magokra ható erőket kiszámolhatjuk. Ha ezek az erők elég kicsik, a magkonfiguráció stabil, ám ha nem, akkor módosítani kell rajta addig, amíg az erők eléggé le nem csökkennek. Ez alapjában véve nem más, mint szélsőérték-keresés egy bonyolult, sokdimenziós hiperfelületen. Ugyanis a potenciális energia, mint az összes mag koordinátájának függvénye, egy hiperfelületet alkot az  $N_n$  darab atommag-koordináta  $3N_n$  dimenziós terében:

$$V(\underline{x}) = V(\underline{R}_1, \underline{R}_2, \dots, \underline{R}_{N_n}) \quad (13.11)$$

Itt  $\underline{x}$  egy  $3N_n$  dimenziós vektor, amely a  $N_n$  darab mag koordinátáit tartalmazza. A minimum hely meghatározására több módszer is használatos, itt az elvi szempontból

legegyszerűbb kvázi-Newton módszert tárgyaljuk. A potenciális energiát a szélsőérték közelében lévő  $\underline{x}_0$  pont körül a kvadratikus tagig sorba fejthetjük:

$$V(\underline{x}_0 + \underline{\Delta x}) = V(\underline{x}_0) - \underline{f}(\underline{x}_0) \cdot \underline{\Delta x} + \frac{1}{2} \underline{\Delta x} \cdot \underline{K}(\underline{x}_0) \cdot \underline{\Delta x}, \quad (13.12)$$

ahol

$$f_i = - \frac{\partial V(\underline{x})}{\partial x_i} \quad (13.13a)$$

$$K_{ij} = \frac{\partial^2 V(\underline{x})}{\partial x_i \partial x_j} \quad (13.13b)$$

azaz  $\underline{f}$  a potenciális energia negatív gradiense (így a magokra ható erőket tartalmazó vektor),  $\underline{K}$  pedig a második derivált mátrix, amit Hess-mátrixnak neveznek. Ha tehát  $\underline{x}_0$ -ban ismertek az erők,  $(\underline{x}_0 + \underline{\Delta x})$ -ben a fenti közelítés szerint  $\underline{f}' = \underline{f}(\underline{x}_0) - \underline{K}(\underline{x}_0) \cdot \underline{\Delta x}$  lesz az erő nagysága. Mivel a keresett minimumban az erők eltűnnek, ezért  $\underline{f}' = 0$  megkövetelésével  $\underline{\Delta x} = \underline{K}^{-1}(\underline{x}_0) \cdot \underline{f}(\underline{x}_0)$  adódik arra, hogy mennyivel kell módosítani a kiinduló geometriát. Az új geometriában meghatározzuk a hullámfüggvényt, ismét kiszámoljuk az erőket, és ha még mindig túl nagyok, addig folytatjuk az imént vázolt eljárást, ameddig szükséges. Tipikusan elég jónak számít, ha az erők abszolútértéke  $0,01 \text{ eV}^2$  alá esik.

A Hess-mátrixot az első lépésben mindig egyszerű közelítésekkel írják le, majd minden egyes geometriai lépés során frissítik az erők alapján. Az erők meghatározására szinte minden esetben a Hellmann–Feynman-tételt használják, ami a következő egyszerű állítást mondja ki. Ha  $\alpha$  a rendszer valamely paramétere, az alapállapot energiája  $\alpha$  szerinti deriváltját megkapjuk, ha képezzük a Hamilton operátor  $\alpha$  szerinti deriváltjának a várható értékét az alapállapot hullámfüggvénye szerint:

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = \left\langle \Psi_0 \left| \frac{\partial H}{\partial \alpha} \right| \Psi_0 \right\rangle \quad (13.14)$$

Ennek az egyszerű állításnak nagyszerű következménye, hogy nem kell az  $\alpha$  paraméter változtatásával a költséges sajátérték problémát újra meg újra megoldani, hanem elegendő az egyszer meghatározott alapállapottal a Hamilton-operátor megfelelő derivált operátorainak várható értékét kiszámolni. Ha  $\alpha$  valamelyik magkoordináta, akkor a (13.14) kifejezés éppen az adott magra ható erő mínusz egyszeresét adja meg [2].

### 13.2.5. Pauli-elv, szinglett és tripllett spinállapotok

A kvantummechanikában a részecskék rendelkeznek egy olyan fizikai tulajdonsággal, mely a klasszikus fizikában még nem volt ismeretes. Ez a spin [3]. Elnevezése onnan ered, hogy impulzusmomentum jellegű mennyiség, de a részecske saját jellemzője,

független attól, milyen pályán mozog és mekkora pályá-impulzusmomentuma van; azaz a spin egyfajta *saját-impulzusmomentum*. A spin részletes ismertetésébe itt nem megyünk bele, ez a kvantummechanika előadás feladata.

A mérés szempontjából fontos tudni azonban a következőket. Megkülönböztetünk feles spinű részecskéket (fermionokat, ilyen az elektron is) és egész spinűeket (bozonokat, pl.  ${}^4\text{He}$  atom) aszerint, hogy  $\hbar$ -nak fél-egész, vagy egész számú többszöröse a spin. A Pauli-elv kimondja, hogy azonos típusú fermionok (így például elektronok) rendszerének hullámfüggvénye az összes fermion koordinátájára teljesen antiszimmetrikus kell legyen. Azaz, bármely két elektron (hely- és spin-) koordinátáinak cseréjére előjelet kell váltson. (Bozonok esetén pedig teljesen szimmetrikus kell legyen a hullámfüggvény.)

A  $N$  darab fermionból álló rendszerek hullámfüggvényét általában egy  $N \times N$  ún. Slater-determinánsal lehet felírni (lásd bővebben a 13.2.6 fejezetben!). A determináns alak biztosítja a hullámfüggvény antiszimmetrikusságát. Kétrészecskés esetben lehetőségünk van arra, hogy a hullámfüggvényt egy tisztán helyfüggő és egy tisztán spinfüggő rész szorzataként írjuk fel. Ilyen esetben a helyfüggő és a spinfüggő tényező közül az egyiknek teljesen szimmetrikusnak, a másiknak teljesen antiszimmetrikusnak kell lennie ahhoz, hogy a teljes hullámfüggvény antiszimmetrikus legyen.

Vegyük példának a  $H_2$  molekulát! Két elektron rendszerének összspinje nem lesz feltétlenül a két elektron spinjének összege. Egy  $s_1$  és egy  $s_2$  spinű részecskéből álló rendszer  $S$  összspinje tetszőleges értéket felvehet  $|s_1 - s_2|$  és  $(s_1 + s_2)$  között,  $\hbar$  egységekben lépkedve. Az elektron spinje  $\hbar$  egységekben mérve  $\frac{1}{2}$ , ezért két elektron összspinje  $\hbar$  egységekben mérve  $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}| = 0$  és  $(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}) = 1$  között vehet fel értékeket, egyesével lépkedve. Azaz két elektron teljes spinje 0 vagy 1 lehet. Ezen 0 összspinű állapot spinben antiszimmetrikus, míg az 1 összspinű spinben szimmetrikus, így az előbbihez szimmetrikus helyfüggő, míg az utóbbihoz antiszimmetrikus helyfüggő hullámfüggvénynek kell társulnia.

Végül szót kell még ejtenünk a spin multiplicitásáról. Egy  $s$  spinű részecske hullámfüggvénye a spin szerint  $(2s + 1)$ -szeresen degenerált (ha nincs jelen mágneses tér). A degeneráció fokát multiplicitásnak nevezzük, és eszerint beszélünk multiplettekéről. Az iménti példára visszatérve, a 0 összspinű elektronállapot multiplicitása 1, ezt nevezzük *singlett* állapotnak, míg az 1 összspinű állapot multiplicitása 3, ezt nevezzük *triplett* állapotnak. Egyéb multiplicitásokra hasonló elnevezést alkalmazunk ( $S = \frac{1}{2}$  esetén dublett,  $S = \frac{3}{2}$  esetén kvartett, és így tovább).

### 13.2.6. Független részecske módszer, Hartree–Fock-közelítés

Sokelektronos rendszerek leírására az egyik legegyszerűbb közelítés az úgynevezett Hartree–Fock-közelítés. Ez a módszer alapvetően egy „független részecske módszer”, mert abból a feltevésből indul ki, hogy a sokelektronos hullámfüggvény egyelektron hullámfüggvények szorzataként áll elő:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{N_e}) = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) \cdot \dots \cdot \varphi_{N_e}(x_{N_e}), \quad (13.15)$$

ahol az  $x_i$  jelölés a hely és spin koordinátákat foglalja egybe:  $x_i = (\underline{r}_i, s_i)$ . Ezt nevezzük Hartree-szorzatnak. A Hartree–Fock-közelítés ennél több. A (13.15) képlet ugyanis nem veszi figyelembe a Pauli-elvet, hiszen két elektron (hely- és spin-) koordinátáinak cseréjére a hullámfüggvény előjelet kell váltson, és ezt a Hartree-szorzat nem teljesíti. Viszont a belőle képzett úgynevezett Slater-determináns már igen:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{N_e}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \dots & \varphi_{N_e}(x_1) \\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \dots & \varphi_{N_e}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(x_{N_e}) & \varphi_2(x_{N_e}) & \dots & \varphi_{N_e}(x_{N_e}) \end{vmatrix} \quad (13.16)$$

Ha ezzel a Slater-determináns hullámfüggvénnyel mint próbafüggvénnyel képezzük a Hamilton-operátor várható értékét, és a variációs elv segítségével meghatározzuk azokat a  $\varphi_i$  egyelektron-pályákat (ún. *spin-pályákat*, lásd [2]), ahol ez a várható érték minimális, megkapjuk az alapállapotú hullámfüggvény Slater-determinánssal való legjobb közelítését. Ez a Hartree–Fock-közelítés. A  $\varphi_i$  pályák meghatározására önkonzisztensen megoldandó nemlineáris egyenletrendszer vezethető le, legegyszerűbben a Brillouin-tétel segítségével [2]. Ezeket az egyenleteket tipikusan úgy oldjuk meg, hogy valamilyen véges függvénybázis szerint kifejtjük a  $\varphi_i$ -ket, és a kifejtési együtthatókat önkonzisztensen meghatározzuk.

### 13.2.7. Szemiempirikus módszerek és molekulamechanika

A Hartree–Fock-közelítésre átlagtér-elméletként is szokás hivatkozni, mert az elektronok közti Coulomb-taszítást csak átlagosan veszi figyelembe. Mindazt amit elhanyagol, elektron-korrelációnak nevezzük. Ez az elhanyagolás nagyon sok esetben elegendően jó leírást ad a vizsgált rendszerről, ám számos jelenség van, amely kizárólag az elektronkorrelációk figyelembevételével magyarázható; a következő alfejezetben röviden szót ejtünk egy módszerről, mely alkalmas erre. Azonban nagyméretű rendszerek leírására sokszor nem alkalmas már a Hartree–Fock-közelítés sem, egyszerűen a nagy számítási igények miatt. Ilyenkor egyszerűsítéseket kell tennünk. Ez természetesen a pontosság rovására megy, de fizikailag jó, kvalitatív leírást kaphatunk, ha megfelelő közelítéseket alkalmazunk.

Az úgynevezett „szemiempirikus módszerek” teljesen kvantummechanikai módszerek, míg a molekulamechanika egy félig klasszikus közelítés. A szemiempirikus módszerek a kísérletekből származó paraméterek felhasználásával, és/vagy az eredeti Hamilton-operátor helyett egyszerűsített modell Hamilton-operátorral dolgoznak. Ez utóbbi lényegében azt jelenti, hogy bizonyos kölcsönhatásokat elhanyagolunk, de a legfontosabbakat teljes mértékben figyelembe vesszük. A molekulamechanikában a molekulát úgy kezeljük, mintha

az atomok rugókkal összekötött klasszikus objektumok lennének, az erőállandókat pedig egyszerű molekulákra nagy pontosságú számításokból és mérésből ismert adatokhoz illesztjük. Mint az érezhető, a szemiempirikus módszerek lényegesen pontosabbak a molekulamechanikai számolásoknál, de az utóbbi módszernek óriási előnye, hogy viszonylag kevés számítás igénye miatt akár ezernél is több atomból álló rendszerekre is alkalmazható.

### 13.2.8. Sűrűségfunkcionál elmélet, Hohenberg–Kohn-tételek

Említettük, hogy a Hartree–Fock-módszer által elhanyagolt elektronkorreláció számos esetben fontos szerephez jut. Egy lehetséges módszer a korrelációk figyelembevételére a sűrűségfunkcionál elmélet (density functional theory, DFT), mely a következő rettenetes egyszerű állításon alapszik: az alapállapotú energia egyértelmű funkcionálja az alapállapotú elektronsűrűségnek. Ez az első Hohenberg–Kohn-tétel. Ennél még több állítható, nevezetesen az, hogy variációs elv igaz erre a funkcionálra. Ez a második Hohenberg–Kohn-tétel. Összegezve tehát, adott Hamilton-operátorral leírható rendszer esetén az alapállapotú energia előáll az elektronsűrűség egyértelmű funkcionáljaként, és ezen funkcionálnak minimuma van az alapállapotú elektronsűrűségnél.

Ez rendkívül leegyszerűsíti a problémát, hiszen egy  $N_e$ -elektronos rendszer hullámfüggvénye  $3N_e$  változós, míg az elektronsűrűség

$$\rho(\underline{r}) = N_e \int \Psi^*(\underline{r}, \underline{r}_2, \underline{r}_3, \dots, \underline{r}_{N_e}) \Psi(\underline{r}, \underline{r}_2, \underline{r}_3, \dots, \underline{r}_{N_e}) d\underline{r}_2 d\underline{r}_3 \dots d\underline{r}_{N_e} \quad (13.17)$$

csupán 3 változós, ezáltal a szabadsági fokok száma iszonyatosan lecsökkent. Azonban a Hohenberg–Kohn-tétel csupán a funkcionál egzisztenciáját mondja ki, nem mondja meg, hogyan kell megkonstruálni. A mai napig nem ismert ennek a funkcionálnak a pontos kifejezése. Azonban a DFT módszer ennek ellenére alkalmazható a gyakorlatban, mert nagyon jó közelítő funkcionálokat lehet felírni. Mivel a Hartree–Fock-közelítéssel szemben a DFT nem átlagtér-közelítés, az elektronkorrelációs hatásokat jól le tudja írni, általánosan igaz, hogy lényegesen jobb eredményeket ad a Hartree–Fock-közelítésnél.

## 13.3. A mérés menete

A mérés során a *Spartan* nevű kvantumkémiai programot használva egyszerű, megvárható ideig futó számolásokat végzünk kis molekulákra. Az eredményeket fizikai szempontból értelmezzük. A programban a molekulákat egy grafikus felületen állíthatjuk össze, majd futtatás után a számítási eredményeket is ez a grafikus felület jeleníti meg. Mód van a normálmódusok megjelenítésére, illetve különböző felületek, kontúrok kirajzolására is. Ezeket a program képként tudja számunkra exportálni. A mérés során többnyire Hartree–Fock-közelítésben dolgozunk, amikor más közelítés használandó, akkor azt a helyszínen megkapott feladatsoron mindig tüntetjük!

### 13.3.1. A bázisválasztás kérdése

Mint említettük, az egyelektron-pályákat egy véges bázis szerint fejtjük ki és a kifejtési együtthatókat önkonzisztensen határozzuk meg. Pontosabban, a program fogja mindezt megtenni, mi csupán azt mondjuk meg neki, milyen bázison fejtse ki a pályákat. Az LCAO-módszert alkalmazzuk, azaz az egyelektron-pályákat atompályák lineárkombinációjával közelítjük (Linear Combination of Atomic Orbitals). Az egyes atompályákat szokás hidrogénszerű pályákkal leírni, ezeket nevezzük Slater-pályáknak (Slater Type Orbital, STO). Ezek kezelése azonban a számítások szempontjából nehézkes. A Gauss-pályák legfőbb előnye abban rejlik, hogy a többcentrumú integrálok (például különböző atomokra lokalizált Gauss-pályák átfedése) egyszerűen egycentrumú integrálokká alakíthatóak és elvégezhetőek. Azonban a Gauss-pályák (Gauss Type Orbital, GTO) a magok közelében egyáltalán nem hasonlítanak a Slater-pályákhoz, a deriváltjuk zérus a mag helyén, míg a Slater-pályák divergálnak (ezt nevezzük cusp-hibának). Egy további eltérés, hogy a magtól távolodva gyorsabban csengenek le a Gauss-pályák. Ezen problémákat részben el lehet kerülni, ha egy atomi pályát Gauss-függvények lineárkombinációjaként írunk fel. A numerikus előnyöket figyelembe véve a molekulafizikában többnyire a Gauss-pályákat részesítik előnyben a Slater-pályákkal szemben. Mi is ezt fogjuk tenni, ahol lehet a program által használható legjobb,  $6 - 311 + G^{**}$  bázisban dolgozva.

### 13.3.2. Molekulák kvalitatív vizsgálata

Valójában tudnunk kell, hogy a kémiai (kovalens) kötés kialakulásának pontos mechanizmusa nem igazán ismert. A taszító és vonzó erők bonyolult és távolságfüggő egyensúlyáról van szó. Elmondható, hogy a kémiai gondolkodásban e tekintetben változás állt be, a korábbi kinetikus energia – nagyobb tér-lecsökkenés elképzeléssel szemben inkább azt tartja, hogy a kémiai kötésben a két (több) atommag vonzó potenciáletterébe került elektron(ok) potenciális energiájának csökkenése dominál. Áttérve a molekulapályákra, szokás  $\sigma, \pi$  elektronokról beszélni,  $\sigma$ -vázról, és rajta delokalizált  $\pi$ -elektronrendszerrel.

A definíció szerint egy  $\sigma$ -elektron esetében a pályaimpulzusmomentum vetülete egy kitüntetett irányra nézve 0, míg a  $\pi$ -elektron esetében  $1 \hbar$ . Szigorúan véve ez a definíció csak kétatomos molekulákra értelmezhető, azonban tágabb értelemben is szokás  $\sigma$  és  $\pi$  kötésekről beszélni. Sík molekulák esetében például úgy szokás a  $\sigma - \pi$  szétválasztást elvégezni, hogy a  $\sigma$ -váz a síkra való tükrözéskor szimmetrikus (a hullámfüggvénye nem vált előjelet), míg a  $p_z$  pályák delokalizációjaként létrejövő  $\pi$  molekulapályák hullámfüggvénye antiszimmetrikus (előjelet vált).

Általában elmondható, hogy a  $\pi$  elektronok mozgékonyak, lazán kötöttek, nagy energiájúak, reaktívak és elektron nívójuk legfelül helyezkedik el. Az egzaktabb számítások szerint ez nem mindig van így, de a planáris, konjugált, biológiai molekulák esetében ez elfogadható szóhasználat. Azonos atomokból álló kétatomos molekuláknál további megkülönböztetések lehetségesek: bevezethető a  $g$  (gerade, páros) és az  $u$  (ungerade,



páratlan) index annak jelölésére, hogy a kérdéses molekulapálya a kötés centrumára középpontosan tükrözéskor szimmetrikus vagy antiszimmetrikus. A  $\sigma_g$  pálya kötő, míg a  $\sigma_u$  lazító (csomósíkot tartalmaz), a  $\pi_u$  kötő és a  $\pi_g$  lazító. Meg kell említeni, hogy a kvantummechanika elvei szerint a magasabb kvantumszámú pályák felé haladva a hullámfüggvény csomósíkjainak száma egyre nő és emiatt a kötődési hajlam ezeken pályákon egyre kisebb.

## Sztereokémia

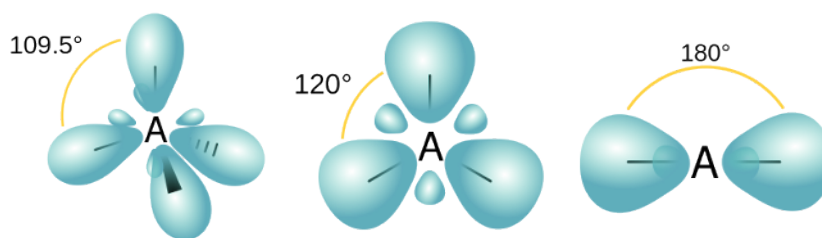
A kovalens kötésű molekulák esetén a kötések térben irányítottak. Felidézve, hogy a  $2s$  pálya gömbszimmetrikus, a valós  $2p$  pályák pedig a Descartes-koordinátatengelyek mentén irányítottak („súlyzó” alakúak), a teljes vegyértékhéjakra (a periódusos rendszer első sorainak atomjai esetén) az alábbi  $2s - 2p$  „hibrid” kombinációkat képezhetjük:

- $sp$  lineáris, többszörös kötés, pl. szénmonoxidban a  $C \equiv O$ , hármas kötés elektronállapota  $(\sigma)^2(\pi)^4$ . Ugyanis az  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{2s} + \Psi_{2p})$  hibridpálya egy  $\sigma$ -kötést, a merőleges („szabad”)  $p_x, p_y$  pályák két  $\pi$ -kötést létesítenek. A fennmaradó két elektron magányos párt alkot a *szén* oldalán.
- $sp^2$  egymással  $120^\circ$ -ot bezáró három vegyértékpálya a síkban alkotja a  $\sigma$ -vázat, pl. benzol vagy grafén. A síkra merőleges pályán egy párosítatlan, a síkra antiszimmetrikus  $p_z$  pálya. Ezek a  $p_z$  elektronok alkotják a grafénnek a jól ismert valencia és vezetési sávjait, a „zsebkendőszerű” sávokat, melyek a K-pontokban a Dirac-kúpokban találkoznak.
- $sp^3$  tetraéderes irányítottságú a négy ekvivalens vegyértékpálya, pl. metán. A négy pályát az alábbi kombinációk adják:  $\Psi_1 = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} + \Psi_{2p_x} + \Psi_{2p_y} + \Psi_{2p_z})$ ,  $\Psi_2 = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} + \Psi_{2p_x} - \Psi_{2p_y} - \Psi_{2p_z})$ ,  $\Psi_3 = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} - \Psi_{2p_x} + \Psi_{2p_y} - \Psi_{2p_z})$  és  $\Psi_4 = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} - \Psi_{2p_x} - \Psi_{2p_y} + \Psi_{2p_z})$ . Ezek a pályák egymással kb.  $109,5^\circ$ -os szöveget zárnak be.

Fontos megjegyezni, hogy a szabad állapotú atomokban nem lehetséges ilyen extra energia befektetésével létrehozott hibridpályák kialakulása. A vegyértékállapotot mindig molekulákra kell vonatkoztatnunk, nem az atomokra!

Megjegyezzük továbbá, hogy vannak ún.  $sp^x$  hibridizációjú rendszerek, ahol  $x$  tört szám is lehet. Képzeljük el, hogy begörbítünk egy eredetileg  $sp^2$ -es grafén darabot, a görbület miatt a  $\sigma$  és  $\pi$  állapotok nem lesznek ortogonálisak, fellép az ún.  $\sigma$ - $\pi$  rehibridizáció. Fullerén ( $C_{60}$ , foci labda alakú molekula) esetén például  $x \approx 2,3$  adódik.

Egy egyszerű modell keretében tárgyalhatjuk a molekulák geometriáját: figyelembe vesszük a hibridizációs viszonyokat, valamint azt az egyszerű tényt, hogy az elektronpárok mindig taszítják egymást. Ebben az egyszerű modellben már megérthető például az is, hogy a víz molekula miért nem egyenes és a szöge miért kisebb, mint  $109,5^\circ$ . Ugyanis



13.1. ábra. Az  $sp$  hibridizáció szemléltetése (forrás: [wikipédia](#)).

az oxigénen lévő magányos párok taszító hatása csökkenti le az egyébként  $sp^3$  hibridizációjú kötések közti szöveget. Általánosságban megállapítható, hogy a kötések – a taszítás miatt – igyekeznek *egymástól* a lehető legtávolabb helyezkedni el, az *atomokhoz* a lehető legközelebb maradva. Ez az oka a hibridizáció fent látott szimmetriájának is.

### Elektronsűrűség-eloszlás

Első benyomásunk szerves molekulák elektronsűrűségének eloszlásáról, hogy mindig egyformán csillognak az oxigén és a nitrogén körül a gömb alakú nagy elektronsűrűségek – ez a nagy elektronegativitásuk következménye. A szének környéke csekély sűrűségű, a hidrogéneken pedig alig marad elektron. A kötések mentén is aránylag alacsony az elektronsűrűség. Általánosságban megállapítható, hogy az elektronsűrűség az atommagok közelében koncentrálódik. Az elektronsűrűség-eloszlásból megfelelő analízissel (pl. Bader-analízis) megadható, hogy az adott atom mennyire vonzza magához az elektront, milyen az ionizáció foka.

## 13.4. Számolási feladatok

- Bizonyítsuk be a (13.14) Hellmann–Feynman-tételt!
- Írjuk fel az  $sp^2$ -es hibridizációt leíró három hullámfüggvényt a  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  pályák kombinációjaként!

## 13.5. Gyakorló kérdések

1. Írja fel a Schrödinger-egyenletet!
2. Milyen tagokból épül fel egy molekula Hamilton-operátora?
3. Milyen alakban írható fel egy sokelektron-rendszer hullámfüggvénye?

4. Mi az a Pauli-elv?
5. Hogyan néz ki egy szinglett/triplett spinhullámfüggvény?
6. Írjon fel egy 3 részecskés antiszimmetrikus hullámfüggvényt!
7. Mi az a Born–Oppenheimer-közelítés, és miért működik?
8. Mi a Hess-mátrix?
9. Mi a Hellmann–Feynman-tétel és mire használható?
10. Mi a variációs-elv?
11. Írjon fel egy Gauss-függvény alakú variációs hullámfüggvényt!
12. Mi az a Hartree–Fock-közelítés?
13. Mi a szemiempirikus módszerek legfontosabb jellemzője?
14. Mi a sűrűségfunkcionál elmélet legalapvetőbb feltételezése?
15. Mit jelent az LCAO rövidítés?
16. Mekkora a H atom alapállapotának energiája (eV)?
17. Mekkora a molekuláris rezgések jellemző energiája?

## 13.6. Mérési feladatok

A mérés során a mérésvezető az alábbi feladatokat vagy ezekhez hasonlókat ad ki a hallgatóknak. A programból az ábrák képként elmenthetőek és a jegyzőkönyvhez csatolandóak. A jegyzőkönyvnek az eredmények közlésén kívül azok fizikai szempontból történő értelmezését is tartalmaznia kell! Ha a hallgató a laboridő lejártá előtt végez az összes feladattal, a hátralévő időben kedvére játszhat a programmal . . .

1. A  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ , és  $F_2$  molekulák optimális geometriájának és alapállapotú energiájának meghatározása a szinglett és a tripllett spinállapotban egyaránt, Hartree–Fock-közelítésben,  $6 - 311 + G^{**}$  bázisban dolgozva!
2. A víz molekula optimális geometriájának és alapállapotú energiájának, rezgési módusainak, valamint a dipólmomentumának kiszámítása Hartree–Fock-közelítésben,  $6 - 311 + G^{**}$  bázisban dolgozva. Az elektronsűrűségre vetített potenciális energia kirajzolása.

3. A benzol molekula optimális geometriájának és alapállapotú energiájának, valamint a rezgési módusainak meghatározása Hartree–Fock-közelítésben,  $3-21G^*$  bázisban dolgozva! A teljesen szimmetrikus, „lélegző” jellegű rezgési módus azonosítása, valamint a mérésvezető által megadott molekulapályák kirajzolása.
4. A buckminsterfullerén-molekula felépítése, optimális geometriájának és képződéshőjének kiszámítása, szemiempirikus közelítésben, az AM1 módszerrel dolgozva.
5. A *all-transz*-hexatrién molekula optimális geometriájának és képződéshőjének meghatározása, szemiempirikus közelítésben, az AM1 módszerrel dolgozva! A mérésvezető által megadott molekulapályák kirajzolása.

## 13.7. Ajánlott irodalom

- [1] C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* **112**, p1649 (1958)
- [2] Mayer István: *Fejezetek a kvantumkémiából*, Budapesti Műszaki Egyetem, Mérnöki Továbbképző Intézet, Budapest, 1987
- [3] Kapuy Ede, Török Ferenc: *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975

## 14. fejezet

# Holográfia (Szabó Bálint)

### 14.1. Bevezetés

1947-ben Gábor Dénes az elektronmikroszkópok lencséinek kiküszöbölhetetlen leképezési hibáit elemezve felvetette a tárgyról származó információk rögzítésének egy új módszerét. A szokásos eljárás során a tárgysíkon kialakult fényamplitúdó-eloszlást leképezzük a képsíkba és itt az intenzitáseloszlást rögzítjük. A tárgyról származó információt azonban nem ez az intenzitáseloszlás hordozza tökéletesen, hanem a tárgyon létrejött, diffraktált hullámtér. Ennek rögzítése egy metszetben vagy egy síkon csak úgy lehetséges, ha az amplitúdóeloszláson kívül egyidejűleg a fáziseloszlást is rögzítjük. A hullámtér egyes pontjaiban a relatív fázis rögzítése úgy lehetséges, hogy a rögzítendő hullámtérre (tárgyhullám) egy ismert tulajdonságú hullámteret szuperponálunk (referenciahullám) és az így kialakuló interferencia-mintázatot rögzítjük. A felvétel készítése során a rögzítési sík (hologram) egyes pontjaiba beeső energiával arányos mennyiséget (például feketedést) tárolunk. Ez az eljárás lehetővé teszi az eredeti hullámtér rekonstruálását: a hologramot a referenciafényvel megvilágítva, a fény a rögzített információnak megfelelően modulálódik és ennek során a rögzítéskori, eredeti hullámteret hozza ismét létre. A rekonstruált hullámtér tartalmazni fogja az eredeti tárgyhullám csaknem minden jellegzetességét, tehát alkalmas a tárgy megjelenítésére és vizsgálatára. A holográfia során tehát igyekszünk az eredeti hullámteret rekonstruálni és ezzel a tárgyról származó információ összességét teljesen visszanyerni. Gábor Dénes ezért eljárásának a holográfia nevet adta (holos = teljes, graphein = leírni). Az optikai holográfia Gábor Dénes alapozó munkásságát követően csak a nagy fényerejű és nagy koherenciájú fényforrások, a lézerek megjelenése után éledt fel néhány éves álmából. 1962 és 1964 között, az akkoriban újdonságnak számító lézerek egyik alkalmazási területként E. N. Leith és L. Upatnieks kezdtek el ismét foglalkozni a Gábor Dénes által kidolgozott eljárás optikai hullámhossztartományban történő alkalmazásával. Tőlük származik az az ötlet is, hogy a referencianyalábot nem a tárgy irányából vetítik a fotólemezre, hanem a rekonstruálás megkönnyítése érdekében oldalirányból. A

felvételek készítéséhez szükséges, nagy felbontású regisztráló anyag (fényképészeti film) megtalálása után ők készítették a Michigan-i Egyetemen az első, valóban hologramoknak tekinthető felvételeket, melyekkel sikerült egyúttal a három dimenzióban történő rekonstrukció lehetőségét is bizonyítaniuk. A holográfiát széleskörűen alkalmazzák és az alkalmazások körében csak kisebb jelentőségű (de általánosabban ismert) a háromdimenziós képek rögzítésének technikája. Minden olyan feladatnál, melynél hullámtér fázishelyes rögzítésével a folyamatról származó információk megőrizhetőek, a holográfia jelentheti a megoldást. (Alapfeltétel a hullámforrás jó koherenciája és a rögzítési módhoz szükséges megfelelő intenzitása.) A holográfia jól alkalmazható csekély alakváltozással járó jelenségek vizsgálatára, a nagy intenzitású impulzuslézereken alapuló holografikus eljárások kiválóan megfelelnek extrém gyors jelenségek megfigyelésére. Az anyagszerkezeti kutatások hasznos eszköze a röntgenholográfia. A közismert művészeti felhasználás, az eredetigazolás, vagy mára jelentőségét veszített holografikus 3D televízió mellett érdemes ipari alkalmazásait is megemlíteni. Évtizedes remény a nagy adatsűrűségű holografikus adattárolók térnyerése a hétköznapi életben. Nagy jelentősége van továbbá a hologramok segítségével létrehozott destruktív interferenciának, mellyel valós objektumok és referenciapéldányok holografikus képe közötti apró eltérések is könnyen észlelhetők. Ezt az elvet az integrált áramkörök gyártásától a vízminőség ellenőrzéséig számos területen alkalmazzák. Speciális alkalmazásként megemlíjtjük az ultrahang-holográfiát, amelynek nagy jelentősége van fémszerkezetek mechanikai rugalmassági tulajdonágainak vizsgálatában. A továbbiakban röviden ismertetjük a hologramok készítésének elméleti alapjait és a laboratóriumban rendelkezésre álló, hologram készítésére szolgáló berendezést.

## 14.2. A holográfia alapjai és a Fresnel-lemez

Vizsgáljuk meg egy egyszerű példán, miként történik egy hologram regisztrálása! Legyen az  $ff$  pontszerű fényforrástól  $R$  távolságra a  $z$ -tengelyre merőleges  $A$  regisztrálási sík (lásd a 14.1. ábrát). A regisztrálási sík egy tetszőleges  $(x, y)$  pontjára beeső elektromos térerősség pillanatnyi értéke:

$$E_t(x, y) = \frac{E_{t0}}{r} \exp[i(kr - \omega t)], \quad (14.1)$$

ahol

$$r = \sqrt{R^2 + x^2 + y^2}. \quad (14.2)$$

Tekintettel arra, hogy a fényt csak a detektálási pontba beeső energia alapján vagyunk képesek észlelni, számítsuk ki az  $(x, y)$  pontba beeső energiát, pontosabban a fény intenzitását:

$$I_t(x, y) = E_t^*(x, y)E_t(x, y) = \frac{E_{t0}^2}{r^2}. \quad (14.3)$$

Ha tehát a beeső fényintenzitást regisztráljuk, elveszítjük a beeső hullám fázisára vonatkozó információt. A fázis detektálása érdekében vegyünk egy referencianyalábot, mely legyen az  $ff$  pontból kiinduló fényel azonos frekvenciájú, azzal koherens, és az egyszerűség kedvéért legyen a  $z$ -tengellyel párhuzamosan beeső síkhullám! Ebben az esetben tehát a referencianyaláb fázisa az  $A$  síkon mindenütt ugyanaz:

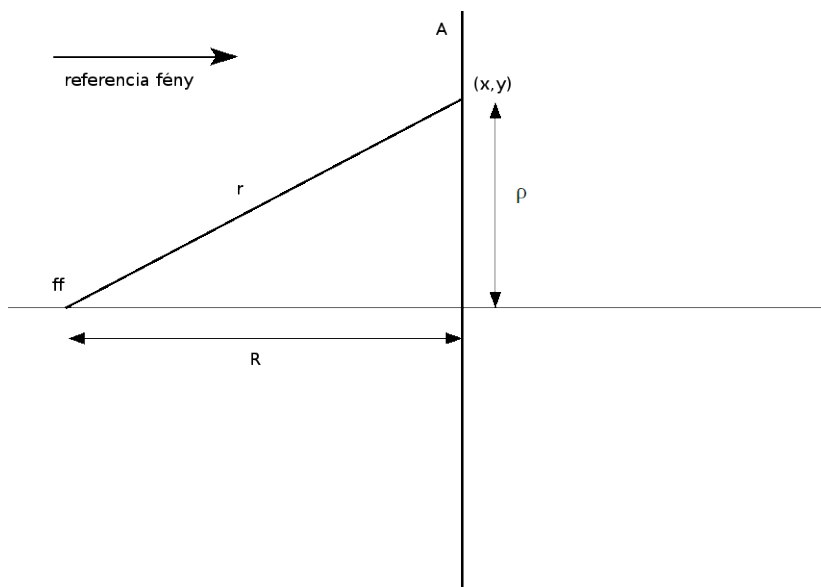
$$E_r = E_{r0} \exp[i(kz - \omega t)]|_{z=0} = E_{r0} \exp(-i\omega t), \quad (14.4)$$

az  $(x, y)$  pontban a referenciabullám és az  $ff$  fényforrásból érkező hullám (a polarizációtól most eltekintve) interferál:

$$\frac{E_{t0}}{r} \exp[i(kr - \omega t)] + E_{r0} \exp[-i(\omega t - \phi_0)] = \exp(-i\omega t) \left[ \frac{E_{t0}}{r} \exp(ikr) + E_{r0} \exp(i\phi_0) \right], \quad (14.5)$$

ahol  $\phi_0$  a referencia- és a tárgyhullám közötti fáziskülönbség. Ennek alapján az intenzitások:

$$I(x, y) = E^*(x, y)E(x, y) = \frac{E_{t0}^2}{r^2} + E_{r0}^2 + 2 \frac{E_{t0}E_{r0}}{r} \cos(kr - \phi_0). \quad (14.6)$$



14.1. ábra. A hologram regisztrálása

Ilyenkor tehát az  $A$  síkra beeső fényintenzitás a két fénynyalábtól származó intenzitások összegén kívül még egy, az interferenciából adódó, modulációs tagot is tartalmazni fog. Ez a moduláció – tekintettel arra, hogy a két fénynyalábot koherensnek tételeztük fel, és emiatt  $\phi_0$  időben állandó mennyiség – lényegében megőrzi számunkra a  $kr$



mennyiséget, mely nem más, mint az  $A$  síkra beeső gömbhullám relatív fázisa. Az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy  $\phi_0 = 0$ . Ilyenkor a beeső fény intenzitása az  $(E_{t0}/r + E_{r0})^2$  és az  $(E_{t0}/r - E_{r0})^2$  értékek között térben periodikusan változik, periódusát a  $\cos(kr)$  függvény határozza meg, azaz a

$$k\delta r = 2\pi n, n = 0, 1, 2, \dots, \quad (14.7)$$

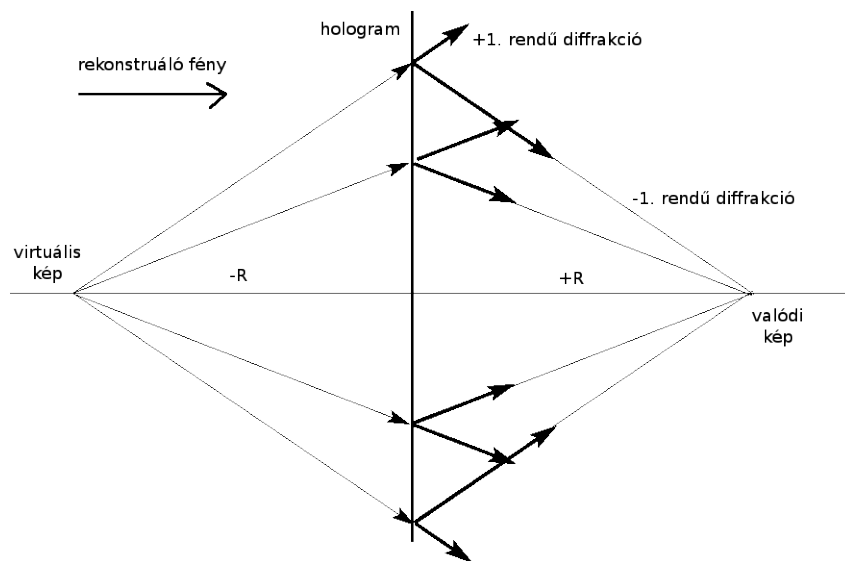
értékekre kapjuk vissza ugyanazt az intenzitást. Határozzuk meg, hogy az  $(x, y)$  síkon hol helyezkednek el ezek az értékek! A 14.1. ábra alapján

$$r^2 = R^2 + x^2 + y^2 = R^2 + \rho^2. \quad (14.8)$$

Az azonos intenzitású helyek az  $A$  síkban  $\rho$  sugarú koncentrikus körök mentén helyezkednek el. Az  $x = y = 0$  pontbeli intenzitás tehát (melyet  $kR$  értéke határoz meg) a tengelytől olyan távolságokra jelenik meg ismét, melyekre a (14.7) feltétel alapján  $r - R = 2n\pi/k = \lambda$ . A (14.8) összefüggésből

$$r^2 - R^2 = \rho_n^2 = (r + R)(r - R) \approx 2Rn\lambda, \quad (14.9)$$

ahol az  $r + R \approx 2R$  közelítést alkalmaztuk. (Ez a közelítés, mely az optikai tengelyhez közel futó, illetőleg azzal kis szöget bezáró sugarakra igaz, gyakran használatos az optikai számításokban: ezt szokták paraxiális közelítésnek nevezni.) A kapott intenzitáseloszlás tehát olyan, hogy az azonos intenzitású helyek koncentrikus körök mentén helyezkednek el, és e körök sugara  $\sqrt{n}$  szerint növekszik. Ha ezt az intenzitáseloszlást rögzítjük (azaz egy olyan transzparenciát alakítunk ki, melynél az áteresztőképesség hely szerinti változása éppen ennek az eloszlásnak megfelelő), teljesítjük a holográfia azon feltételét, hogy a kiindulási fénytér amplitúdóját és fázisát (az  $E_t$  gömbhullámot) egyidejűleg rögzítjük. A kapott felvételt úgy tekinthetjük, mint egy Fresnel-féle zónalemezt. (Eredetileg az optikában a Fresnel-lemez egy olyan transzparencia, melynél a fentiekben kiszámított moduláció pozitív értékei helyén az áteresztőképesség 1 (teljesen átereszt), illetőleg a negatív modulációs helyeken az áteresztőképesség 0 (teljesen elnyel). A Fresnel-lemez alkalmazásai esetén azonban tökéletesebb eredményt kapunk, ha az áteresztőképesség folytonos függvény szerint változik. Vizsgáljuk meg, hogy a kapott Fresnel-lemez hogyan képes rekonstruálni a felvételtori hullámteret (azaz az  $ff$  pontszerű fényforrás képét előállítani). A rekonstrukció érdekében felvételünket az eredetileg használt referenciafénnyel világítsuk meg (lásd a 14.2. ábrát). A feladat egyszerűbbé tétele érdekében csak azt vizsgáljuk meg, hogy az optikai tengely mentén milyen megvilágításokat fogunk észlelni, feltételezve, hogy zónalemezünk áteresztőképessége a fenti megjegyzés szerint 0 vagy 1. A lemezre (hologramunkra) beeső, rekonstruáló fény természetesen a lemezen történő áthaladásakor a diffrakcióra vonatkozó szabályok szerint viselkedik. A Huygens-elv alapján a lemez minden olyan pontjából, mely a beeső fényt átengedi, elemi gömbhullámok indulnak ki és az eredő fény ezen gömbhullámok interferenciájának eredménye lesz. Könnyen beláthatjuk, hogy a tengely mentén az első olyan



14.2. ábra. Diffrakció a Fresnel-lemezen

pont, melynek megvilágítása maximális lesz, a lemeztől éppen  $R$  távolságra helyezkedik el. Ebben a pontban ugyanis a zónalemez (a (14.9) feltétel következtében) azokat az elemi hullámokat nem engedi kialakulni (azaz nem bocsájt át fényt), melyek az interferencia során leronthatnák a nyitott (áteresztő) helyekről beeső, diffraktált hullámokat. Ezt úgy tekinthetjük, hogy a lemezt a referenciasugárral megvilágítva, „rekonstruáltuk” a felvétel során tárgyként használt pontszerű fényforrást. Ilyenkor tehát a lemezen diffraktálódó fényből minden  $-1$ -edik diffrakciós rendhez tartozó diffraktált fény a lemeztől éppen  $R$  távolságra halad keresztül az optikai tengelyen. Az ezeknek a sugaraknak megfelelő,  $+1$ -edik rendű diffrakciós hullámok egy divergens fénynyalábot alkotnak. Ez a divergens fény azonban olyan, hogy éppen az eredeti fényforrásunk helyéről (a lemeztől  $-R$  távolságra lévő pontból) látszik kiindulni, azaz ezek a fényhullámok az eredeti tárgy virtuális képét állítják elő. A magasabb rendű diffrakciós nyalábok a fentiekhez hasonló megfontolások alapján az eredeti tárgyról egy-egy magasabb rendű valós és virtuális képet állítanak elő. A hologram készítése során tehát fontos, hogy a felvételkor kialakult, modulált intenzitáseloszlást úgy rögzítsük, hogy a rekonstrukció során ne alakuljanak ki magasabb rendű diffrakciós nyalábok, továbbá, hogy a diffrakcióban az első rendű diffrakciós sugarak intenzitása a lehető legnagyobb legyen a nullad rendű (eltérülés nélkül áthaladó) fényhez képest. Látjuk tehát, hogy miként lehet hologramot készíteni, illetőleg rekonstruálni. Az is látszik, hogy a rekonstrukció során kialakuló képek nem a legideálisabbak, mert a valós kép esetében a megfigyelést nagyon megnehezíti, hogy a kép a nullad rendű nyaláb (rendkívül nagy) fényintenzitásán, mint háttéren alakul ki. Ennek kiküszöbölésére Leith és Upatnieks azt javasolták, hogy a felvételkor használandó

referencianyaláb az optikai tengellyel szöget bezárva essen be. Ilyenkor természetesen a rekonstruáláshoz alkalmazott fény is hasonló elrendezésű. Érdeemes megjegyezni, hogy a Fresnel-féle zónalemez lencseként viselkedik, azaz segítségével leképezést is létre lehet hozni. A fentiekben láttuk, hogy a Fresnel-lemez a beeső párhuzamos fénynyalábot (a rekonstruáló fényt) az optikai tengelyen lévő pontba képezi le. Ez a pont tekinthető a lemez fókuszpontjának (a fenti jelöléssel  $f = R$ ). Ha a lemezt egy, a tengelyen lévő és a lemeztől  $t$  távolságban elhelyezett pontszerű fényforrással világítjuk meg, akkor az első rendű diffrakciótól származó, a lemeztől  $k$  távolságra kialakuló képpontra fennáll, hogy  $1/k = 1/f - 1/t$ , azaz a lencsék jól ismert leképezési törvényének megfelelően viselkedik. A Fresnel-lemez lencseként történő alkalmazásainál figyelembe kell venni, hogy a (14.9) egyenlet alapján az első gyűrű sugara ( $\rho_1$ ) segítségével kifejezett fókusz távolság  $f = R = \rho_1^2/2\lambda$ , tehát a lencseként alkalmazott Fresnel-lemez kromatikus hibája nagyon nagy is lehet. Mindezek figyelembevételével a Fresnel-lemezeket olyan leképező rendszerekben szokás alkalmazni, melyeknél az adott hullámhossztartományban az egyébként alkalmazott lencsék erős abszorpciójuk, vagy más okok miatt nem használhatók, például röntgensugárzás leképezésekor.

### 14.2.1. A holografikus regisztrálás és rekonstrukció

Az előzőekben említettük, előnyös, ha a hologram felvételekor alkalmazott referencianyaláb iránya nem párhuzamos az optikai tengellyel. Ebben az esetben, ha eltekintünk az elektromágneses hullám időfüggésétől

$$E_r = E_{r0} \exp[ik(R + x \sin \Theta)], \quad (14.10)$$

ahol  $\Theta$  a referenciasugár iránya és a  $z$ -tengely által bezárt szög. Az  $x$  tengely pedig a hologram síkjának valamint az optikai tengely és referencianyaláb által megadott sík metszésvonalába esik (lásd a 14.3 ábrát). A tárgypontról érkező hullám:

$$E_t = \frac{E_{t0}}{r} \exp(ikr) \approx \frac{E_{t0}}{R} \exp[ik(R + \frac{\rho^2}{2R})]. \quad (14.11)$$

Itt ismét használtuk a paraxiális közelítést. Az  $(x, y)$  síkra beeső intenzitás:

$$\frac{E_{t0}^2}{R^2} + E_{r0}^2 + 2 \frac{E_{t0}E_{r0}}{R} \cos[k(\frac{\rho^2}{2R} - x \sin \Theta)]. \quad (14.12)$$

Az előhívás után tehát a regisztrátum áteresztőképessége

$$T(x, y) = K_1 + K_2 \cos[k(\frac{\rho^2}{2R} - x \sin \Theta)], \quad (14.13)$$

ahol  $K_1$  és  $K_2$  állandók. Ha ezt a transzparenciát egy  $\Theta$  szög alatt beérkező síkhullámmal világítjuk meg, akkor a lemez mögött  $l$  távolságra a térerősség értéke:

$$E(\xi, \eta, \zeta) = B \iint T(x, y) \exp(-ikx \sin \Theta) E_l(\xi - \mathbf{x}, k) dx dy, \quad (14.14)$$

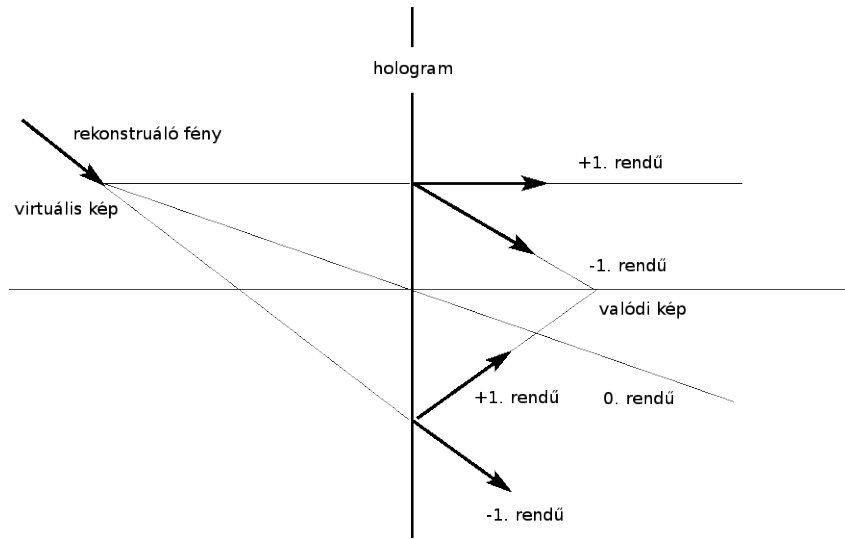
ahol

$$E(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{x}, k) = -\frac{i}{\lambda l} \exp\left[ik\left(\zeta + \frac{(\xi - x)^2}{2l} + \frac{(\eta - y)^2}{2l}\right)\right], \quad (14.15)$$

melyet a szabad tér impulzus-válaszának nevezünk. A fenti egyenletek levezetésénél két derékszögű koordináta-rendszert használtunk: az  $(x, y, z)$  rendszer a tárgyhoz rögzített, míg a  $(\xi, \eta, \zeta)$  rendszer a képtérben definiált és origója a tárgytérben a  $z = l$  helyen van. Az egyenletekben a félkövénen szedett  $\boldsymbol{\xi} = (\xi, \eta, \zeta)$  és  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  a megfelelő koordináta-rendszerek helyvektorait jelöli. Behelyettesítés után az  $l = R$  helyen kapjuk:

$$E(\xi, \eta, \zeta) = C_1 \exp(-ik\xi \sin \Theta) + C_2 \exp\left[\frac{ik}{4R}((\xi - 2R \sin \Theta)^2 + \eta^2)\right] + C_3 \delta(\xi, \eta). \quad (14.16)$$

Ebben a kifejezésben az első tag jelenti a nullad rendű diffrakciót (a beesővel párhuzamos síkhullám), a második tag egy gömb alakú hullámfrontot ad, melynek középpontja a hologram megvilágítás felőli oldalán lévő, attól  $R$  távolságú síkban a  $\xi = 2R \sin \Theta, \eta = 0$  koordinátájú pontba esik. Ez tehát egy virtuális képet jelent. A harmadik tag adja meg a tárgyponthoz való képét, mely a hologram megvilágítással ellentétes oldalán, attól



14.3. ábra. A hologram rekonstrukciója tengelyen kívüli referencianyaláb esetén

$R$  távolságban keletkezik a  $\xi = 0, \eta = 0$  koordinátájú pontban, az optikai tengelyen. A számításokból is látszik, hogy ezzel az elrendezéssel szét lehet választani egymástól a virtuális és a reális képeket, valamint a nullad rendű diffrakciós nyalábot. Leith és Uptonieks általános esetre is bebizonyították, hogy ha valamely tárgyról a regisztrálási felületre érkező,  $E_t(x, y)$  hullámfronthoz egy  $E_r(x)$  referencia síkhullámot keverünk és az eredő intenzitást detektáljuk úgy, hogy lineáris hologramot kapjunk (azaz a kész hologram áteresztőképessége az eredetileg beeső intenzitás lineáris függvénye), akkor ezt egy

$E_r^*(x)$  sugárral megvilágítva (ahol  $E_r^*$  az eredeti referenciahullám komplex konjugáltja), a hologram megvilágítással ellentétes oldalán az eredeti távolságban a tárgy valós képe áll elő. A referenciasugár komplex konjugáltját úgy állíthatjuk elő, ha  $\Theta$  helyett  $-\Theta$  szöveget választunk. Ha pedig a hologramot az eredeti  $E_r(x)$  hullámmal világítjuk meg, a tárgy eredeti helyén annak virtuális képe keletkezik.

### 14.2.2. A holografikus leképezés minősége

Vizsgáljuk meg egy, a hologramtól 1 távolságban elhelyezkedő tárgysík leképezését! Legyen ebben a síkban fekvő pont koordinátája  $(\xi, \eta)$ , míg a hologram síkjában fekvő pont koordinátáját válasszuk  $(x, y)$ -nak! Ha a tárgytér egyik pontjából kiinduló hullámfront amplitúdója  $f(\xi, \eta)$ , akkor a regisztrálási sík  $(x, y)$  pontjába beeső, az összes tárgyponttól eredő amplitúdót a tárgy teljes felületére képzett integrálás segítségével adhatjuk meg:

$$u(x, y) = \int \int f(\xi, \eta) E_l(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, k) d\xi d\eta, \quad (14.17)$$

ahol  $E_l$  a (14.15) alatt megadott válaszfüggvény. Képezzük a (14.17) egyenlet Fourier-transzformáltját! (A transzformáltakat nagy betűvel jelöljük.) Ez a transzformáció azt jelenti, hogy a továbbiakban nem az intenzitáseloszlást adjuk meg, mint a tárgysík egyes pontjainak függvényét, hanem hogy az intenzitáseloszlás milyen súlyfüggvények segítségével állítható elő, amikor az  $x$ , illetve az  $y$  tengely mentén periodikus függvények összegeként írjuk fel. (A térfrekvenciák szerinti sorfejtést alkalmazzuk.) A Fourier-transzformáltakkal a (14.17) egyenlet a következő lesz:

$$U(p, q) = F(p, q) E_l(p, q), \quad (14.18)$$

ahol  $(p, q)$  a  $\lambda$  hullámhosszhoz tartozó térfrekvenciákat jelenti. Könnyen belátható, hogy

$$|E_l(p, q)|^2 = \frac{1}{(\lambda l)^2}, \quad (14.19)$$

tehát

$$|U(p, q)|^2 = |F(p, q)|^2 \frac{1}{(\lambda l)^2}. \quad (14.20)$$

Ebből az adódik, hogy a regisztrálási síkban kialakuló fényintenzitás-eloszlás térfrekvenciák szerinti teljesítményspektruma arányos a tárgyról kibocsátott fényintenzitás térfrekvenciák szerinti teljesítményspektrumával. Ahhoz, hogy a teljesítményspektrumból vissza lehessen állítani az eredeti eloszlást, a spektrumot a teljes  $-\infty < p, q < +\infty$  tartományban regisztrálnunk kellene, mégpedig végtelen nagy felbonthatósággal (azaz meg kellene tudnunk különböztetni a függvény értékét a  $p$  és a  $p + \Delta p$  pontokban, miközben  $\Delta p \rightarrow 0$ ). Ez a követelmény a reális esetben nyilvánvalóan két vonatkozásban sem teljesül: egyrészt a regisztrálható legnagyobb periódus nem lehet nagyobb a regisztrálásra

használt fotólemez megfelelő méreténél, másrészt a lemezen rögzíthető legkisebb periódust az adott típusú fotoemulzió felbontóképessége (szemcsemérete) korlátozza. Némileg leegyszerűsítve úgy gondolhatjuk, hogy a regisztráló lemez méretének csökkentésekor egyre több finom részlet veszítünk el a tárgy képéből (a térfrekvencia fordítottan arányos a diffrakciót okozó eloszlás geometriai méretével), míg a durvább szemcséjű fotóanyag (kisebb felbontóképességű film) azt eredményezi, hogy csak kisebb méretű tárgyakról készíthetünk torzításmentes hologramot. Figyeljünk fel arra, hogy a véges méretekből és a regisztráló közeg gyenge felbontóképességéből eredő információvesztés már a regisztrálás során fellép, ezért az így elveszített információt a rekonstrukció során már semmilyen manőverrel nem lehet visszanyerni. Vizsgáljuk meg, mit jelent ez a korlátozás! Legyen egy referencianyalábunk, melynek hullámszámvektorát jellemezzük a  $k_r$  nagysággal, iránya pedig legyen  $\theta$  a regisztrálási sík normálisához képest! Ugyanehhez az irányhoz képest legyen a tárgyról kiinduló fénynyaláb iránya  $\alpha$ , hullámszámvektorának nagysága pedig  $k_t$ ! Két ilyen síkhullám interferenciájának eredményeként a regisztrálási síkban kialakuló sávszerkezet vonalainak egymástól való távolságát a

$$\cos[(\mathbf{k}_t - \mathbf{k}_r)\mathbf{x}] = \cos \frac{2\pi}{\lambda}(\sin \alpha - \sin \theta)x \quad (14.21)$$

kifejezés periodicitása szabja meg, azaz

$$\frac{1}{|\Delta x|} = \frac{\sin \alpha - \sin \theta}{\lambda}. \quad (14.22)$$

Miután a fotóanyag véges felbontóképessége miatt  $\Delta x \geq (\Delta x)_{min}$ ,

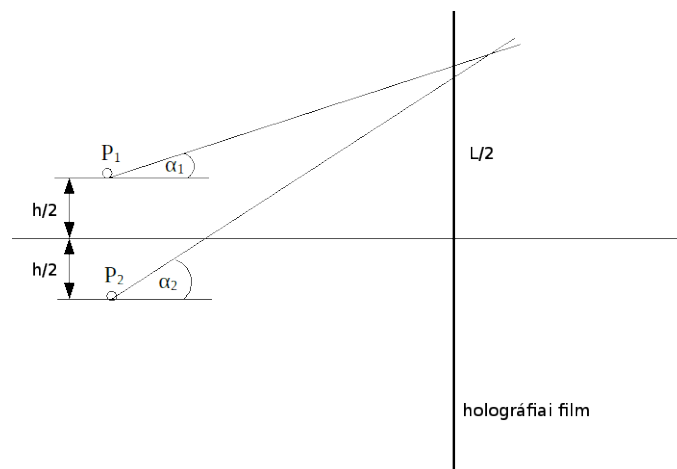
$$\frac{\sin \alpha - \sin \theta}{\lambda} \leq \frac{1}{(\Delta x)_{min}} = \xi_c, \quad (14.23)$$

amiből

$$\sin \alpha \leq \lambda \xi_c \pm \sin \theta. \quad (14.24)$$

Ez az összefüggés azt jelenti, hogy van egy, a  $\lambda \xi_c$  mennyiségnek megfelelő  $\theta_c$  határszög, mely a referencianyaláb iránya körül meghatároz egy szögtartományt, és a tárgyról érkező sugaraknak ebbe kell esniük ahhoz, hogy regisztrálásuk kielégítő legyen. A szokásos, fényképezésben használatos fotóanyagok esetében (finomszemcsés hívási eljárással) az elérhető felbontóképesség 80-100 vonal/mm, tehát kb. 600 nm hullámhosszúságú fényvel regisztrálva  $\sin \theta_c \sim 0,06$ , amiből  $\theta_c \sim 3,5^\circ$ . Nyilvánvaló, hogy holográfiai felvétel készítésére az ilyen film nem alkalmas. Erre a célra speciális, holográfiai filmet dolgoztak ki, melynek felbontása jobb, mint 1000 vonal/mm, tehát az apertúra-szög általában nagyobb, mint  $\pm 40^\circ$ .

A regisztráló lemez véges mérete miatt csak azt a két, egymástól  $h$  távolságra lévő tárgypontot tudjuk a felvételen különálló pontokként rögzíteni, melyektől származó elsőrendű diffrakciós maximumok még ráférnek a lemezre (lásd a 14.4 ábrát). Legyen a  $P_1$



14.4. ábra. A hologram méretének hatása a tárgyponatok felbontására

pontból kiinduló sugár hullámszám-vektora  $k_1$ , a  $P_2$  pontból kiindulóé pedig  $k_2$ , akkor e feltételből a regisztráló lemez  $x$  pontjában

$$(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{x} = \frac{2\pi}{\lambda}(\sin \alpha_1 - \sin \alpha_2)\frac{L}{2} = \pi, \quad (14.25)$$

ahonnan az  $r_1 \approx r_2 \approx r$  és  $\alpha_1 \approx \alpha_2 \approx \alpha$  közelítéssel végül:

$$\frac{h}{\lambda} \approx \frac{r}{\lambda} \approx \frac{1}{\sin \alpha}, \quad (14.26)$$

ahol  $\alpha$  az a szög, amely alatt a regisztrálási felület a tárgysík origójából látszik. A korábban kifejtettek alapján látható, hogy a Gábor-féle elrendezés szimmetrikus térfrekvencialevágást eredményez és ha a tárgyhoz elég közel helyezkedik el a regisztráló lemez, akkor a felső frekvenciahatár elég nagy lehet. A ferde beesésű referenciasugaras módszernél azonban a tárgyat célszerű olyan messze elhelyezni a lemeztől, hogy magára a tárgyra már ne essen rá a referenciafény. A (14.26) egyenletből látszik, hogy minden reális elrendezés esetén  $h/\lambda > 1$ , azaz csak az egymástól  $\lambda$ -nál távolabb elhelyezkedő pontokat lehet felbontani. A Fresnel-féle zónalemeznél elmondottak alapján érthető, hogy a hologram optikai tengely irányába eső felbontóképessége (két, egymás mögött elhelyezkedő pont szétválasztásának lehetősége) a használt fényforrás frekvenciájának  $\Delta\nu$  sáv szélességétől függ. Az eddigiek során csak a hologram térbeli kialakulásával foglalkoztunk és nem tértünk ki arra, hogy a rekonstruált képnek milyenek lesznek a megvilágítási viszonyai. Ha a regisztrálás úgy történt, hogy a regisztrálandó intenzitásokat a regisztráló közeg áteresztőképessége segítségével rögzítettük, akkor ez az áteresztőképesség a

$$T = A + B \cos(Kx) \quad (14.27)$$

függvénnyel írható le. Ideális expozíció esetében az áteresztőképesség a lehetséges szélső értékek között (0 és 1) változik. Azaz

$$T = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(Kx) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \exp(iKx) - \frac{1}{4} \exp(-iKx). \quad (14.28)$$

Egy ilyen transzparenciát megvilágítva, a beeső fény térerősségének fele a nullad rendű diffrakció létrehozására fordítódik (első tag), míg 1/4 része alakítja ki a  $-1$ -ed rendű, 1/4 része pedig a  $+1$ -ed rendű diffrakciót. Tehát a hologram rekonstruálása során a  $+1$ -ed rendű diffrakció által létrehozott kép megvilágítására a beeső fényintenzitás 1/16-od része jut. Ez azonban az elméleti maximum, a gyakorlatban a kép kialakítására jutó fényenergia mindig kevesebb, mint a beeső fény 6,25%-a. Kimutatható, hogy nem periodikus függvény szerinti moduláció esetében ez az érték magasabb lehet, és a diffrakciós hatások (a diffraktált fény intenzitása osztva a bejövő fényintenzitással) például lépcsőfüggvény esetén elérheti a 10%-ot. Ilyen "regisztrálás" történhet például a számítógép által generált hologramok esetében. A szokásos fotóanyagok esetében lehetőség van arra, hogy a regisztráláskor rögzített intenzitásvizonyokat az előhívás után a lemez lokális törésmutató-modulációja adja vissza (a fény hatására kialakuló, exponált szemcsékben az előhívási művelet során a kivált ezüst helyére az emulzió anyagától eltérő törésmutatójú anyagot viszünk be — esetünkben ez KBr). A fázis-modulált hologramok esetében tehát a moduláció:

$$T = T_0 \exp[i\phi(x, y)], \quad (14.29)$$

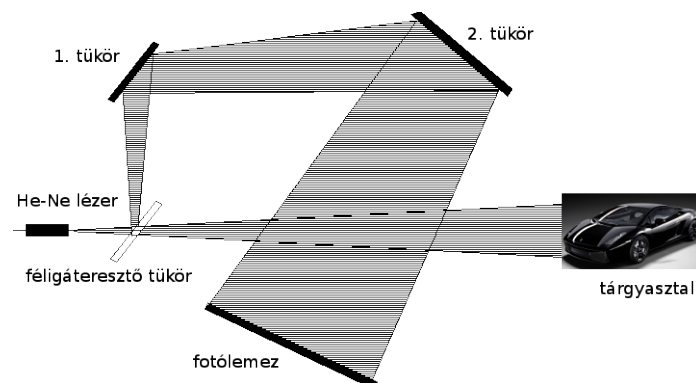
ahol  $\phi(x, y) = \phi_0 + \phi_1 \cos(kx)$ . Ilyen moduláció esetében az elméletileg elérhető, maximális diffrakciós hatások 33,9%. (Lépcső-függvény szerinti moduláció esetében a hatások elérheti a 40%-ot.) Az elmondottakból arra az eredményre jutunk, hogy célszerű fázis-modulált hologramokat készíteni, mert ezeknél megfelelő kidolgozás esetében a rekonstrukció során a beeső fény intenzitásának  $\sim 30\%$ -a fordítódik a valós kép létrehozására és ugyanennyi vesz részt a látszólagos kép megvilágításában.

### 14.3. A mérési elrendezés

A berendezés minden elemét – a lézer kivételével – egy merev lapra szerelt sínekre rögzítjük, melyet igyekszünk rezgésmentessé tenni (lásd a 14.5. ábrán lévő vázlatot). Fényforrásként egy 10 mW névleges fényteljesítményű, He-Ne lézert használunk. A kilépő fény eloszlásának egyenletesebbé tétele érdekében a kilépőnyílásra egy térfrekvencia-szűrőt szereltünk, emiatt a kilépő fény divergens. A lézer kilépőnyílása egy kis retesszel lezárható, ha tehát a lézer be van kapcsolva (a tápegység üzemel) és mégsem látjuk a fényt, feltehetőleg ez a rezesz zárja le a lézert.

Tanulságos, ha a hologram elkészítése előtt meggyőződünk a berendezés rezgésmentességéről. Erre a célra a tükrök felhasználásával állítsunk össze egy egyszerű Michelson-interferométert és vizsgáljuk meg az interferencia-gyűrűrendszer stabilitását. A gyűrűk





14.5. ábra. A mérőberendezés vázlata

lassú remegő mozgása, kúszása termikus instabilitásra utal, ezt a féligáteresztő tükröt meleg levegővel gyengén felmelegítve jól megfigyelhetünk. Hang-, vagy mechanikai hatásra (beszéd, lépések) a gyűrűrendszer „összeomlik”, A tükör közelében beszélve megfigyelhetjük a lézermikrofon működési elvét. Ahhoz, hogy a felszereléssel hologramot készíthessünk, el kell tudnunk érni, hogy a gyűrűrendszer az expozíciós időn belül stabil maradjon. Ehhez az expozíció idejére minden külső rezgést ki kell küszöbölnünk, és lehetőleg mozdulatlanul csendben kell maradnunk. A berendezést a hologram elkészítéséhez úgy kell átrendezni, hogy a direkt nyaláb a tárgyasztalon elhelyezett céltárgyat teljesen megvilágítsa. A szűrt lézertény egy exponáló zárszerkezeten (az ábrán nincsen feltüntetve) keresztül jut a holográfiás felvételt rögzítő asztallap fölé. Az exponálózár után helyezzük a kilépő nyalábot kétfelé osztó féligáteresztő tükröt, ez a nyalábosztó hozza létre a referencianyalábot és a tárgynyalábot. A féligáteresztő tükrőről oldalirányban eltérített referencianyalábot az optikai padon lévő forgatható tükrök segítségével a fotólemez tervezett helyére irányítjuk (A 14.5. ábrán a 3 vékony, vízszintes vonal az asztalra szerelt, az egyes elemek rögzítésére szolgáló optikai síneket jelöli.). A referencianyaláb által, illetve a tárgyat megvilágító és arról visszaverődött fény által megtett utak hosszának különbsége nem lehet nagyobb a használt lézer által kisugárzott fény koherenciahosszána – esetünkben 10 – 25 cm, ellenkező esetben nem lép fel a mintázat kialakításához szükséges interferencia. A referencia nyaláb útjába egy, az intenzitását, csökkentő szűrőt helyezünk. Ez nélkülözhetetlen, mert a hologramon a moduláció akkor a legelőnyösebb, ha a film síkjában a tárgy hullám és a referencianyaláb destruktív interferenciája közel teljes kioltást eredményez, azaz ha a referencianyaláb intenzitása nem lényegesen nagyobb, mint a tárgyról visszaverődött fény intenzitása. A kész hologram megtekintéséhez viszont ne felejtjük el a szűrőt eltávolítani a fényútból, különben a felvételt kellemetlenül sötétnek látjuk majd! A korszerű holografikus filmekkel akár egy nagyságrendnyi intenzitáskülönbség mellett is kielégítő minőségű felvételt lehet készíteni, mégis törekedni kell a közel azonos fényintenzitás elérésére. Ugyanezen ok miatt holográfiás felvétel tárgya-

ként nem célszerű olyat választani, melynek felülete a 633 nm hullámhosszúságú He-Ne lézer fényt erősen elnyeli – lézerrel megvilágítva sötétnek látszik. Szintén kedvezőtlenek a tükröző felületek, mert a lemez felé vagy nagyon kevés, vagy éppen túl sok fényt vernek vissza. A lézert a mérés ideje alatt folyamatosan tartjuk bekapcsolt állapotban, és ha nincsen szükségünk a fényre, az exponáló zárszerkezet bezárásával vagy az exponálózár fényútba helyezésével zárjuk le a fény útját! Ilyen üzemmódban ugyanis a lézer – bemelegedése után – már stabil működésű. A mérési elrendezés beállítása után az exponáláshoz a végtelenre állított zárszerkezetet a rendelkezésre álló eszközök segítségével nyissuk ki és rögzítsük az expozíció idejére! Érdeemes megjegyeznünk, hogy – eltérően az elméleti részben mondottaktól – a holográfiához használt fényünk (mind a megvilágító, mind a referencia) divergens nyaláb lesz. A beállításkor ügyeljünk rá, hogy a referencia nyaláb a film közepére irányuljon, és az elrendezést sötétben a film behelyezése közben se változtassuk meg! A felvételt Gentet-féle Ultimate 08 típusú fényérzékeny emulzióval bevont, üvegalapú filmre készítjük, melynek mérete 50×40 mm. Az emulzió több színérzékenységi maximummal rendelkezik a 440-480 nm, 440-540 nm, 610-660 nm és 660-700 nm tartományokban. A film érzékenysége ezekben a tartományokban is csekély, így ha a munka során fényre van szükségünk, a sötétkamra lámpájának zöld fényét diffúz, szórt fényként használhatjuk. Azonban a lámpa közvetlenül a filmet soha ne világítsa meg! A filmet célszerű a tartójába emulziós oldalával a regisztrálandó fény irányába fordítva behelyezni. Az emulzióval borított oldal a sötétkamra lámpájának súroló fényénél mattabbnak látszik, de a gyakorlatlan szem a csekély különbséget nehezen észleli. A film exponálása és kidolgozása a laboratóriumban található vegyszerek segítségével, az ott található leírás alapján történik. A 8 percig tartó exponálás alatt számos, a lézerből kilépő foton találja el a filmen lévő fényérzékeny emulzió ezüst ionokat tartalmazó fényérzékeny szemcséit, melyekben ennek következtében rácstörés következik be, és ezüst válik ki. A keletkező ezüstszemcsék túl kicsik ahhoz, hogy láthatóak legyenek, ezek alkotják a fototechnikából ismert látens képet. A 6 perces előhívás alatt kémiai reakció segítségével az ezüst magokra további ezüstöt választunk ki, így a szemcsék kolloid méretűre nőnek, amit a film feketedéseként észlelhetünk. Az előhívás végén a filmet a desztillált vízzel leöblítjük, és 5 percre a fixáló-halványító folyadékba helyezzük. Az oldat egyik szerepe, hogy a felesleges fényérzékeny anyaggal komplexet képezve kimossa azt az emulzióból. (Így a fixálás után a filmmel akár világosban is dolgozhatunk, bár előnyösebb, ha szemünk továbbra is sötéthez adaptált marad.) A párhuzamosan lejátszódó halványítás során az ezüstszemcsék feloldódnak, és a helyükön magas törésmutatójú, de a fényt el nem nyelő sók rakódnak le az emulzióban. Így a hologram rekonstrukciója során az ezüstszemcsék nem nyelik el a megvilágításhoz használt fény egy részét, vagyis sokkal hatékonyabban hasznosíthatjuk azt. Természetesen az ily módon elkészített filmen a hologram kialakulása nem látható, hiszen a szem nem érzékeli a fázis-modulációt. Az előhívás és a fixálás alatt is ügyelnünk kell arra, hogy a filmet mindenütt érje a folyadék. A nedves emulzió igen sérülékeny, ezért lehetőleg soha ne érintsük a film középső részeit! Gyakori hiba, hogy az emulzió az edény falára letapad, így nem éri egyenletesen a vegyszer, vagy le

is szakad a hordozó üveglapról. Utolsó lépésként a filmet felületaktív anyaggal kevert desztillált vízbe helyezzük, hogy a film cseppmentesen száradjon.

## 14.4. Gyakorló kérdések

1. Kinek a nevéhez fűződik a holográfia elméletének megalkotása?
2. Milyen fényforrást használunk a mérés során a hologram készítéshez?
3. Rajzolja fel vázlatosan a Michelson interferométert!
4. Mitől függ a Michelson interferométerrel létrehozott interferencia gyűrűrendszerben a gyűrűk közti távolság?
5. Rajzolja fel vázlatosan a labormérés során a hologram elkészítéséhez használt lézer, féligáteresztő tükör, tükrök, tárgyasztal, körülbelüli beállítását!
6. Mit rögzítünk a holografikus filmen az elkészítés során?
7. Mit nevezünk referencia sugárnak?
8. Miben különbözik a holográfiában használt film a fényképészetben használttól?
9. Mik a holografikus film előhívásának főbb lépései?
10. Várhatóan mi látható az elkészült hologramon, ha referencia fény nélkül szabad szemmel ránézünk?

## 14.5. Mérési feladatok

1. Végezzük el a berendezés rezgésmentességének vizsgálatát!
2. Készítsünk holográfiás eljárással Fresnel-lemezt! Az elméleti részben leírtakkal ellentétben berendezésünkön csak olyan Fresnel-lemez készíthető, melynél a referencianyaláb is divergens. (Emiatt Fresnel-lemezünk tulajdonképpen egy pontszerű fényforrás hologramja lesz.)
3. Készítsünk tetszőleges tárgyról hologramot! (Az adott elrendezésben a holográfián rögzítendő tárgy mérete a sugárnyaláb divergenciájából adódóan nem lehet nagyobb, mint kb.  $50 \times 50 \times 50 \text{ mm}^3$ . A készítés során vegyük figyelembe a (14.24) összefüggésben megadott feltételt.)

## 14.6. Ajánlott irodalom

- [1] Gábor Dénes: Válogatott tanulmányok. (Gondolat, Budapest, 1976)
- [2] Collier, R.J., C.B. Burckhardt, L.H. Lin: Optical Holography. (Academic Press, 1971)
- [3] Guenther, R.: Modern Optics. (Wiley, 1990)
- [4] Yu, F.T.S.: Optical Information Processing. (Wiley, 1983)

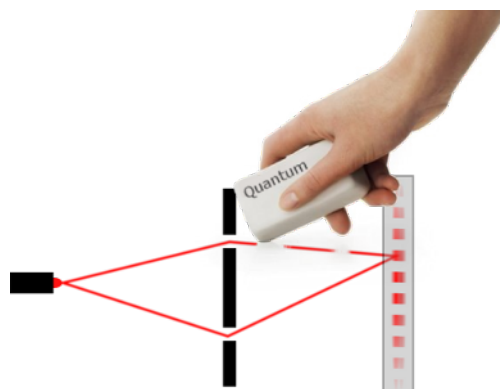
## 15. fejezet

# Kvantumradír kísérlet (Koltai János)

### 15.1. Bevezetés

A Young-féle interferenciakísérlethez hasonló kétréses részecskeinterferencia kísérletek magyarázatáról ezt írta Richard Feynman 1964-ben: „Vizsgálódásunk . . . magában rejti a kvantummechanika lényegét is. Valójában ez a jelenség tartalmazza az *egyetlen* rejtélyt.” A kétréses kísérletet – a fény mellett – nem csak elektronokkal, hanem még akár olyan nagyméretű objektumokkal is el lehet végezni, mint egy  $C_{60}$  molekula. A részecskékkel végzett kísérletekben még olyankor is kirajzolódik az interferenciakép, amikor a részecskék egyesével, egymás után haladnak át a berendezésen, és egyszerre sosem tartózkodik egy részecskénél több a rendszerben. Régóta ismeretes, hogy ezekben a kétréses kísérletekben, ha ismerjük az útvonalat, azaz meg tudjuk mondani, hogy melyik résen ment át a részecske, akkor az interferenciakép eltűnik: az útvonal ismerete tönkreteszi az interferencia minőségét (megfigyelhetőségét). Az útvonal ismeretének és az interferencia jelenségének összeférhetetlenségét többféle egyenlőtlenséggel is számszerűsítették már. Eredetileg az volt az elképzelés, hogy a Heisenberg-féle határozatlansági elv miatt az útvonal mérése rontja el az interferenciát. Sokféle spekuláció született arra vonatkozólag, hogy hogyan tudnánk a rendszert becsapni, és oly módon megállapítani, hogy melyik útvonalon haladt a részecske, hogy közben az interferenciát sem rontjuk el.

Az első és talán legismertebb példa, az Einstein–Bohr-dialógusból az 5. Solvay konferencián Einstein gondolatkísérlete, melyben a résnek átadott impulzusok mérésével meghatározható lenne a részecskék pályája. Bohr válaszában megmutatta, hogy ekkor a rések eredeti pozíciójának határozatlansága ugyanabba a nagyságrendbe esik, mint az interferencia minimumok és maximumok közti távolság, és így a határozatlansági elv miatt elmosódnának az interferencia csíkok. A kétréses kísérlet értelmezésbeli problémákat is felvet. Ha azt nézzük, hogy a részecske melyik résen ment át, akkor mindig azt látjuk,



15.1. ábra. A kvantumradír elnevezést O. Scully és munkatársai javasolták. Ha kitörlöm a pályáról szerzett információt, akkor ezzel helyre állítható az interferencia. A mérés során ezt szemléltetni fogjuk, bár a mi mérésünk klasszikusan is megmagyarázható.

hogyan vagy az egyikén, vagy a másikon. Ha viszont az interferenciaernyőn a gyűrűket látjuk, akkor a részecske egyszerre mindkét résen kellett átmenjen. Hogyan dönti ezt el, mikor dől ez el? Hogyan befolyásolja a részecskét a megfigyelésem? Ha megváltoztatom, hogy ernyőt helyezek-e az útjába, vagy nem, akkor megváltoztatom a történelmet? Sérül-e a kauzalitás? Mi van, ha egy megfigyelő megleste, hogy a részecske melyik résen ment át, de meghalt, mielőtt bárkinek is elmondta volna mérési eredményét? Szám-talan izgalmas kérdés, még laikusokat is megmozgató paradoxonok lehetőségével. Az alapfogalmak elsajátításához ajánlott Geszti Tamás „Kvantummechanika” című könyvét [1] vagy Patkós András „Bevezetés a kvantumfizikába: 6 előadás Feynman modorában” című jegyzetét [2] elolvasni.

## 15.2. Kvantumradír

A jelenség lényegének megragadásához nem szükséges a határozatlansági elv alkalmazása, az alábbi eszmefuttatás szerint ennél sokkal általánosabb a magyarázat [3]. Vegyük fel – a belső szabadsági fokok elhanyagolásával – az interferométerből kilépő részecskék hullámfüggvényét a következő alakban:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle], \quad (15.1)$$

ahol  $|\Psi_1\rangle$  ( $|\Psi_2\rangle$ ) jelöli az 1 (2) úton áthaladás amplitúdóját. Annak valószínűsége, hogy a részecskét az ernyő egy  $\mathbf{r}$  pontjában találjuk  $|\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle|^2$ . Ha ezt a kifejezést kifejtjük a 15.1 képlet szerint, akkor 4 tagot kapunk, melyekből az alábbi keresztszorzatok felelnek az interferenciáért:

$$\langle \Psi_1 | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Psi_2 \rangle \text{ és } \langle \Psi_2 | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Psi_1 \rangle.$$

Tegyük fel, hogy bekapcsolunk egy útvonaljelölő berendezést ( $M$ ), amivel meg tudjuk jelölni, hogy egy részecske melyik úton haladt anélkül, hogy a részecskék  $|\Psi_1\rangle$  és  $|\Psi_2\rangle$  hullámfüggvényét megzavarnánk. Ez a Hilbert-tér alábbi kiterjesztését jelenti:

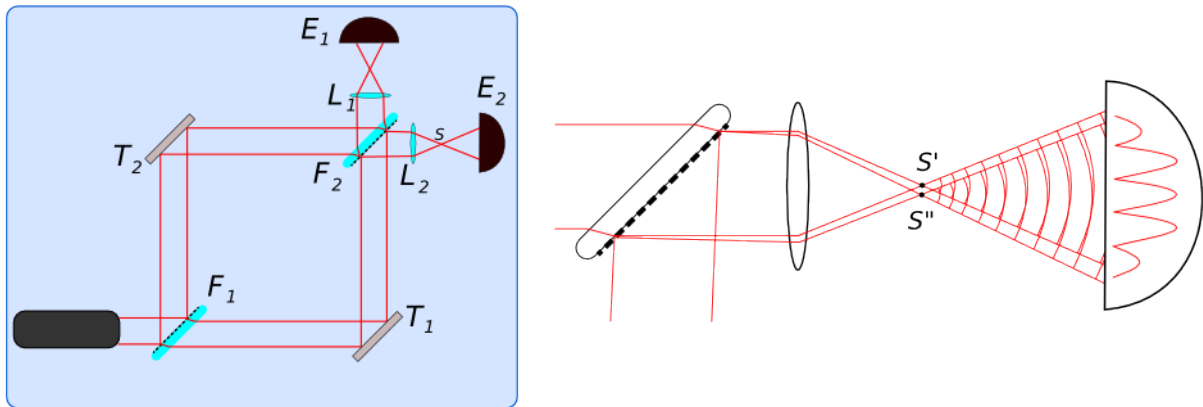
$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\Psi_1\rangle |M_1\rangle + |\Psi_2\rangle |M_2\rangle], \quad (15.2)$$

ahol  $|M_j\rangle$  az útvonaljelölő sajátállapotai. A fenti kifejezés azt jelenti, hogy az útvonaljelölő berendezés állapotai összefonódnak a két lehetséges részecske útvonallal (állapottal). Ahhoz, hogy az útvonaljelölő segítségével 100%-os bizonyossággal megmondhassuk, hogy a részecske az 1 vagy 2 úton haladt, az útvonaljelölő  $M_1$  és  $M_2$  állapotai ortogonálisak kell legyenek. Ha végrehajtjuk az  $M$  mérést, akkor a  $\Psi$  hullámfüggvény egyszerűen a mérés eredményének megfelelő 1 vagy 2 állapotba ugrik be. A két állapot ortogonalitásából pedig rögtön következik, hogy az interferenciáért felelős kereszttagok lenullázódnak. Fontos hangsúlyozni, hogy az interferencia már akkor eltűnik, ha az elvi lehetősége megvan annak, hogy kitaláljuk az útvonalat, nem volt szükséges a mérést végrehajtani, és nincs is megfigyelőre szükség! Ez a folyamat megszünteti az interferenciát, de az a szép az egészben, hogy nem vezet dekoherenciára. Ha a mérést kiegészítjük egy újabb berendezéssel, ami valamilyen módon úgy összekeveri az útvonaljelölő állapotait, hogy nem tudjuk többé megmondani, hogy a részecske melyik útvonalat választotta, akkor az interferencia helyreáll. Optikai kísérletekben útvonaljelölő berendezésként általában kereszttezett polárszűrőket alkalmaznak, ami elvileg az ernyőre becsapódó részecskék polarizációjának mérése által lehetővé teszi azt, hogy megmondjuk honnan érkezett a részecske. Ha az ernyő elé egy olyan polárszűrőt helyezünk, ami a két polárszűrő irányának felezőjébe mutat, akkor ez az információ elvész (kiradíroztuk) és az interferencia helyreáll.

### 15.3. Mach–Zehnder-interferométer

A Mach–Zehnder-interferométer egy fontos kísérleti eszköz, amelyet elsősorban a plazmafizikában és az aerodinamikában alkalmaznak. Segítségével többek közt átlátszó közegek törésmutatóját, a törésmutató nyomásfüggését vagy hőmérsékletfüggését mérhetjük. Áramlási terek megfigyelésére is kiválóan alkalmas. A Mach–Zehnder-interferométer rendkívül egyszerű, felépítése a 15.2. ábrán látható. A lézernyalábot egy féligáteresztő tükörrel kettéosztjuk, majd tükrök segítségével egy másik féligáteresztő tükrön egyesítjük. A kialakuló interferenciaképet ernyőn figyeljük meg. Az egyik útba elhelyezhetjük a mintánkat és az interferenciagyűrűk változásaival nagyon pontosan követhetjük az optikai úthossz megváltozását. Például, a gáz nyomásának változtatásakor számoljuk, hogy egy ponton hány interferencia csík mozog át. Ebből a minta vastagságának ismeretében kiszámolhatjuk a törésmutató nyomásfüggését és végső soron a törésmutatót magát is.

Ennek az elrendezésnek egy változatával akarta Michelson és Morley mérni a fénysebesség megváltozását egy abszolút nyugvó vonatkoztatási rendszerhez képest moz-



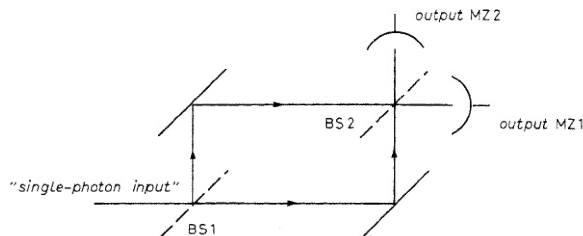
15.2. ábra. Balra: a mérési elrendezés; Jobbra: az interferencia kialakulásának szemléltetése

gónak feltételezett rendszerben. A Michelson-interferométerben a szétválasztott nyalábot ugyanazon a féligáteresztő tükrön egyesítik, mint amelyik azt szétválasztotta. Valójában a Michelson-interferométer egy önmagára visszahajtogatott Mach–Zehnder-interferométerként is felfogható.

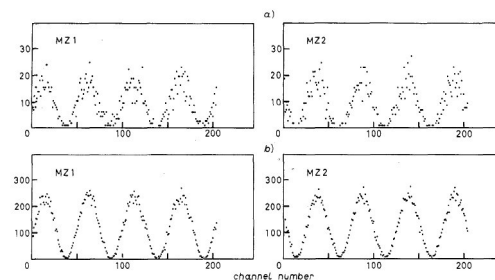
### 15.3.1. Az interferencia gyűrűk eredete

A Mach–Zehnder-interferométerben a lézernyalábot először az  $F_1$  féligáteresztő tükrön két azonos intenzitású nyalábra osztjuk. Ezeket a  $T_1$  és  $T_2$  tükrökkel az  $F_2$  féligáteresztő tükrön egyesítjük. Az egyesített nyalábokat az  $L_1$  illetve az  $L_2$  korrigált gyűjtőlencsékkel az  $E_1$  illetve  $E_2$  ernyőkre képezzük le. A párhuzamos nyalábok az  $S$  fókuszpontban találkoznak. Ez csak akkor teljesül maradéktalanul, ha a nyalábok nem széttartóak és a két ágban haladó sugarak egyesítéskor teljesen párhuzamosan haladnak tovább. Ilyenkor nem keletkezik interferencia mintázat az ernyőn. A sugármenetet követve látható, hogy az  $E_1$  ernyőre érkező nyaláb kétszer haladt át a féligáteresztő lemezen, míg az  $E_2$  ernyőre érkező nyaláb csak egyszer. Minden áthaladáskor  $90^\circ$ -s fázistolás következik be, tehát a két nyaláb között pontosan  $90^\circ$ -s fázistolás lesz, azaz be lehet a rendszert úgy állítani, hogy az egyik ernyőn maximális erősítés, a másik ernyőn teljes kioltás van. Mérti ilyenkor az intenzitások megváltozását lehet az interferométer egyik karjába helyezett minta hatására. Ha a beállítás során a négy visszaverő felület csak nagyjából párhuzamos, akkor az egyesített nyaláb interferencia mintázatot hoz létre. A sugármenet ebben az esetben a 15.2. ábra jobb oldalán látható. A két közel párhuzamos nyaláb az  $S'$  illetve  $S''$  pontokba képződik le. A két pontból kiinduló gömbhullámok – a kétrés kísérlethez teljesen hasonló módon – interferálnak. A csíkok pontos helye több paramétertől függ, a párhuzamos felületek közti szögeltérésektől, vagy a fényforrás kiterjedésétől. Az optikai





(a) A Mach–Zehnder-interferométer vázolata



(b) Grangier és társai mérési eredménye.

15.3. ábra. A rendszer a bal oldalon látható egyfoton forrásból (single-photon input), két féligáteresztő tükörből (BS1, BS2), két tükörből, és a két detektorból (MZ1, MZ2) áll. A féligáteresztő tükörökön bekövetkező fázisfordítás miatt a két detektorra eső jel ellentétes fázisú. Jobbra: a mérési eredmény látható az egyfotonos kísérletben: beütésszám a csatornaszám függvényében. A képek [4] eredeti cikkéből származnak.

úthosszkülönbségek meghatározhatóak és ebből a maximális erősítések és kioltások szögei is kiszámolhatóak. A beállítástól függően  $S'$  és  $S''$  pontokat összekötő szakasz különböző irányban állhat, az interferencia csíkok erre merőlegesen alakulnak ki. Minél kisebb a párhuzamos felületek közti szögeltérés, annál ritkábban lesznek a csíkok, egyezésben avval, hogy a tökéletesen párhuzamos esetben egyáltalán nincsenek csíkok. A tükörök finom hangolásával a csíkok közti távolság – az  $S'S''$  távolságon keresztül – változtatható. Ha az  $L_2$  lencsét eltávolítanánk, akkor is megfigyelhetnénk az interferencia csíkokat, csak az  $S'$ ,  $S''$  források ilyenkor virtuálisak és a végtelenben lennének. Ha az interferométer egyik ágába elhelyezzük a mintánkat, akkor az  $S'$  és  $S''$  források között egy extra fázis különbséget vezetünk be. Ettől még lesznek interferencia csíkok az ernyőn, csak eltolódnak. Az interferencia csíkok eltolódását megfigyelve nagyon pontosan mérhetjük az optikai úthossz megváltozását. Például, ha egy üveglemezt helyezünk az egyik ágba, akkor annak vastagságában egy 0,0002 milliméteres változás azt okozza, hogy a sötét és világos csíkok helyet cserélnek (632.8 nm-es HeNe lézer fényforrást feltételezve).

### 15.3.2. Egyfotonos Mach–Zehnder-kísérlet

A Mach–Zehnder-interferométer fontos jelentőséggel bír a kvantummechanika szemszögéből is: az eredeti Mach–Zehnder-elrendezést számos anyagi részecske hullámtermészetének vizsgálatára is használták. Már Dirac „A kvantummechanika alapjai” című munkájában leírt gondolat-kísérletben arra a következtetésre jut, hogy az egyetlen fotonal végzett, kétutas interferenciakísérletben a foton mindkét úton egyszerre megy, majd találkozva interferál saját magával. Sőt Dirac szerint a sokfotonos esetben is minden egyes foton mindkét úton megy egyszerre, és minden foton csak saját magával interferál.

A gondolkísérletet csak röpké 40 évvel később, 1986-ban sikerült elvégezni: a Grangier és munkatársai által elvégzett mérések teljes mértékben igazolták Dirac feltételezését [4]. A kísérletben a nehézséget egyfelől az egyrészecske forrás jelentette, ugyanis hiába csökkentették le a lézer intenzitását annyira, hogy az átlagos teljesítmény egyetlen foton energiájának töredéke, – mivel a lézerből kilépő fotonok Poisson-eloszlást követnek – ilyenkor is jelentős valószínűséggel lépett ki egyszerre kettő vagy akár még több foton. Ilyen módon nem állítható nagy bizonyossággal, hogy a berendezésben egyszerre csak egy foton tartózkodik. Másfelől a detektorok gyenge hatásfoka (nagyjából a bejövő fotonok 10%-át tudták a kezdeti detektorok érzékelni) is akadályozta a kutatást. Grangier és munkatársai egyfotonos forrásként a  $Ca$ -atom egy kaszkád átmenetét használták, melynek során két foton keletkezik  $\nu_1$  illetve  $\nu_2$  energiával – gyorsan egymás után (a közbenső állapot élettartama rövid, nagyjából 5 ns). Az első fotont triggerként használják, a második fotont egy Mach–Zehnder-interferométer bemenetére vezették (lásd 15.3(a) ábrát). A 15.3(b). ábrán látható csatornánként 1 s illetve 15 s-es adatgyűjtés mellett a detektált fotonok száma a csatornaszám (szög) függvényében. Jól láthatóan megfelelő idejű átlagolás után kirajzolódik az interferenciaképnek megfelelő periodicitás. Az eredmény nagyszerűen igazolta Dirac megfogalmazását, miszerint egyetlen foton is képes önmagával interferálni, és hullámnak mutatkozik egy olyan kísérletben, amely állapotának fázisviszonyaira „kérdez rá”.

### 15.3.3. Kvantumradír kísérlet Mach–Zehnder-elrendezésben

Ez a kísérlet elvileg kiegészíthető polárszűrőkkel oly módon, hogy a kvantumradír jelenség megfigyelhető legyen. Ha az interferométer két ágába keresztezett polárszűrőket helyezünk, akkor a képernyőn az interferencia megszűnik: a becsapódások helye egy diffúz foltot rajzol ki. Az interferencia megszűnése a nagy intenzitású esetben klasszikusan értelmezhető: ha a két nyaláb polarizációja merőleges, akkor a nyalábok nem interferálnak. Az egyrészecskes esetben viszont felfoghatjuk a polárszűrő szerepét úgy, mintha egy címkét ragasztottunk volna a fotonra, amivel megjelöltük, hogy melyik útvonalon haladt. Elvileg az ernyőre érkezéskor megmérhetjük a beérkező foton polarizációját, és ezzel megmondhatjuk, hogy melyik útvonalon haladt át az interferométeren. Azonban a fent leírtak miatt ilyenkor az interferencia eltűnik. Ha az ernyő elé  $45^\circ$ -os szögben elhelyezünk egy polárszűrőt, akkor avval elveszítjük az útvonal-információt, és újra lesz interferencia. Az itteni labormérésben – természetesen – csak a sokrészecskes esetet tudjuk megvalósítani.

## 15.4. Kétfotonos kísérlet

A kétfotonos kísérletek fontossága – az egyfotonos kísérletek technikai nehézségeinek leküzdésén túl – abban rejlik, hogy lehetővé teszik összefonódott kvantumállapotok vizs-

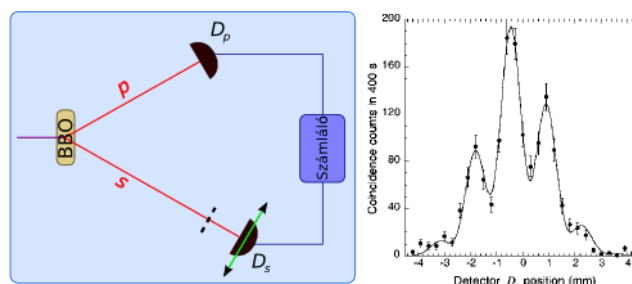
gálatát. A kvantum-összefonódás vizsgálata a kvantummechanika nem-lokális voltát igazolhatja. Az összefonódott állapotokat – eleinte Böhm munkássága nyomán – kizárólag olyan folyamatokban kerestek, ahol egy spin-fel, spin-le elektronpár keletkezett. A továbbiakban a Walborn-féle kvantumradír kísérletsorozat [3] bemutatása nagymértékben követi Prof. Luis Orozco munkáját [5].

### 15.4.1. Parametrikus lekonvertálás

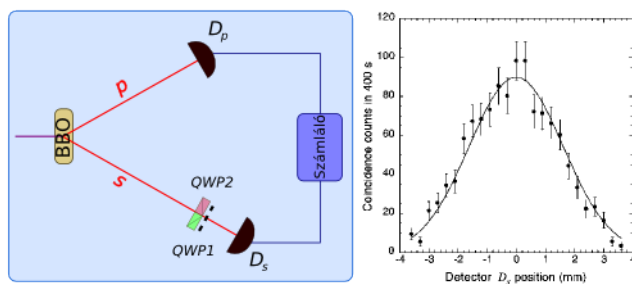
A parametrikus lekonvertálás segítségével lehetővé vált korreláltan polarizált fotonpárok megfigyelése is. Az összefonódott fotonpárok egy különleges nemlineáris kristályon, a béta-báriumboráton ( $\beta$ -BaB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) keletkeznek. Az argonionlézerből kilépő ultraibolya foton (351.1 nm) a kristályon elfeleződik, két nagyobb hullámhosszú infravörös fotonná (702.2 nm). A két foton polarizációja merőleges egymásra, ha az összefonódott pár egyik tagjának a polarizációját mondjuk  $x$ -irányúnak mértük, akkor a másikat is megmérve mindig  $y$ -irányú polarizációt fogunk mérni. A kristályból kilépő két foton külön utakat ( $p$  illetve  $s$ ) jár be a továbbiakban, a 15.4. ábrán látható módon. Innentől a  $p$  ( $s$ ) úton haladó fotonokat  $p$ -( $s$ )-fotonoknak fogjuk nevezni. Interferencia az  $s$ -fotonokkal valósul meg. Az  $s$ -fotonok két résen áthaladva jutnak el a  $D_s$  detektorba, míg a  $p$ -fotonok közvetlenül és hamarabb elérik a  $D_p$  detektort. Ha a  $D_p$  detektor észlel egy bejövő fotont, akkor küld egy jelet a koincidencia számlálónak. A számláló vár addig, amíg a  $p$ -fotonnal összefonódott  $s$ -fotont detektálja a  $D_s$  detektor. (Bár minden  $p$ -fotonnak létezik az összefonódás miatt  $s$ -foton párja, egyáltalán nem biztos, hogy az a  $D_s$  detektor aktuális helyére megérkezik.) Ha a koincidencia számláló megkapja a második jelet is, akkor feljegyez egy becsapódás eseményt. Az eseményeket  $T$  ideig gyűjtötték, majd a  $D_s$  detektort új pozícióba mozgatták, és újabb  $T$  másodpercig gyűjtötték a becsapódás eseményeket. Az ábrákon a becsapódások számát ábrázolták a detektor pozíciójának függvényében. Az így kapott eredmények hasonlóak ahhoz, mintha egy ernyőt helyeztünk volna a rések mögé, és azon figyelnék meg az interferenciaképet. A mérési eredmény a 15.4. ábrán látható, és egyértelműen megfigyelhető az interferenciára utaló periodikus mintázat.

### 15.4.2. Az útvonaljelölő

Az útvonaljelölő megvalósításaként két  $\lambda/4$ -es lemezt (QWP1 és QWP2) helyezünk a rések elé. Ezek a lemezek a rájuk eső lineárisan polarizált fényt cirkulárisan polarizálttá teszik. A két lemez úgy van beállítva, hogy egy adott polarizáltságú bemenet esetén, az egyikén áthaladó foton jobbra cirkulárisan polarizált lesz, miközben a másikon áthaladó balra cirkulárisan polarizált. Ezzel az elrendezéssel az  $s$ -foton bármilyenű megzavarása nélkül kitalálható, hogy az melyik úton ment. Mivel  $s$  és  $p$  egy összefonódott fotonpár, ha azt mérjük, hogy a  $p$ -foton polarizációja  $x$ -irányú, akkor tudjuk, hogy az  $s$ -foton  $y$ -irányban polarizált a  $\lambda/4$ -es lemezek előtt. Az ilyen  $s$ -fotont az egyik rés előtt található QWP1 lemez jobbra cirkulárisan polarizálttá alakít, míg a másik rés előtt található



15.4. ábra. Balra: a mérési elrendezés; BBO a béta-báriumborát kristály,  $D_p$  és  $D_s$  detektorok rendre a  $p$  és  $s$  utakon haladó fotonokat detektálják és továbbítanak egy jelet a koincidencia számláló (Számológ) felé. Jobbra: a becsapódások száma a  $D_s$  detektor pozíciójának függvényében interferencia mintázatot mutat. Az adatgyűjtés itt minden detektor pozícióra  $T = 400$  s-ig tartott. (forrás: Walborn et al. cikk [3])

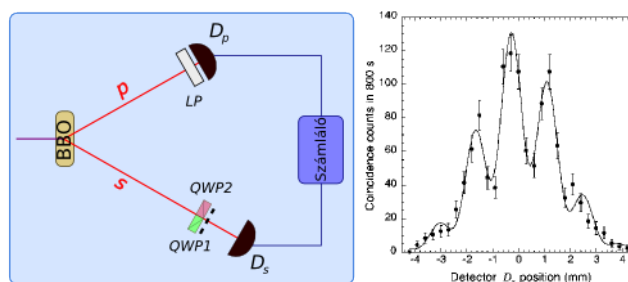


15.5. ábra. Balra: az elrendezést két  $\lambda/4$ -es lemezzel ( $QWP1$  és  $QWP2$ ) egészítették ki. Jobbra: mivel az útvonal meghatározhatóvá vált az interferencia mintázat eltűnt. Forrás: Walborn et al. cikk [3].

$QWP2$  lemez balra körülarisan polarizált fotont enged tovább. Ha a  $D_s$  detektorral a bejövő foton polarizációját mérjük, akkor megállapíthatjuk, hogy az  $s$ -foton melyik résen haladt át. Teljesen hasonlóan érvelhetünk akkor is, ha a  $p$ -foton polarizációját  $y$ -irányúnak találjuk a mérés során.

A  $\lambda/4$ -es lemezek jelenléte lehetővé teszi a megfigyelő számára, hogy információt szerezzen arról, hogy melyik résen ment át az  $s$ -foton. Emiatt az interferencia mintázat eltűnik (15.5. ábra). Nem szükséges, hogy a mérés során a  $D_s$  detektorral ténylegesen megmérjük a beérkező foton polarizációját. Az a pusztán tény, hogy a fotonokat felcímkeztük, már önmagába véve elegendő az interferencia eltűnéséhez.

Ha netán gyanakodnánk, hogy a  $\lambda/4$ -es lemezek rontják el az interferenciát, fontos megjegyezni azt, hogy amennyiben egy fénynyalábbal kétréses kísérletet végzünk, az interferenciakép nem érzékeny a bejövő fény polarizációjára, tetszőleges  $x$ - vagy  $y$ -irányban



15.6. ábra. Balra: a  $p$  útvonalba helyezett lineáris polárszűrővel (LP) kitörölték az útvonaljelölést. Jobbra: az interferencia mintázat ismét megjelent. Forrás: Walborn et al. cikk [3].

lineárisan- illetve jobbra vagy balra cirkulárisan polarizált nyaláb esetén változatlan interferenciaképet kapunk. Továbbá, ha a  $\lambda/4$ -es lemezekkel a fentiek szerint preparált kétrésen egyszerűen polarizálatlan fénnel ismételjük meg a mérést, akkor is látható interferencia. Mégis szembeötlő, hogy a fenti elrendezésben a  $\lambda/4$ -es lemezek megjelenésével az  $s$ -fotonok viselkedése drasztikusan megváltozott. Felmerül a kérdés, hogy honnan tudják a fotonok, hogy most tud(hat)juk, melyik résen mentek át?

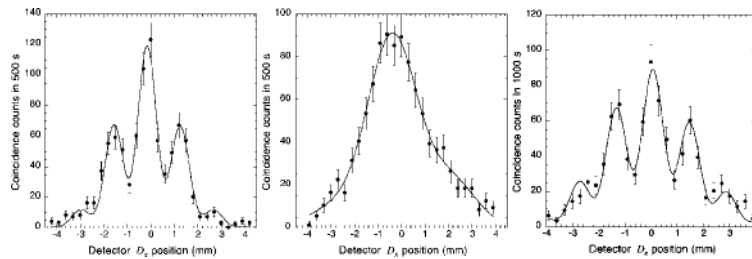
### 15.4.3. A kvantumradír megvalósítása

Ha ez még nem lenne eléggé meglepő a következő lépésben visszahozzuk az interferenciát anélkül, hogy az  $s$ -fotonokkal bármit is tennénk! A  $p$ -fotonok útjába helyezzünk egy polárszűrőt úgy, hogy az az  $x$ - és  $y$ -irányok egy kombinációját (pl.  $45^\circ$ -ban lineárisan polarizálva) adja. Innentől már nem lehetséges megmondani, hogy milyen az  $s$ -fotonok polarizációja a  $\lambda/4$ -es lemezek előtt és imígyen a lemezen és résen áthaladás után sem. Az  $s$ -fotonok már nincsenek felcímkézve. Az az információ, hogy melyik résen haladt át a foton már nem elérhető, kitöröltük. A koincidenca mérést megismételték a polárszűrők jelenlétében és az interferencia mintázat ismét megjelent (15.6. ábra).

Honnan tudja az  $s$ -foton, hogy a  $p$  ágba betettünk egy polárszűrőt? A  $p$ - és  $s$ -foton egy összefonódott párt alkotnak. Azt gondolhatnánk, hogy a  $p$ -foton valamilyen előttünk ismeretlen módon kommunikál az  $s$ -fotonnal, amiből  $s$ -foton tudja, hogy most létrehozhat-e interferenciaképet vagy nem. A következő kísérlet ezt a lehetőséget kizárja.

### 15.4.4. Késleltetett kvantumradír

A kísérlet során eddig a pontig előbb detektáltuk a  $p$ -fotont, majd az  $s$ -fotont. Az útvonaljelölés kitörlése a  $p$  ág megváltoztatásával, majd az  $s$ -fotonok detektálásával történt. Ez az elrendezés arra a józan következtésre vezethet, hogy valamiféle kommunikáció van



15.7. ábra. A késleltetett kvantumradír kísérlet eredménye. Balra: az eredeti elrendezésben látható interferencia mintázat. Középen: a  $\lambda/4$ -es lemezek hatására az interferencia eltűnik. Jobbra: kvantumradírozással az interferencia mintázat ismét megjelent. Forrás: Walborn et al. cikk [3].

a két foton között: a  $p$ -foton jelez, amikor a polárszűrőt eléri, amiből az  $s$ -foton eldönti, hogy létrejöhét-e interferencia vagy nem. Módosítsuk most a  $p$ -ágat úgy, hogy az hosszabb legyen, mint az  $s$ -ág, a  $p$ -fotonok csak azután érnek a  $D_p$  detektorba, hogy az  $s$ -fotont már detektáltuk. A korábbiakhoz hasonlóan most is megjelenik az interferenciakép, amint a 15.7. ábra bal oldalán látható. A  $\lambda/4$ -es lemezek beiktatása ismét tönkreteszi az interferenciát, amint az a 15.7. ábra középső részén látható. Végül a kvantumradírozást is megnézhetjük. Az  $s$ -fotonokat azelőtt detektáljuk, hogy a  $p$ -fotonok eléri a polárszűrőt. Ennek ellenére az interferencia mintázat ismét megjelenik. Úgy tűnik, hogy az  $s$ -foton tudja, hogy a jelölést ki fogjuk törölni, anélkül, hogy a  $p$ -foton valamiféle titkos jelet küldhetett volna számára. Mi történt most? Nyilván semmi értelme sincs feltételezni, hogy a  $p$ -foton messziről észrevette a polárszűrőt, és azelőtt küldött az  $s$ -fotonnak jelet, hogy elérte azt. Ha mégis, akkor akár  $s$ -foton maga is észlelhetné messziről a  $p$  ágban lévő polárszűrőt. Abszurd ez a felvetés!

Természetesen ez az összefonódás-dolog sokkal fontosabb szerepet tölt be, mint azt korábban gondoltuk. A két foton összefonódott állapotban van. Egy speciális kapocs van közöttük, nem számít, hogy mennyire távolodtak el egymástól. Az is kiderült, hogy ezek az összefonódott fotonok egy összefonódott kapcsolatba kerülnek a  $\lambda/4$ -es lemezekkel és a polárszűrővel is.

#### 15.4.5. Felfogni a felfoghatatlant

Ebben a kísérletben nyilvánvalóvá vált, hogy az  $s$ -fotonok interferenciáját az útjelölő rontotta el, de a felcímkézés kitörlésével, az összefonódott foton pár  $p$ -foton tagján végzett manipulációval az interferencia helyreállítható.

Ebben az elrendezésben az útvonaljelölő nem változtatja meg a foton impulzusát, vagy helyzetét. Az interferencia eltűnése annak köszönhető, hogy a két foton összefonódott és a  $\lambda/4$ -es lemezek megjelenése megváltoztatta az összefonódást. Az interferencia

mintázat helyreállítható a kvantumradírozással, a fotonok összefonódása valamint a  $\lambda/4$ -es lemezek és a polárszűrő ezen összefonódásra gyakorolt hatásának módja miatt.

Az összefonódás jelenségével nem találkozunk a hétköznapi életben. A lokális feltevése nem érvényes az összefonódott állapotokra olyan formán, ahogy a mindennapi életben megszoktuk. Megszoktuk, hogy a dolgoknak van egy adott helye, megadható, hogy itt vannak és itt nincsenek. Sosem tapasztalunk olyat, hogy valami két helyen van *egyszerre*. Mindez lehetséges a kvantumrészecskék világában! A két foton egy összefonódott állapotban akkor is összetartozik, ha kozmikus távolságra eltávolodnak egymástól. Ebben a kísérletsorozatban minden mérés során megváltozott a fotonok összefonódása. Ez okozta a gyakran meglepő megfigyeléseket. Szeretjük azt gondolni, hogy a  $p$ -foton itt van, az  $s$ -foton pedig valahol máshol – tőle elválasztva. De ez nem így van. Úgy kell gondolkodnunk erről a szituációról, ami ellentétes a makroszkopikus világban szerzett mindennapi tapasztalatainkkal. Az összefonódás nagyon fontos szerepet játszik a kvantumrészecskék világában, teljesen új módokon kell róla gondolkodnunk.

Ez a kvantumradír kísérlet egy a sok kísérlet közül, amellyel bepillanthatunk a kvantummechanika különös világába. A kísérlet értelmezése során olyan különleges fogalmakkal találkozunk, mint összefonódás vagy nem-lokális elmélet [1, 2]. Befejezőként pedig álljon itt Richard Feynman velős megállapítása és annak Patkós András féle kibontása [2]:

*Fokozódnak a kételyei? Követheti a Feynmannak tulajdonított velős megfogalmazású stratégiát: "Shut-up and compute!"*

*Bármily furcsa is legyen, ez a tanács a lehető legépítőbb. Egy szokatlan elmélet folyamatos használata legalább olyan szemléletformáló, mint egy vadonatúj orvosdiagnosztikai eszköze vagy egy új hullámhossztartományban észlelő csillagászati távcsőé. Tapasztalatot szerezve velük a megszokott eszközeinkkel értelmezhető jelenségek határán, szinte észrevétlenül alakítja képzeletünket és egy-két nemzedék múltán szemléletesnek találunk olyan helyzeteket, amelyek komikusan ellentmondásosnak tűntek fél évszázaddal korábban.*

*Tehát Feynmant értelmezzék talán így: "Kvantumfizikai számolásokkal, kísérletek ki-találásával tornáztassák képzeletüket és reménykedjenek!"*

## 15.5. Számolási feladatok

- Az interferenciagyűrűk távolságából becsüljük meg a Mach–Zehnder-elrendezésben a két nyaláb párhuzamosságának hibáját (a két nyaláb által bezárt szöget)!

Interferenciaképek erősségének jellemzésére szolgál az ún láthatóság paraméter (visibility), aminek a definíciója:

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}},$$

ahol  $I_{\max}$  és  $I_{\min}$  rendre az intenzitásmaximumokat illetve -minimumokat jelöli.

- Feltételezve, hogy a két úton a lézer polarizációjához képest  $\pm\varphi$  szöget zárnak a polarizátorok, mutassuk meg, hogy a láthatósági paraméterre a

$$V(\varphi) \approx \cos(2\varphi)$$

összefüggés teljesül!

- A merőlegesen polarizált esetben mutassuk meg, hogy amennyiben a kvantumradírként használt harmadik polárszűrő  $\alpha$  szöget zár be a lézer polarizációs irányához képest, akkor a láthatósági paraméterre a

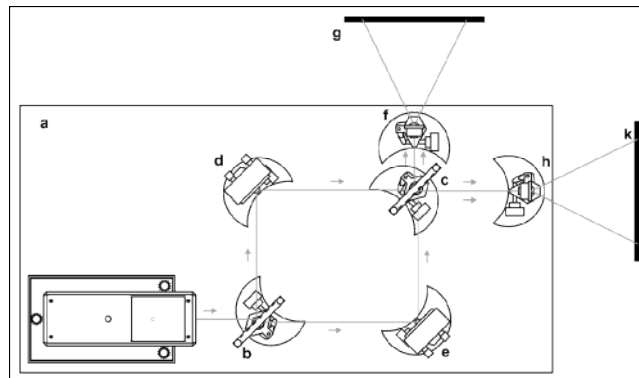
$$V(\alpha) \approx \cos(2\alpha)$$

összefüggés teljesül!

## 15.6. Gyakorló kérdések

1. Mik az összefonódott kvantumállapotok?
2. Mi a BBO-kristály és mit csinál?
3. Mit tanulhatunk meg a kétréses kísérletekből?
4. Hogyan alakul ki interferenciakép az egyfotonos kísérletben?
5. Hogyan értelmezhető az interferencia egyfotonos kísérletekben?
6. Miért lesznek interferenciagyűrűk a Mach–Zehnder-interferométer elrendezésben?
7. Miért tűnik el az interferencia, ha a polárszűrővel megjelöljük a fotonokat?
8. Hogy működik a kvantumradírozás?
9. Mit jelent a késleltetett kvantumradírozás és mi a jelentősége a kísérletnek?
10. Rajzolja le egy Mach–Zehnder-interferométer vázlatát!
11. Mitől függ az interferenciagyűrűk távolsága?
12. Soroljon fel három fénypolarizációs állapotot!
13. Egy polárszűrőre lineárisan polarizált nyaláb esik. Hogyan függ az átmenő fény intenzitása a polárszűrő és az eredeti polarizációs irány szögétől?
14. Rajzolja le a sugármenetet a többszörös visszaverődések figyelembevételével, ha a nyaláb a tükör foncsorozott oldalának irányából/avval ellentétesen esik rá!





15.8. ábra. A mérési elrendezés műszaki rajza. Forrás: Leybold Optics.

## 15.7. Mérési feladatok

Biztonsági figyelmeztetés: A He-Ne lézer megfelel a német műszaki szabvány "Biztonsági követelmények Oktatási és Képzési eszközök - Lézer, DIN 58126, 6. rész" a 2-es osztályú lézerek kategóriában foglaltaknak. A használati utasításban leírt óvintézkedések betartásával a He-Ne lézerek használata nem veszélyes. • Soha ne nézzen közvetlenül a direkt vagy visszavert lézersugárba! • Ne lépje túl a vakítási határt (azaz a megfigyelő számára kellemetlen fényességet.)

1. Ismerkedés a mérési berendezéssel.
2. Mach-Zehnder-interferométer összeállítása.
3. MZ kiegészítése polárszűrőkkel, az interferencia megszűnésének demonstrálása.
4. Az útjelölő polárszűrők szögének függvényében az interferencia gyűrűk kontrasztjának mérése (10 pontban, fényképezéssel).
5. Kvantumradírozás a kimeneti polárszűrő felhelyezésével.
6. Kimeneti polárszűrő szögének függvényében az interferencia gyűrűk kontrasztjának mérése (10 pontban, fényképezéssel).

### 15.7.1. Praktikus tanácsok

- A mérési feladatokat a megadott sorrendben végezzük el!
- Kapcsoljuk be a lézert! Az egyik lencsét a lézer útjában mozgatva ellenőrizhetjük, hogy a lézernyaláb vízszintesen indul-e.

- Az optikai eszközök állításához a csavarokat mindig lazítsuk meg, majd a kívánt változtatás után ne felejtsük el újra rögzíteni azokat.
- Ne hagyjunk optikai eszközt az asztal szélén, ahol azt véletlenül lelökhetjük!
- A két féligáteresztő tükröt egymás után a lézer útjába helyezve ellenőrizzük, hogy a többszörös visszaverődésekből származó pontok függőleges eltérése minimális. A féligáteresztő tükrök állításához kérjük a mérésvezető segítségét!
- A féligáteresztő tükrökön a többszörös visszaverődések intenzitásviszonyából megállapítható, hogy melyik a tükör foncsorozott oldala.
- A síktükröket a hátoldalon lévő csavar segítségével dönthetjük addig, amíg a fényt teljesen vízszintesen verik vissza. Ezt a lézer kimeneti nyílásába visszavert nyalábbal ellenőrizhetjük.
- A mérési elrendezést félig elsötétített szobában érdemes összeállítani.
- Helyezzük a lézert a hozzánk közelebb eső optikai pad bal oldali végéhez közel.
- A féligáteresztő tükröt (b) helyezzük  $45^\circ$  szögben a lézer útjába úgy, hogy a foncsorozott felület a lézer felé legyen!
- A többszörös visszaverődés miatt a fősugármenet mellett megjelennek kisebb intenzitású ún. parazita sugarak. A mérést a fősugármenettel végezzük! A többi nyalábot a lencsetartók (f,h) fogják kiszűrni.
- Helyezzük az egyik síktükröt (d) a visszavert nyaláb útjába úgy, hogy a lézernyaláb  $90^\circ$  szögben verődik róla vissza, és a másik nyalábbal párhuzamos!
- Helyezzük a másik síktükröt (e) a másik nyaláb útjába úgy, hogy a lézernyaláb  $90^\circ$  szögben verődik róla vissza. Figyeljünk arra, hogy elég helyet hagyjunk az optikai pad jobb oldalán a lencse talpának és egy polárszűrőnek (kb 10 cm)!
- Állítsuk a helyükre az áttetsző ernyőket (g,k)!
- Tegyük a helyére a másik féligáteresztő tükröt (c) ellentétesen az elsővel (b).
- A síktükrök eltolásával hozzuk fedésbe a két nyalábot a második féligáteresztő tükrön (c), és az ernyőkön!
- Az ernyőt közelítve-távolítva az ernyőre eső pontoknak többé-kevésbé fedésben kell maradnia.

- Ha ezzel a beállítással végeztünk, akkor helyezzük a nyaláb útjába az (f,h) lencsét. Szükség esetén állítsunk a lencsetartók magasságán! Hagyjunk elég helyet a lencse (h) és a féligáteresztő tükör (c) között a polárszűrő számára! A lencsék fókusztávolsága a megadott gyári adat szerint  $f = 2,7$  mm.
- Ha nem jelentek meg az előző lépés után a képernyőn az interferencia csíkok, akkor a síktükrök finomhangolásával (síktükör hátoldalán található csavarok tekerésével) próbálkozhatunk. Ha a finomhangolás közben a pontok teljesen eltűnnek a beállítást előlről kell kezdeni.
- Az interferenciaképek fényképezését teljesen elsötétített szobában érdemes végezni.

## 15.8. Ajánlott irodalom

- [1] Geszti Tamás, „*Kvantummechanika*”, Typotex Kft, Budapest, (2007).
- [2] Patkós András, „*Bevezetés a kvantumfizikába: 6 előadás Feynman modorában*”, Typotex Kft, Budapest, (2012).
- [3] S. P. Walborn, M. O. Terra Cunha, S. Pádua, and C. H. Monken, Phys. Rev. **A 65**, 033818, (2002).
- [4] P. Grangier, G. Roger and A. Aspect, Europhys. Lett. **1** 173 (1986).
- [5] L. Orozco, „*A Double-Slit Quantum Eraser Experiment*”, jegyzet, <http://grad.physics.sunysb.edu/~amarch/> (2002).

## 16. fejezet

# Diffúzió (Szabó Bálint)

### 16.1. Bevezetés

A mérés célja, hogy megismerkedjünk a diffúzió jelenségével és ennek során egy olyan optikai módszerrel, melynek segítségével viszonylag egyszerűen meghatározható egy só diffúziós állandója. Diffúzió akkor lép fel, amikor egy rendszerben inhomogenitás van, a rendszer egyes komponenseinek térbeli eloszlása nem egyenletes. Ilyenkor az egyensúlyi állapot kialakulása anyagáramlással jár együtt és ezt a folyamatot nevezzük diffúziónak. A diffúzió mérése során tehát ezt az anyagáramlást kellene vizsgálnunk, a kísérleti módszerek azonban egyszerűbbek, ha ehelyett a nem-egyensúlyi állapot koncentráció-eloszlásának időbeli változását követjük nyomon. Általában a diffúzió nem vákuumba történő anyagáramlásként jelenik meg, hanem a vizsgálandó — inhomogén eloszlású — anyag egy háttérként jelenlévő közegben mozog (oldószerben), így a mérendő fizikai paramétereknek csak relatív, az adott oldószerhez viszonyított értékei játszanak szerepet. A (diffúzió méréset tehát a lokális koncentráció időfüggésének mérésére vezethetjük vissza. Bármely fizikai mennyiség, mely a koncentráció egyértelmű függvénye, alkalmas a koncentráció mérésére. Leggyakrabban erre a célra optikai módszereket szoktak használni: Ha a vizsgálandó anyag a viszonylag kényelmesen detektálható hullámhossztartományban jól mérhető abszorpcióval rendelkezik és ugyanezen a hullámhosszon a közeg extinkciója ettől lényegesen különböző, a Beer—Lambert törvény alapján a kérdéses koncentráció könnyen és pontosan meghatározható (például a vizsgálandó anyag színes). Ilyenkor az inhomogenitás tartományát leképezzük és az egyes képpontokba beeső fényintenzitást határozzuk meg fotográfiai, vagy fotoelektromos detektálással. A kapott fényintenzitás-eloszlás időbeli változása adja meg a koncentráció-eloszlás változását. Ha az abszorpcióra vonatkozó feltételünk nem áll fenn, olyan optikai módszert kell választanunk, melynél például az anyag törésmutatóját (a fény relatív terjedési sebességét) detektáljuk. Az oldott anyag jelenléte megváltoztatja a fény terjedési sebességét, így a törésmutató lokális értékét. Első közelítésben feltehetjük, hogy a törésmutató vál-

tozása arányos az adott helyen lévő koncentrációval. Ha tehát a törésmutató lokális eloszlását mérjük, ezzel az oldott anyag koncentrációjának hely szerinti eloszlását határozhatjuk meg. A méréshez felhasználhatjuk a fény optikai úthosszának különbségéből kialakuló interferenciát (Rayleigh-módszer), vagy az anyagon áthaladó fény hullámfrontjának deformációjából származó eltérést (árnyék-, vagy más néven Schlieren-módszer). A kialakult egyensúlyi állapotban is lehetőség van a diffúzió mérésére, ilyenkor ugyanis a véletlenszerűen megjelenő sűrűségfluktuációk időfüggése teszi lehetővé a diffúziós állandó mérését. A sűrűségfluktuációk jelenléte miatt az anyagon áthaladó fény szóródik, a szórt fényben megjelenő időbeli fluktuációk mérése lehetővé teszi a szóródást okozó sűrűség-ingadozások időbeli leírását és ennek alapján a diffúzió vizsgálatát. (Az eljárás során (dinamikus fényszórás) a szórt fény frekvencia-modulációjának mérésével vizsgáljuk a szóró objektumok relaxációját.) Ha a diffundáló anyag az oldószerben ionokká disszociál és az ellentétes töltésű ionok különböző mozgékonyaságúak, a diffúziós áramlás elektromos tér kialakulásával jár együtt, melytől származó feszültséget — a diffúziós potenciált — detektálva, a diffúzió mérhető. A laboratóriumi gyakorlat során a desztillált vízre rétegezett, különböző koncentrációjú  $ZnSO_4$ -oldatokból a cink-szulfátnak vízbe történő diffúzióját vizsgáljuk. Az így kialakított elrendezésben a diffúzió az elválasztó felületre merőlegesen, egydimenziós folyamatként írható le. A kialakuló koncentráció- gradienst optikai úton, a Schlieren-módszer segítségével detektáljuk és e gradiens időbeli változásának meghatározásával számítjuk ki a  $ZnSO_4$  diffúziós állandóját az adott kiinduló koncentráció esetében.

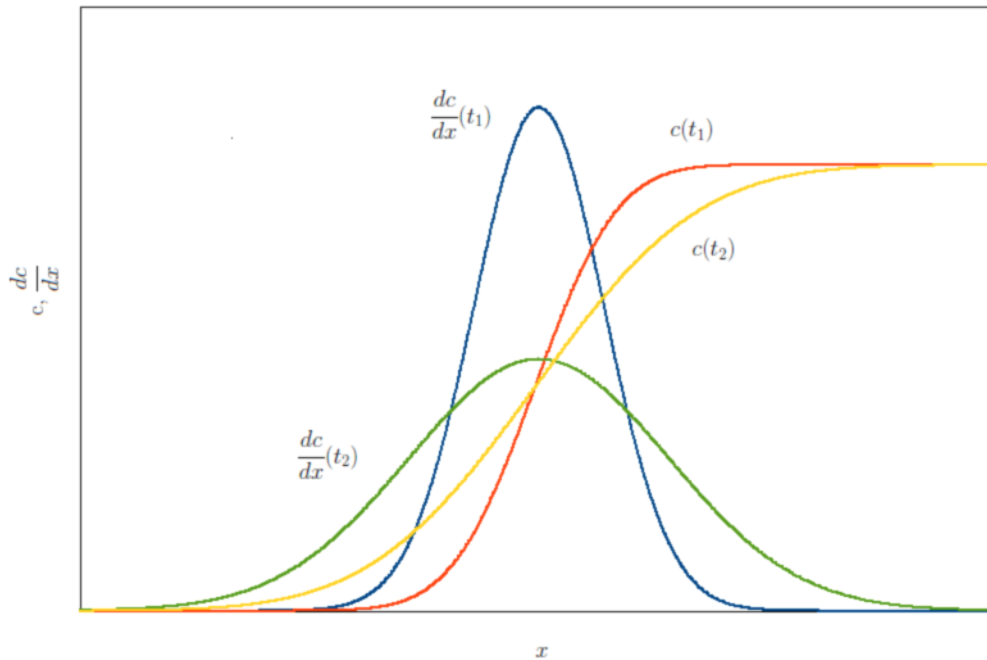
### 16.1.1. A diffúziós együttható és mérése

A diffúzió folyamatát a Fick-törvények írják le. Ha Fick második törvényét egy kétkomponensű rendszerre alkalmazzuk, (ebben egyik komponens az oldószer, a másik az oldott anyag, melynek diffúzióját kívánjuk vizsgálni) és olyan kísérleti elrendezést választunk, ahol a diffúzió csak az egyik koordináta irányában lép fel, akkor a vizsgálandó anyag  $c(x, t)$  koncentrációjára fennáll, hogy

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right). \quad (16.1)$$

Állítsuk be a kísérleti körülményeket olyanra, hogy az  $x = 0$  helyen és a  $t = 0$  pillanatban éles határfelület legyen az egymásba diffundáló két folyadékoszlop között és legyenek a folyadékoszlopok olyan hosszúak, hogy a kiindulási határfelülettől elegendően nagy távolságra a koncentrációk időfüggése (a mérésünk ideje alatt) elhanyagolható legyen. Ebben az esetben az ún. "szabad diffúzió"-ról szokás beszélni, amikor is a (16.1) egyenlet megoldása (lásd 16.1. ábrát):

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \left( 1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\xi \exp(-s^2) ds \right), \quad (16.2)$$



16.1. ábra. A koncentráció és a koncentráció-gradiens a diffúzió irányában. A  $t = 0$  időpontban az oldott anyag koncentrációja csak  $x > 0$  értéknél különbözik nullától. Az ábrán a  $t = 0$  állapot helyett a  $t_1 > 0$  és  $t_2 = 4t_1$  időpontokhoz tartozó görbéket mutatjuk.

ahol  $\xi = x/\sqrt{4Dt}$ ,  $c_0$  — a kiindulási koncentráció-különbség, azaz a  $t = 0$  időpontban minden  $x < 0$  helyen  $c(x) = c_0$ . A koncentráció-gradiens hely- és időfüggése a (16.2) egyenletből:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{T,p} = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right). \quad (16.3)$$

Könnyen belátható, hogy a (16.3) függvény egyetlen maximummal rendelkezik, mely az  $x = 0$  helyen adódik és értéke:

$$M = \frac{\partial c}{\partial x}_{x=0} = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi Dt}}. \quad (16.4)$$

A kiindulási,  $c_0$  koncentráció pedig a görbe alatti területtel áll kapcsolatban:

$$F = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial c}{\partial x} dx = c_0. \quad (16.5)$$

A fenti két összefüggés segítségével:

$$\frac{F}{M} = 2\sqrt{\pi Dt}. \quad (16.6)$$

Mérésünk szempontjából ebből arra a következtetésre jutunk, hogy ha sikerül az  $F/M$  mennyiséget meghatározni, akkor ennek négyzetét az idő függvényében ábrázolva egy olyan egyenest kapunk, melynek meredekségéből a  $D$  diffúziós állandó kiszámítható. A diffúziós állandó függ a hőmérséklettől és a koncentrációtól, ugyanis a Fick-törvény levezetése során a következőképp definiáljuk:

$$D = L\left(\frac{\partial\mu}{\partial c}\right)_{T,p}, \quad (16.7)$$

ahol  $L$  - az anyagáramlás fluxusa és a kémiai potenciál gradiense közötti lineáris kapcsolat arányossági tényezője (általánosított vezetőképesség),  $\mu$  - a kémiai potenciál. Ideális híg oldatokra ebből:

$$D = L\frac{RT}{c}\left(1 + c\frac{\partial\ln y}{\partial c}\right), \quad (16.8)$$

ahol  $R$  — az univerzális gázállandó,  $T$  — a hőmérséklet,  $y$  — az aktivitási együttható, melynek értéke ideális gáz esetében 1, és ettől az értéktől való eltérései pedig az oldat vagy a gáz ideális állapottól való eltérését jellemzik. Ha bevezetjük az egy molekulára ható súrlódási erő együtthatóját ( $f$ -et, melynek reciproka a mozgékonyág), akkor:

$$L = \frac{c}{N_A f}, \quad (16.9)$$

ahol  $N_A$  az Avogadro-szám, és ezzel a diffúziós együttható:

$$D = \frac{kT}{f}\left(1 + c\frac{\partial\ln y}{\partial c}\right). \quad (16.10)$$

Az  $f$  együttható a diffundáló molekulák méretének és alakjának függvénye, tehát mérésével (elsősorban makromolekulák esetében) e jellemzőkre lehet adatokat nyerni. Mint a bevezetőben említettük, méréseinket egyszerű sók (pl.  $ZnSO_4$ ) vizes oldallal fogjuk végezni, a sóoldat és a tiszta víz diffúzióját vizsgáljuk. Szigorúan véve ez a rendszer négykomponensű, mert közismerten a só valamilyen mértékig disszociál a vízben, azaz esetünkben a következő komponensek lesznek:  $H_2O$ ,  $ZnSO_4$ ,  $Zn^{2+}$   $SO_4^{2-}$ . Azt, hogy ilyen esetben alkalmazhatók a kétkomponensű rendszer diffúziójára vonatkozó megfontolások, a következő körülmények teszik lehetővé:

1. A só disszociációjának sebessége sokkal nagyobb, mint a diffúzió sebessége, tehát a diffúzió során joggal tételezhetjük fel, hogy a lokális disszociációs egyensúly már beállt.



2. A disszociált ionok között fellépő elektrosztatikus erő nem teszi lehetővé az egyes ionok önálló mozgását.

A fentieket végiggondolva beláthatjuk, hogy ebben az esetben az egyes ionok vándorlási sebessége megegyezik egymással és a disszociálatlan molekulákéval.

### 16.1.2. A diffúzió vizsgálata Schlieren-módszerrel

Vizsgáljuk meg, mi történik, ha párhuzamos fénynyalábot ejtünk egy olyan közegbe, melyben a törésmutató a megvilágítás irányára merőlegesen változik. A hullámfront minden pontban a lokális fénysebességgel fog mozogni. Mint a 16.2 ábrán látható, ez esetünkben azt jelenti, hogy a fénysugár azokon a helyeken, ahol a törésmutató változik, eltérül eredeti irányától. Az eltérülés mértéke a törésmutató gradiensevel lesz arányos. Egyszerűen belátható, hogy az eltérülés szöge nem túlságosan vastag réteg esetében:

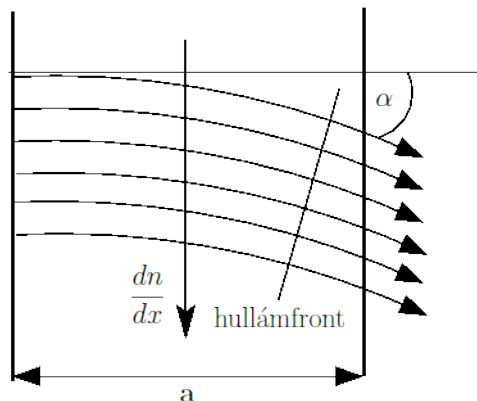
$$\alpha = a \frac{dn}{dx}, \quad (16.11)$$

ha az  $x$ -tengelyt a törésmutató gradiensenek irányába vesszük fel,  $a$  pedig az inhomogén réteg vastagsága. A (16.11) összefüggés alapján a törésmutató gradiensenek mérését visszavezettük az optikai tengellyel párhuzamosan beeső fény eltérülési szögének meghatározására. Ha a beeső párhuzamos, sík hullámfrontú nyaláb az optikai tengellyel nem túlságosan nagy (paraxiális közelítés)  $\alpha$  szöget bezárva esik be, a lencséről kilépő nyaláb egy ponton halad keresztül és e pont a lencse fókuszsíkján van, távolsága a fókuszponttól:

$$r_\alpha = f \operatorname{tg} \alpha, \quad (16.12)$$

ahol  $f$  a lencse fókusztávolsága.

A fókuszsík ezen pontjából tehát egy olyan divergens nyaláb indul ki, melynek divergenciáját a beeső párhuzamos nyaláb keresztmetszete határozza meg. A Schlieren- (árnyék-) módszer lényege, hogy a párhuzamos fénynyalábok bármelyikét a fókuszsíkon ki lehet szűrni a teljes fényből és ha az így megszűrt fény segítségével képezzük le a párhuzamos nyalábok forrásaként szolgáló tárgyat, akkor a képen sötét árnyékként jelennek meg azok a tartományok, melyektől származó fényt kiszűrtük. A szűrés feltételeként a (16.12) összefüggést használva, a képen sötéten (fény nélkülien, vagy fényszegényen) jelennek meg azok a területek, melyekről az optikai tengellyel párhuzamosan beeső fényvel történő megvilágítás után az anyagon áthaladt (és a lokális törésmutató gradiensevel arányosan eltérült) fény éppen  $\alpha$  szöggel térült el. Az eljárást ezzel a feltétellel használva, leképezhetjük a tárgy (vizsgálandó objektum) keresztmetszetében fellépő törésmutató inhomogenitásokat. Az eljárást kisebb vagy nagyobb tárfogatokban fellépő, sűrűség-inhomogenitást eredményező folyamatok vizsgálatára lehet használni. (Például gázokban vagy folyadékokban kialakuló, termikus vagy kényszerített áramlási viszonyok esetén.)

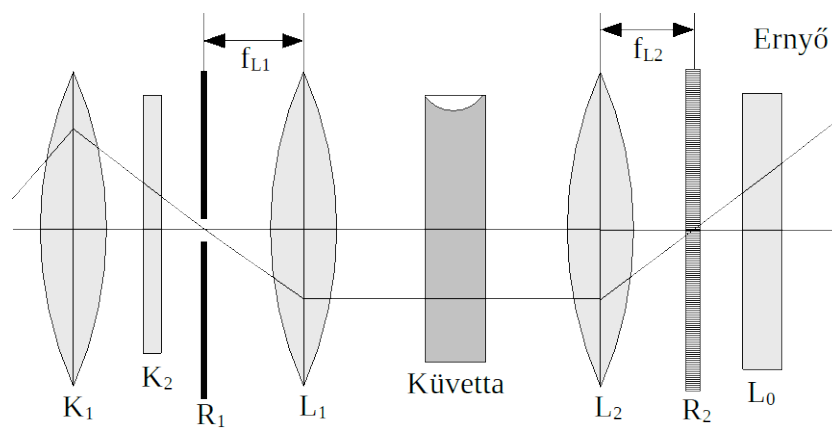


16.2. ábra. A fénysugarak  $\alpha$  szöggel való eltérülése a törésmutató  $\frac{dn}{dx}$  gradiensen az  $a$  vastagságú rétegen való áthaladáskor

## 16.2. A mérőberendezés és a mérés

A mérőberendezésben a vizsgálandó objektum egy olyan, két párhuzamos üveglappal határolt küvetta, melyben az alulra rétegezett sóoldat és a felette elhelyezkedő vízréteg között a diffúzió eredményeként (ideális esetben) csak függőleges irányban van koncentráció- (és ennek megfelelően törésmutató-) gradiens. A rendszer megvilágítása olyan fénnel történik, melynél a fénynyaláb függőleges irányban párhuzamos, míg a vízszintes síkban enyhén divergens lehet. Ezt egy olyan fényforrással állítjuk elő, mely egy vízszintesen elhelyezett résből és ettől fókusztávolságra elhelyezett lencséből ( $L_1$ ) áll. A lencse utáni térben függőleges irányban vizsgálva a fényt, síkhullám-frontúnak adódik, míg a vízszintes síkban a rés méretétől függő mértékben divergens, azaz a hullámfront henger-szimmetriát mutat. (Ahhoz, hogy a rés elég szélesen legyen megvilágítva, a vetítőlámpa leképező rendszere egy hengerlencsét ( $K_2$ ) is tartalmaz.)

Kövessük nyomon a 16.3. ábrán feltüntetett optikai rendszerben egy kiválasztott fénynyaláb útját! Az  $L_1$  lencse utáni tér a kívánt tulajdonságú (azaz hengerszimmetrikus) fénnel van megvilágítva. Ha ide helyezzük el a küvetta, akkor a benne függőleges irányban kialakult sűrűség-gradiens miatt a beeső fény a függőleges síkban eltérül, és az optikai tengellyel a gradiens nagyságával arányos szöget zár be. A küvetta után elhelyezett  $L_2$  lencse a ráeső párhuzamos fénynyalábokat a fókuszsíkjába képezi le a fentebb említett leképezési szabályok szerint. A vízszintes metszetben — miután itt nincsen eltérülés — a két lencse egy teleszkopikus rendszert valósít meg, mely a megvilágító rés képét állítja elő (a teleszkopikus rendszer nagyításának megfelelő méretben). Függőleges met-



16.3. ábra. A mérőberendezés függőleges síkbeli metszete.  $K_1$  és  $K_2$  a kondenzor-lencsék.  $R_1$  a vízszintes megvilágító rés,  $R_2$  a forgatható rés,  $L_1$  és  $L_2$  a teleszkopikus rendszert alkotó lencsék,  $L_0$  a leképező hengerlencse

szetben azonban a küvettában lévő inhomogenitás következtében a fénynyalábok közül azok, melyek inhomogén tartományokon haladtak keresztül, természetesen eltérülnek, és így a megvilágító rés képe nem a fókuszponton átmenő, vízszintes egyenes lesz, hanem az eltérülés mértékével arányosan a fókuszpont alá (esetünkben a törésmutató függőlegesen lefelé növekszik) képeződik le, a rés képe tehát mintegy "megnyúlik" függőlegesen lefelé. Gondoljuk meg, tulajdonképpen milyen fényintenzitás-eloszlást kapunk ezen a síkon ( $R_2$ )! Az el nem térült fény a fókuszpont magasságában a megvilágító rés képét alakítja ki. E kép alatt folyamatosan változó eltérülés miatt az egyes elemi fénynyaláboktól származó résképek folyamatosan egymás alatt helyezkednek el, a maximális eltérülésű nyaláb adja a legalacsonyabban kialakuló résképet, míg e felett a növekvő, majd ismét csökkenő eltérülések miatt két réskép rakódik egymásra. (Az eltérülés nem a koncentráció-eloszlással, hanem a koncentráció gradiensevel arányos, ami a teljes tartományon kétszer veszi fel ugyanazt az értéket!) A Schlieren-módszer lényegét adó szűrést a fókusz síkban célszerű végeznünk. Ebben a síkban elhelyezünk egy, az optikai tengely körül forgatható részt. Forgassuk el ezt a részt a függőlegeshez képest valamilyen szöggel! Ekkor a rés mögött az eltérületlen fénynyalábtól származó fény az optikai tengely vonalában lép ki, míg az optikai tengely alatt a rés elforgatási szögével arányosan, a függőlegeshez képest oldalirányból. Ennek következtében, ha a küvetta képét kívánjuk előállítani, és ehhez az  $L_2$  lencsén kívül egy hengerlencsét is igénybe veszünk, akkor a küvettában függőleges irányban eltérült fényre a hengerlencse az oldalirányú eltérülést nagyítani fogja a leképezés során. Végeredményként a fénynyaláb a forgatható rés szélességétől és a lencsék leképezésétől függő vonalszélességgel a törésmutató gradiensenek képét alakítja ki, természetesen az anizotrop nagyításnak megfelelően. A mérés során először az  $R_1$  rés megvilágítását állítsuk be! A beállítás szempontjai:

1. A lehető legtöbb fény essen a résre!
2. A rés megvilágított szélessége ne legyen nagyobb 2-3 centiméternél: a rés képe ráférjen a forgatható rés ernyőjére!
3. A függőleges síkbeli divergencia legyen olyan, hogy az  $L_1$  és az  $L_2$  lencsénél a lencseszélek ne kapjanak megvilágítást: ne legyen nagy a lencse miatti torzítás, de a detektáló ernyőn függőleges irányban a leghosszabb ábrát kapjuk!

Helyezzük a megvilágító réstől fókusz távolságra az  $L_1$  lencsét, és ellenőrizzük a beállítást azzal, hogy a lencse után a fénynyaláb függőleges mérete ne nagyon változzék! Helyezzük a küvettát a fényútba úgy, hogy a megvilágító fény középen haladjon keresztül. A küvettán keresztülhaladó fény az  $L_2$  lencsére esik, melynek fókusz síkjába helyezzük az  $R_2$  forgatható rést. Geometriai optikai megfontolások alapján beláthatjuk, ha azt kívánjuk, hogy a kivetített kép a függőleges tengely irányában legyen torz, a küvetta és az  $L_2$  lencse közötti távolságot  $f_{L_2}$  nagyságúra kell választanunk. A még üres küvettával a forgatható rést állítsuk függőleges helyzetbe, hogy az  $L_0$  lencsével könnyen beállíthassuk a küvetta képét. Ez jelen esetben egy egyenes megvilágítású egyenes kell hogy legyen. Ezzel az optikai rendszert nagy vonalakban beállítottunk tekinthetjük. A továbbiakban próbálkozzunk a sóoldatnak desztillált víz alá történő rétegzésével! Az eközben esetleg nem tökéletesen alárétegzett sóoldat segítségével finomíthatjuk az optikai rendszer beállítását. Ilyenkor a küvettában fellépő inhomogenitás miatt már oldalirányú eltérést is kell kapnunk a detektáló ernyőn, így kiválaszthatjuk azt a réselfordítást, melyet mérésünkben a továbbiakban használni fogunk. Az alárétegzés a következőképp végezzük! Töltsük meg a küvettát feléig desztillált vízzel miután az oldalait kellően megtisztítottuk, hogy foltmentesek legyenek! Helyezzük a küvettatartóba, és a sóoldattal feltöltött pipetta végét helyezzük a küvetta valamelyik alsó sarkába úgy, hogy a mérés során a küvettában hagyott pipettavég ne zavarjon! Ezután óvatosan nyissuk meg a pipettát, hogy a sóoldat lassan a küvetta aljába folyhasson. Ilyenkor a sóoldat és a víz közötti határfelület még általában olyan éles, hogy a felületen fellépő teljes visszaverődés segítségével az elválasztó felületet és annak mozgását szemmel követhetjük. Próbáljuk a pipettát annyira megtölteni, hogy a sóoldat éppen akkor fogyjon el, amikor az elválasztó felület a küvetta közepén, a fényútban van! Szükség esetén a küvettatartó mozgatásával segíthetünk a helyzeten, a mozgatással azonban rontjuk az elválasztó felület simaságát. Az optikai rendszer által kivetített képet, mely gyakorlatilag a (16.3) alatti megoldás, állványra rögzített, távvezérelt digitális fényképezőgéppel lefényképezzük. A diffúzió előrehaladtával egyre laposabb Gauss-görbéket fogunk kapni, melyek alatti terület azonos kell hogy legyen. Az egymásutáni, ismert időkülönbségekkel felvett görbékre kiszámíthatjuk a terület/magasság hányadost, majd ennek négyzetet ábrázoljuk az idő függvényében, ekkor a (16.6) összefüggés alapján egy egyenest kell kapnunk. Az egyenes meredekségéből a diffúziós állandó meghatározható. Az anizotrop nagyítás miatt a diffúziós együttható értékének meghatározáshoz szükségünk van az egyik irányú nagyítás értékére is, mint

korrekciós tényezőre. A mérések során célszerű a forgatható rés egyszer beállított szögét nem változtatni, ezzel ugyanis a rendszer vízszintes nagyítását is megváltoztatjuk. Ezért a beállítást a legnagyobb koncentrációjú oldat vizsgálatával célszerű kezdenünk, mert ennél lesz a kiindulási koncentrációgradiens, és így az oldalirányú eltérés is a legnagyobb. Ebben az elrendezésben kell a rést annyira kiforgatnunk a függőleges helyzetből, hogy a görbe maximuma még ne deformálódjék a leképezési hibák miatt.

### 16.3. Gyakorló kérdések

1. Mi a diffúzió?
2. Mi hajtja a diffúzió folyamatát?
3. Írjuk fel a diffúziót leíró egyenletet!
4. Milyen alakú az egydimenziós diffúziós egyenlet megoldása?
5. Hogyan térül el egy fénysugár, ha olyan közegbe érkezik, ahol a törésmutató helyről helyre változik?
6. Mi mindentől függ a küvettán áthaladó fény eltérülésének mértéke adott mélységben?
7. Mit értünk az alatt, hogy egy oldat egy mólos (1M)?
8. Mi a Schlieren-(árnyék-) módszer lényege? Ismertesse a sugármenetet!
9. A Schlieren-módszer alkalmazásakor milyen optikai eszközzel válogatjuk szét a fénysugarakat?
10. Statisztikusan miért diffundálnak együtt a vízben a cink és szulfát ionok annak ellenére, hogy különböző a diffúziós állandójuk?
11. Miért térülnek el a fénysugarak a koncentráció gradiensen? Mekkora az eltérés szöge?

### 16.4. Mérési feladatok

1. Állítsuk be a készüléket és a legnagyobb megadott sókoncentráció mellett ellenőrizzük a beállítás helyességét!

2.  $ZnSO_4$  1 mólos oldatából kiindulva, hígítással készítsünk 3 különböző koncentrációjú (1, 1/2 és 1/3 mólos) oldatot, és mérjük meg a cink-szulfát diffúziós állandójának koncentráció-függését. A fényképeket érdemes a következő, minimum 7 időpontban rögzíteni, mivel a görbe lapulása az idővel nem arányos: 0, 2, 4, 8, 13, 20, 35 perc. A fényképek kiértékelésekor egy rögzített origóhoz képest vegyük fel a görbét!

## 16.5. Ajánlott irodalom

- [1] Erdey-Grúz T., Prosz J: Fizikai-kémiai praktikum (Tankönyvkiadó, 1955) 235. old.
- [2] Van Holden, K. E.: Physieal biochemistry. (Prentice-Hall, 1971) 4. fejezet
- [3] Benedek, G. B., Villars, F. M. H.: Physics, vol. 2. (Addison Wesley, 1974) 2. fejezet

## 17. fejezet

# Folyadékkristályok és folyadékkristály kijelzők (Koltai János)

### 17.1. Bevezetés

Naponta használunk olyan eszközöket, amelyekben folyadékkristály kijelző (liquid crystal display, LCD) található. Mindenhol jelen vannak, a karórában, számológépben, a telefonokban, mikrohullámú sütőben, műszerek előlapján, laptopban, televíziókban, projektorokban és még sorolhatnánk. Sikerességük annak köszönhető, hogy jelentős előnyöket nyújtanak a más technológiákkal (pl. katódsugaras csövek, vagy plazmaképernyők) szemben: vékonyabbak, könnyebbek, kevesebb energiát használnak és ma már olcsóbbak is. A mérés során a folyadékkristályok illetve a folyadékkristály kijelzők alapvető tulajdonságaival ismerkedünk meg.

### 17.2. A folyadékkristályok alapvető tulajdonságai

#### 17.2.1. A folyadékkristályok története

Ha az ókori görögök nem is ismerték, de balgaság lenne azt gondolni, hogy a folyadékkristályok a XX. század végének felfedezettjei. Már 1888-ban Friedrich Reinitzer beszámolt a Bécsi Kémiai Társaság gyűlésén a koleszterol folyadék-kristályos természetéről, azaz arról, hogy két olvadási pontot talált, és a kettő között egy érdekes zavaros folyadékszerű állapotot, mely különlegesen törte a fényt [1]. Otto Lehmann 1904-es publikációjában már használja a „Flüssige Kristalle”, azaz folyadékkristály kifejezést [2]. 1911-ben Charles Mauguin lemezek közötti vékony folyadékkristály réteggel végez kísérleteket. Korai eredményei lényegében a csavart nematikus (twisted nematic, TN)



kijelzők alapjainak tekinthetőek. Mivel semmilyen gyakorlati hasznát nem látták a felfedezésnek, a téma feledésbe merült egészen a '60-as évek végéig, mikor az első alkalmazási lehetőségeket sikerült demonstrálni. 1970-ben született meg a csavart nematikus kijelző, mely már tömeggyártásra is alkalmas volt és a korai kvarcórákban forgalomba is került. Több technológiai újítás után a korai monitorokban és LCD televíziókban is ezt az elvet alkalmazták. A csavart nematikus kijelzőtípusból máig már sok milliárd darabot gyártottak. Ugyan nem közvetlenül a folyadékkristályokért, de ahhoz is kapcsolódó munkájáért 1991-ben Pierre-Gilles de Gennes kapott Nobel-díjat. Az indoklás szerint „az egyszerű rendszerek rendezettségi jelenségeinek tanulmányozására kifejlesztett eljárásáért, melyet általánosítva az anyag összetettebb formáinak – például folyadékkristályok és polimerek – tanulmányozására is használni lehet”. Leírása alapköve lett – többek között – a folyadékkristályok modern elméletének.

### 17.2.2. A folyadékkristályok szerkezete

A folyadékkristály elnevezés egy különleges halmazállapotot jelöl, amely megnyúlt alakú szerves molekulákból álló kristályok megolvadásakor jön létre. Ebben az állapotban az anyag részben kristályokra, részben folyadékokra jellemző tulajdonságokat mutat. Mechanikai tulajdonságaikban inkább folyadékokra emlékeztetnek, optikai, dielektromos és más egyéb tulajdonságaiban azonban kristályokra jellemző anizotrópiát mutatnak. A folyadékkristályos állapot mindig csak egy meghatározott hőmérséklet-tartományban áll fenn, egy jól definiált hőmérsékleten az anyag átalakul szokásos (izotrop) folyadékká.

A folyadékkristályok tanulmányozása során kiderült, hogy ezek több csoportba oszthatók. A felosztást polarizációs mikroszkópban látható jellegzetes ábrák (textúrák) és más fizikai vizsgálatok alapján lehet elvégezni. Az egyes csoportok közötti különbségek mélyebb okát elsősorban röntgendiffrakciós vizsgálatok segítségével sikerült tisztázni. Valamennyi folyadékkristály közös sajátossága, hogy bennük a molekulák irány szerint rendezetten helyezkednek el, ugyanakkor – ellentétben a szilárd kristályos állapottal – a molekulák tömegközéppontjai nem alkotnak háromdimenziós rácsot. Az egyes folyadékkristály típusok közötti különbség lényegében a tömegközéppontok rendezettségének mértékében fennálló eltérésekből adódik.

#### N – Nematikus folyadékkristályok

A folyadékokhoz legközelebb álló folyadékkristályok az úgynevezett nematikus (N) folyadékkristályok. Ebben az állapotban a tömegközéppontok elrendeződése véletlenszerű, a molekulák csak irány szerint rendezettek (lásd 17.1. ábrát). A nematikus folyadékkristályok – az izotrop folyadékokhoz hasonlóan – semmilyen irányú nyírással szemben nem tanúsítanak ellenállást. A „nematikus” elnevezés onnan származik, hogy polarizációs mikroszkóppal gyakran jellegzetes fonalak figyelhetők meg bennük (*nema* görögül fonalat jelent). A nematikus fázisban a molekulák nincsenek tökéletesen egy irányba rendezve.

r e n d e z e t t s é g

Fázis	Direktorral párhuzamos metszet	Direktorra merőleges metszet	Megjegyzés
$N$			3D folyadék egytengelyű
$S_A$			2D folyadék merőleges, egytengelyű
$S_C$			2D folyadék dőlt kéttengelyű
$S_B$			hexagonális merőleges kéttengelyű
$S_I$			hexagonális dőlt kéttengelyű
$S_E$			2D kristály halszálkás merőleges egytengelyű
$S_G$			pszeudo halszálkás dőlt kéttengelyű

17.1. ábra. A folyadékkristályok fontosabb típusai

A hossz tengelyek elhelyezkedését egy eloszlásfüggvénnyel lehet jellemezni. Az eloszlásfüggvénynek egy adott irányban maximuma van, ezt az irányt egy egységvektorral, az úgynevezett direktorral jellemezzük.

### S – Szmeztikus folyadékkristályok

A következő folyadékkristály-csoportba azok tartoznak, amelyeknél a molekulák nemcsak irány szerint rendezettek, hanem tömegközéppontjuk párhuzamos síkokban helyezkedik

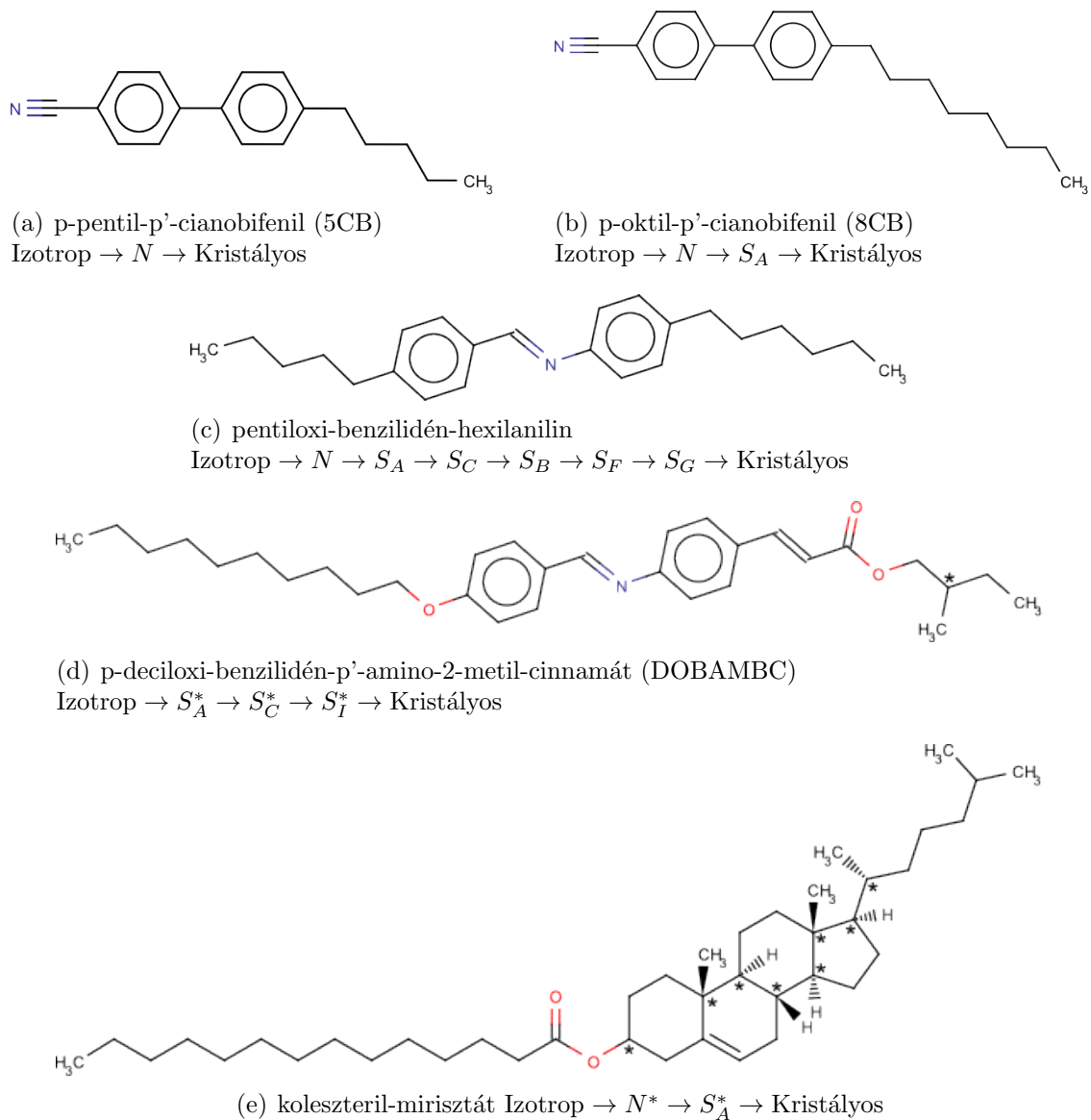
el. A síkok egymáshoz képest szabadon tudnak mozogni. Ezek az ún. szmektikus folyadékkristályok. Az elnevezés onnan ered, hogy ezek az anyagok sok tekintetben úgy viselkednek, mint a szappanok vizes oldata (*smegma* görögül szappant jelent). A 17.1. ábrán látható módon a szmektikus folyadékkristályoknak több típusa van. Egyrészt a molekulák hossz tengelyének átlagos iránya, a  $\vec{d}$  direktor, a szmektikus réteg  $\vec{n}$  normálisával nem mindig párhuzamos, eszerint megkülönböztetünk egytengelyű vagy kéttengelyű folyadékkristályokat. Másrészt egy rétegen belül a molekulák tömegközéppontjai elhelyezkedhetnek rendezetlenül vagy rendezetten, sőt a molekulák hossz tengely körüli forgása is befagyhat. A továbbiak szempontjából lényeges szerepe a szmektikus C állapotnak van. Az ilyen szerkezettel rendelkező anyag makroszkopikus tulajdonságai invariánsak a réteg normálisa és a direktor által meghatározott síkra való tükrözéssel és az erre a síkra merőleges tengely körüli  $180^\circ$ -os elforgatással szemben, azaz a szimmetriaműveletek a szerkezetet önmagába viszik át.

### 17.2.3. Molekuláris jellemzők

A 17.2. ábrán néhány olyan jellegzetes molekula szerkezete látható, amelyekből álló anyag bizonyos hőmérséklet-tartományban folyadékkristályos tulajdonságokat mutat. Itt említjük meg, hogy egy adott vegyület a hőmérséklettől függően többféle folyadékkristályos állapotot vehet fel, mint ahogyan ezt az ábra is mutatja. A 17.2. ábrán a D és E anyagnak van még egy újabb tulajdonsága: mindkét vegyület tartalmaz királis szénatomot (a második többet is). A kiralitás lényege az, hogy egy tetraédes kötésben lévő szénatomhoz a négy irányban más és más atomok, ill. atomcsoportok kapcsolódnak. Ezek a molekulák nem tükörszimmetrikusak, létezik balos, ill. jobbos módosulatuk is, amelyek egymásba nem alakulhatnak át (lásd a 17.3 illusztrációt). A tisztán jobbos vagy tisztán balos molekulákból álló anyag optikailag aktív, azaz elforgatja a rajta keresztül haladó poláros fény polarizációs síkját.

A királis molekulákat tartalmazó folyadékkristályban csavarszerkezet alakulhat ki, azaz a direktor egy adott irány mentén haladva periodikusan körbe forog (17.4. ábra). A periodicitásra jellemző mennyiség az ún. csavarállandó (P). Ez az a távolság, melyen belül a direktor azimut szöge  $360^\circ$ -kal elfordul. A csavarállandó előjeles mennyiség, a konvenció szerint a jobbcsavarnak pozitív érték felel meg. Tipikus értéke  $0,1 \mu\text{m}$ -tól néhány  $\mu\text{m}$ -ig terjed. A csavarszerkezetre figyelemmel a királis  $S_C$  fázist csavart szmektikus C folyadékkristálynak nevezik, és  $S_C^*$ -gal jelölik. A nematikus fázis királis megfelelője külön nevet is kapott, ez a koleszterikus ( $N^*$  vagy  $Ch$ ) fázis (először koleszterin-származékok között találtak ilyen anyagokat).

Azok az anyagok, amelyeknél a csavarállandó a látható fény hullámhosszába esik, színesek, hiszen emiatt bizonyos színű fényt visszavernek. Mivel a csavarállandó hőmérsékletfüggő, az ilyen folyadékkristályok változtatják színüket a hőmérséklettel, azaz felhasználhatók a hőmérséklet mérésére.

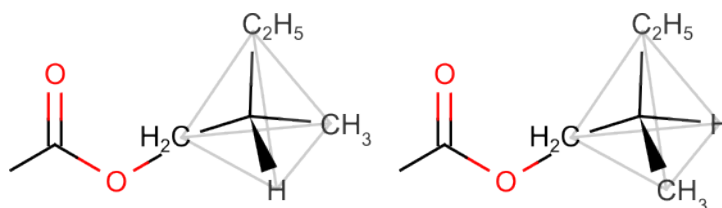


17.2. ábra. Néhány folyadékkristály-molekula szerkezeti képlete és fázisátalakulásainak sorrendje

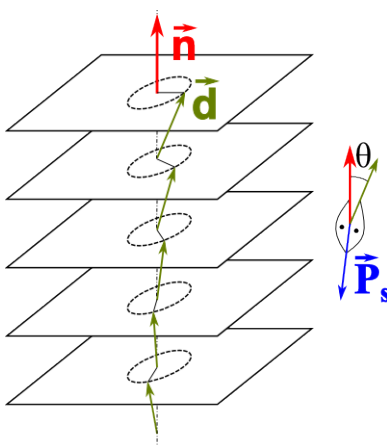
### 17.2.4. Ferroelektromos folyadékkristályok

A tükörszimmetria hiánya miatt az  $S_C^*$  anyagok csak egy szimmetriaművelettel szemben invariánsak, ez pedig az  $\vec{n} \times \vec{d}$  tengely körüli  $180^\circ$ -os forgatás. E forgatás a tengelyirányú vektorokat helyben hagyja, így az  $S_C^*$  anyagok rendelkezhetnek spontán polarizációval:

$$\vec{P}_s = P_s \vec{n} \times \vec{d} / \sin \vartheta.$$



17.3. ábra. Egy királis atomcsoport két lehetséges felépítése (DOBAMBC)



17.4. ábra. A csavarszerkezet szemléltetése csavart szmeztikus folyadék-kristályban

Itt  $P_s$  szintén előjeles mennyiség, abszolút értéke  $(0 - 1000) \cdot 10^{-5} \text{ Cm}^{-2}$  tartományba esik. Ezen spontán polarizáció jelenléte miatt nevezzük a csavart szmeztikus C folyadék-kristályokat ferroelektromosoknak. Mivel a spontán polarizáció minden rétegben  $\vec{n} \times \vec{d}$  irányú, tehát iránya a direktorhoz rögzített, a csavartengely (azaz rétegnormális) irányában haladva a spontán polarizáció a direktorral együtt körbe forog. Ez azt eredményezi, hogy a makroszkopikus méretű tömbi  $S_C^*$  minta általában nem rendelkezik permanens polarizációval, hiszen csavarállandónyi távolságon a spontán polarizáció mindig kiátlagolódik. Szigorúan véve tehát csak egyetlen szmeztikus réteg lehet ferroelektromos.

A fenti megfontolások mutatják, hogy az  $S_C^*$  szerkezet szimmetriái a spontán polarizáció megjelenését lehetővé teszik, de a polarizáció eredetéről nem adnak számot. A molekula szerkezete és a spontán polarizáció közti egyértelmű, kvantitatív kapcsolatot egy megfelelő mikroszkopikus modell keretében kellene vizsgálnunk, de kvalitatív képet enélkül is alkothatunk a folyamatról. A molekulák atomjait összetartó kémiai kötésekben az elektroneloszlás általában nem egyenletes, ezért az egyes kötésekhez elektromos dipólmomentum rendelhető. Ennek eredményeképpen, ha csak a szerkezete nem teljesen szimmetrikus (pl. *metán*, *benzol*), a molekula rendelkezik eredő, permanens dipólmomentummal, mely a molekula hossz tengelyével általában nem párhuzamos. A hőmozgás során a molekulák hossz tengelyük körül általában szabadon foroghatnak, így ez a per-

manens polarizáció statisztikusan kiátlagolódik.

Az  $S_C^*$  fázisban azonban a rétegekben a dőlt királis molekulák hossz tengely körüli forgása gátolttá válik, így a statisztikus átlag 0 és a merőleges permanens dipólmomentum értéke közé eső, a hossz tengelyre merőleges dipólmomentumot eredményezhet. Ha az ismert anyagok mért spontán polarizációját a molekulák becsült permanens dipólmomentumával összehasonlítjuk, azt kapjuk, hogy a statisztikus átlag a merőleges dipólmomentum néhány százaléka.

Összefoglalásképpen megállapíthatjuk, hogy folyadékkristályokban a ferroelektromosság fellépéséhez az alábbi feltételeknek kell teljesülnie:

1. kéttengelyűség (a rétegnormális és a direktor két független, kitüntetett irány),
2. kiralitás (tükörszimmetria hiánya),
3. molekula merőleges dipólmomentuma.

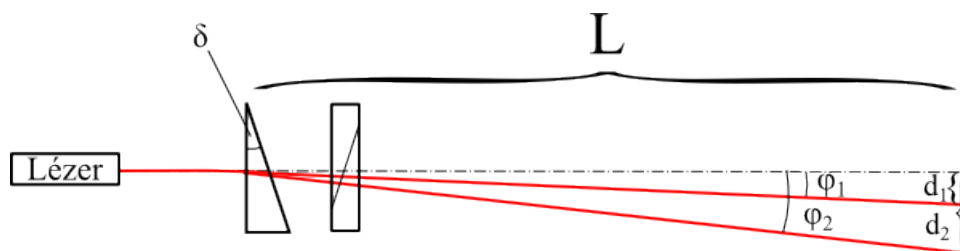
Az elmúlt években már számos olyan vegyületet állítottak elő, melyek csavart szerkezettel is rendelkezhetnek. Egy adott vegyület esetén az anyagi paraméterek összessége (optimális hőmérséklet-tartomány, dőlésszög, csavarállandó, spontán polarizáció, stb.) általában nem felel meg igényeinknek, ezért tiszta anyagok helyett elegyeket szokás használni, ahol az egyes komponensek alkalmas választásával szinte tetszőleges anyagi paraméter beállítható.

Ebben az is segítséget nyújt, hogy pl. a ferroelektromosság fenti három feltételének nem kell szükségszerűen az elegy minden tagjára teljesülnie, sőt az is elég lehet, ha az egyes feltételeket különböző komponensek testesítik meg. Pl. ha nemkirális szmektikus C (tehát nem ferroelektromos) folyadékkristályhoz kis mennyiségű (néhány %) merőleges dipólmomentummal rendelkező királis anyagot (nem szükséges folyadékkristálynak sem lennie!) adunk adaléknak, az elegy ferroelektromos  $S_C^*$  szerkezetű lehet.

Itt kívánjuk megjegyezni, hogy az  $S_C^*$  nem az egyedüli folyadékkristály-fázis, mely ferroelektromosságot mutathat. Léteznek további, alacsonyabb hőmérsékleten előforduló, rendezettebb ferroelektromos fázisok (pl.  $S_F^*$ ,  $S_G^*$ ,  $S_I^*$ ) is. Ezek ugyanúgy tartalmaznak királis molekulákat, továbbá réteges, dőlt szerkezetűek, mint az  $S_C^*$ , az eltérés közöttük a szmektikus rétegeken belüli tömegközépponti rendezettség mértékében van.

### 17.3. Törésmutató mérése nematikus fázisban

A folyadékkristályok jellegzetes tulajdonsága, hogy kettőtörőek. Általában a törés jelensége azzal függ össze, hogy a mintán áthaladó fény elektromos térerősségvektora az anyag molekuláit polarizálja. Ez a polarizáció, amely időben periodikusan változik, másodlagos sugárzáshoz vezet. Az eredeti fénysugár és a másodlagos sugárzás interferenciája hozza létre a megtört sugarat.



17.5. ábra. Mérési elrendezés a kettőtörés hőmérsékletfüggésének méréséhez

Anizotrop közegekben – szilárd kristályokban és folyadékkristályokban – az elektromos tér által indukált polarizáció nagysága és iránya az elektromos tér irányától is függ. Ez általános esetben arra vezet, hogy az anizotrop közegre beeső fénysugár két komponensre válik szét. A két komponens különböző fázissebességgel halad a közegben, következésképpen, ha a fény valamilyen szögben esik a két közeg határfelületére, a két sugár különböző irányba halad tovább. Ez a kettőtörés.

A nematikus folyadékkristályok optikailag úgynevezett egytengelyű kristályokként viselkednek. Az egytengelyű kristályokat az jellemzi, hogy létezik bennük egy szimmetriatengely, amelyre merőleges síkban minden irány egyenértékű (legalábbis optikai szempontból). Ez a szimmetriatengely a direktorral esik egybe. A kettőtörés során keletkező egyik fénysugár a szimmetriasíkban van polarizálva (azaz az elektromos térerősségvektor ebben a síkban fekszik). Ez az úgynevezett ordinárius sugár, a fázissebesség  $c/n_o$ , ahol  $n_o$  az ordinárius törésmutató. A másik sugár az ordinárius sugárra merőlegesen polarizált (extraordinárius sugár), fázissebessége  $c/n_e$ , ahol  $n_e$  az extraordinárius törésmutató.

Általában egy mintában – amely két üveglap közé helyezett folyadékkristály-rétegből áll – a direktor helyről helyre változik. A közönséges mikroszkópban nem használjuk ki a fény polarizációs tulajdonságait, a leképezés (alsó megvilágítás esetén) a vizsgált tárgyban levő esetleges inhomogenitások vagy a tárgy szélén létrejövő fényszórás alapján keletkezik. Polarizációs mikroszkópban a minta keresztezett polarizátorok között helyezkedik el, így a képen kontraszt-különbségek jelentkeznek aszerint is, hogy az anizotrop tárgyban az adott helyen mekkora a kettőtörés, ill. hogyan helyezkedik el az optikai tengely (a direktor) a beeső fény polarizációjához viszonyítva. A polarizációs mikroszkóp ezért különösen alkalmas a folyadékkristályok vizsgálatára.

A törésmutató méréséhez olyan mintát kell készíteni, amelyben a direktor mindenütt ugyanabba az irányba mutat. Megfelelő kezelési módszerekkel elérhető, hogy a mintát határoló két üveglapon a molekulák egy rögzített irányba orientálódjanak, ekkor az egész mintában ebbe az irányba állnak be a molekulák. A mérésben használt cellánál az üvegre vékony  $SiO$  réteget párologtattunk. Ez biztosítja, hogy a molekulák az üvegen egy adott irányba álljanak be.

A prizma alakú mintára polarizált sugárnyalábot bocsátunk a prizma beeső lapjára merőlegesen (17.5. ábra). Ha a beeső sugár polarizációvektorának van az optikai tengely-

re merőleges (ordinárius sugármenet) és azzal párhuzamos összetevője is (extraordinárius sugármenet), akkor a prizmát elhagyva a sugár két részre válik, bizonyítva ezzel a folyadékkristály kettőtörő tulajdonságát. Azt a megfelelő polarizációs síkot, amikor a megtört sugarak kb. egyenlő fényességgel, jól láthatók, a prizma és a sugarat kibocsátó lézer közé helyezett polárszűrővel választjuk ki. A prizma adatainak és az eltérülés szögének ismeretében a törésmutatók számíthatók.

Mint ahogy a prizma törőszöge kicsi, a sugarak eltérése is az, így hosszú fényútra van szükség mérhető eltérés létrehozásához. Az eltérés szögének mérésére több módszer áll rendelkezésre. Az egyik módszer a távolságok mérésén alapszik. A mérés pontosítható, ha a prizma helyére kalibrált optikai rácst teszünk és a különböző rendek elhajlási távolságát mérve az ernyőnket szögekben kalibráljuk. Így rögtön az eltérés szögét olvashatjuk le.

### 17.3.1. A minta hőmérsékletének szabályozása

A folyadékkristályok törésmutatói erősen függenek a hőmérséklettől, ezért fontos feladat a mérőcella hőmérsékletének szabályozása. A hőmérséklet változtatását egy elektromos kályhával és vízzel, mint hőcserélő közeggel végezzük. A mintatartó hőmérsékletét termopárral mérjük. A minta és a mintatartó a réz kontaktusokon keresztül erősen hőkontaktusban van, ha a mintatartó hőmérséklete csak lassan változik, akkor a minta hőmérséklete követni fogja. Lényeges, hogy a mérés megkezdése előtt ne felejtjük el a hűtővizet megnyitni az alacsony hőmérsékletű fixpont biztosítása érdekében. Elegendő enyhén csepegősen megnyitni a csapot, mert különben akkora disszipációja lesz a rendszernek, hogy a kályha nem tudja felmelegíteni a mintát. Ha túlzottan hirtelen megnyitjuk a csapot, akkor a cső elszabadulhat és kifröccsenhet a víz a mosdóból! A kályhán állíthatjuk a fűtőáram nagyságát, amivel elérhetjük, hogy a kályha által közölt hő és a víz által elszállított hő egyensúlyba kerül, a hőmérséklet stabilizálódik.

### 17.3.2. A törésmutató hőmérsékletfüggésének értelmezése

Mint a mérések mutatják, a nematikus fázisban a törésmutatók – az izotrop fázistól eltérően – erős hőmérsékletfüggést mutatnak. Ez azért is különös, mert ilyen hőmérsékletfüggés szilárd, kristályos fázisban sem lép fel. A jelenséget a következő módon értelmezhetjük: a folyadékkristályban a molekulák hossz tengelyei nagy valószínűséggel a direktor irányába állnak. A rendezettség mértékét jellemezhetjük a hossz tengelyek eloszlásfüggvényének második momentumával, az ún. rendparaméterrel. A rendparamétert a következő módon szokás definiálni:

$$S = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle,$$

ahol  $\theta$  egy kiválasztott molekula hossz tengelye és a direktor által bezárt szög. A szögletes zárójel statisztikus átlagot jelöl. Teljes irány szerinti rendezettségnél a rendparaméter



értéke 1, izotrop közegben pedig 0.

A rendszer belső energiája akkor lenne minimális, ha a rendezettség tökéletes lenne ( $S = 1$ ). A molekulák azonban termikus mozgást végeznek, így az egyensúlynak egynél kisebb rendparaméter felel meg. A hőmérséklet növelésével a termikus mozgás erősödik, tehát a rendezettség mértéke csökken. Ez azt jelenti, hogy a direktor egyre kevésbé lesz kitüntetett irány, így az anyagot jellemző mennyiségek anizotrópiája egyre csökken.

## 17.4. Folyadékkristályok elektrooptikai vizsgálata

A folyadékkristályok anizotrópiája nemcsak az optikai tulajdonságokból, hanem az elektromos térbeli viselkedésükből is nyilvánvalóvá válik. A dielektromos permittivitás folyadékkristályokban tenzorral megadható mennyiség ( $\hat{\varepsilon}$ ), egytengelyű folyadékkristályokban (pl. nematikusokban) a következő alakban írható fel:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0 (\varepsilon_{\perp} \delta_{ij} + (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) d_i d_j),$$

ahol  $\varepsilon_{\parallel}$  a direktorral párhuzamos,  $\varepsilon_{\perp}$  a rá merőleges irányban mért permittivitás,  $\delta_{ij}$  pedig a Kronecker-delta. Az elektromos tér az anyag  $\vec{P}$  polarizációjával hat kölcsön:

$$\vec{P} = \hat{\varepsilon} \vec{E} - \varepsilon_0 \vec{E},$$

és olyan direktoreloszlás alakul ki, hogy a  $W$  kölcsönhatási energia minimális legyen:

$$W = - \int \vec{P} \cdot d\vec{E} = \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 - \frac{1}{2} \vec{E} \hat{\varepsilon} \vec{E}.$$

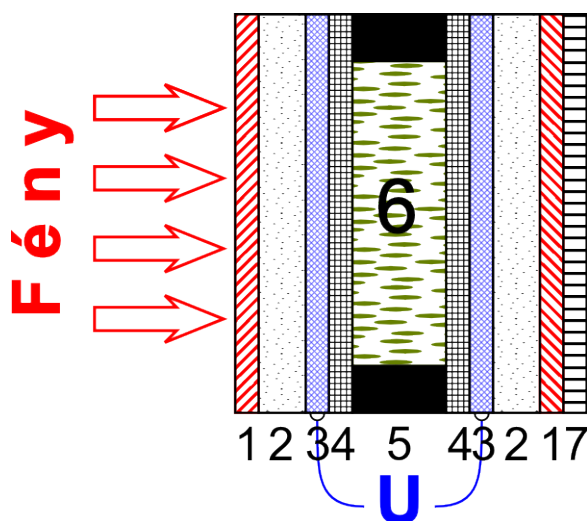
Könnyen belátható, hogy pozitív dielektromos anizotrópia ( $\varepsilon_{\parallel} > \varepsilon_{\perp}$ ) esetén a direktor a térrel párhuzamosan, negatív anizotrópia ( $\varepsilon_{\parallel} < \varepsilon_{\perp}$ ) esetén pedig a térre merőlegesen áll be.

Ferroelektromos folyadékkristályok ( $S_C^*$ ) esetén figyelembe kell venni a spontán polarizáció járulékát is azaz:

$$W = -\vec{P}_s \vec{E} + \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 - \frac{1}{2} \vec{E} \hat{\varepsilon} \vec{E},$$

és  $\hat{\varepsilon}$  alakja is bonyolultabb, mert ez a rendszer kéttengelyű. A szokásos kis terek esetén az első tag dominál, tehát ferroelektromos anyagokban a spontán polarizáció beáll a tér irányába, a direktor pedig erre merőleges lesz. Ez egyben azt is jelenti, hogy az elektromos tér az  $S_C^*$  fázis csavarszerkezetét képes kicsavarni, eltüntetni, másrészt a direktor átorientálása az erősebb ferroelektromos kölcsönhatás miatt gyorsabban bekövetkezhet, mint pl. nematikusok esetében.

Összefoglalásul elmondhatjuk, hogy az elektromos tér képes a folyadékkristály eredeti direktorelrendeződését megváltoztatni. Mivel a direktor egyben optikai tengely is, eközben az optikai tulajdonságok is változnak. Ez teszi lehetővé, hogy a folyadékkristályokat



17.6. ábra. A folyadékkristályos kijelző tipikus felépítése. 1 - polarizátor, 2 - üveglap, 3 - átlátszó elektróda, 4 - orientáló réteg, 5 - távtartó, 6 - folyadékkristály, 7 - tükör (csak a reflexiós típusoknál van)

elektrooptikai kijelzők készítésére felhasználjuk. Az első, kezdetleges kijelző elkészítése (1968) óta a folyadékkristály-kijelzők modern változatai az elektronika számos területén szinte egyeduralmukodóvá váltak és napjainkban is egyre újabb alkalmazási lehetőséget nyújtanak. A ma gyártott, ill. fejlesztett LCD-knek (LCD=Liquid Crystal Display) számos változata ismert, melyek konstrukciója és működési elve lényegesen különböző lehet. Ennek ellenére vannak közös vonásaik, amiket az alábbiakban összegezhetünk. A mérés során kétféle kijelzőtípust fogunk vizsgálni, a csavart nematikus és a ferroelektromos szmektikus kijelzőt.

#### 17.4.1. A folyadékkristály-kijelzőkről általában

A folyadékkristály-kijelző két üveglap közé zárt folyadékkristály-réteget tartalmaz (17.6. ábra). A határoló lapok belső felületén átlátszó  $\text{SnO}_2$  vezető réteg található, így az elektromos tér az üveglapokra merőleges. Az elektródák alkalmas orientáló bevonattal vannak ellátva (pl. megdörzsölt polimer vagy felgőzölt  $\text{SiO}$  réteg), melyek kijelölik az elektródákon a direktor irányát. Ez biztosítja, hogy a cella elektromos tér nélkül mindig ugyanabba az alapállapotba kerüljön vissza. A lapokat szigetelő távtartók ( $1 - 15 \mu\text{m}$ ) választják el, és az egész cella hermetikusan le van zárva. Az üveglapok külső felületére gyakran polarizátor fólia van felragasztva, hogy a cella ki- illetve bekapcsolt állapota között a szükséges kontraszt megvalósítható legyen.

Minden folyadékkristály-kijelző közös jellemzője, hogy saját fényt nem bocsájt ki magából, csak a rajta áthaladó fény intenzitását változtatja meg. Ez teszi lehetővé,

hogy a kijelzők minimális teljesítmény-felvétellel, kis feszültségekkel működjenek (néhány  $nW/cm^2$ , 1 – 10V), így kiválóan használhatók teleppel működő hordozható eszközökben. Hátrányaik közé sorolható, hogy vezérlésükhöz egyenszint nélküli váltófeszültség szükséges, mert egyenkomponens hatására az elektródák polarizálódhatnak és a cella élettartama ezáltal lecsökken.

A folyadékkristály-kijelzőkben felhasznált anyagok a gyárak féltve őrzött recept alapján készülők, sokszor 10-20 vegyületből álló elegyei, melyekkel az adott alkalmazáshoz legoptimálisabb anyagi paraméterek állíthatók be. Ezek közül talán a működési hőmérséklet-tartomány a legfontosabb (azaz amikor az anyag folyadékkristály állapotban van). A működési hőmérséklet alkalmas anyagválasztással már kb.  $-30^\circ C$ -tól kb.  $+120^\circ C$ -ig terjedhet. A folyadékkristályok alkalmazási köre a kijelző felépítésétől és az elektródák mintázatától függően széles körben változhat. Mintázat nélküli elektródák fénymodulátornak, hétszegmenses kijelzők műszerekben, kalkulátorokban, órákban számok megjelenítésére, a multiplex vezérlésű mátrixkijelzők pedig televízió, számítógép képernyőjeként használhatók. Az alábbiakban két kijelzőtípus működési elvét mutatjuk be. A csavart nematikus kijelző a jelenleg legelterjedtebb, legegyszerűbb kijelzőtípus. A felületstabilizált ferroelektromos folyadékkristály-kijelző gyors mátrixkijelzők kialakítását teszi lehetővé.

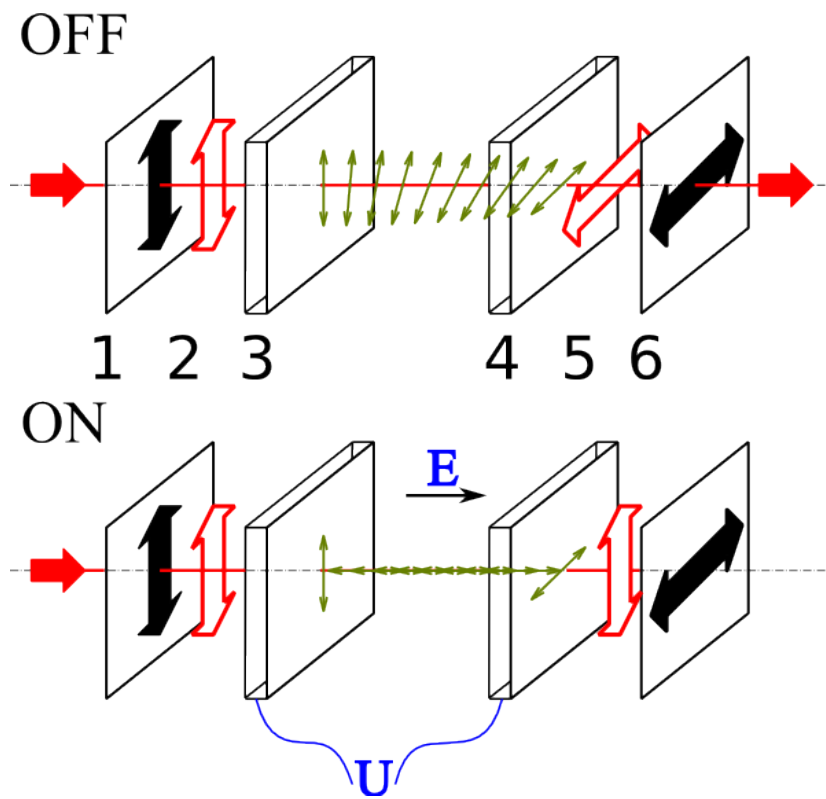
### 17.4.2. A csavart nematikus kijelző

Az elektródák olyan felületkezelést kaptak, hogy a molekulák a felülettel párhuzamosan adott irányban, de a két üveglapon egymáshoz képest  $90^\circ$ -os szögben álljanak (lásd 17.7. ábrát). A cellát pozitív dielektromos anizotrópiájú nematikus folyadékkristállal kitöltve a direktor az egyik üveglaptól a másikig haladva fokozatosan elcsavarodik. Mindkét üveglapon polarizátor fólia van felragasztva oly módon, hogy az általuk átengedett fény polarizációja a direktorral párhuzamos legyen, vagyis a polarizátorok keresztezett állapotban vannak. Mivel a mintában kialakuló csavar csavarállandója (kb.  $4 \times (5 - 10) \mu m$ ) sokkal nagyobb, mint a fény hullámhossza ( $0,3 - 0,7 \mu m$ ), a cellán merőlegesen áthaladó fény polarizációja a direktorral együtt  $90^\circ$ -ot elfordul.

Az elektromos tér nélküli (kikapcsolt, OFF) alapállapotban tehát a mintán átmenő fény intenzitása a keresztezett polarizátorok ellenére maximális. A cellára feszültséget kapcsolva a felületekre és a kezdeti direktor irányra merőleges elektromos tér alakul ki, ennek hatására a molekulák befordulnak a térrel párhuzamos irányba, ezáltal az optikai forgatás megszűnik, és így a keresztezett polarizátorokon nem megy át a fény: a bekapcsolt állapot (ON) tehát sötét. Az elérhető maximális kontrasztviszony kb. 100 : 1.

### 17.4.3. A felületstabilizált ferroelektromos kijelző

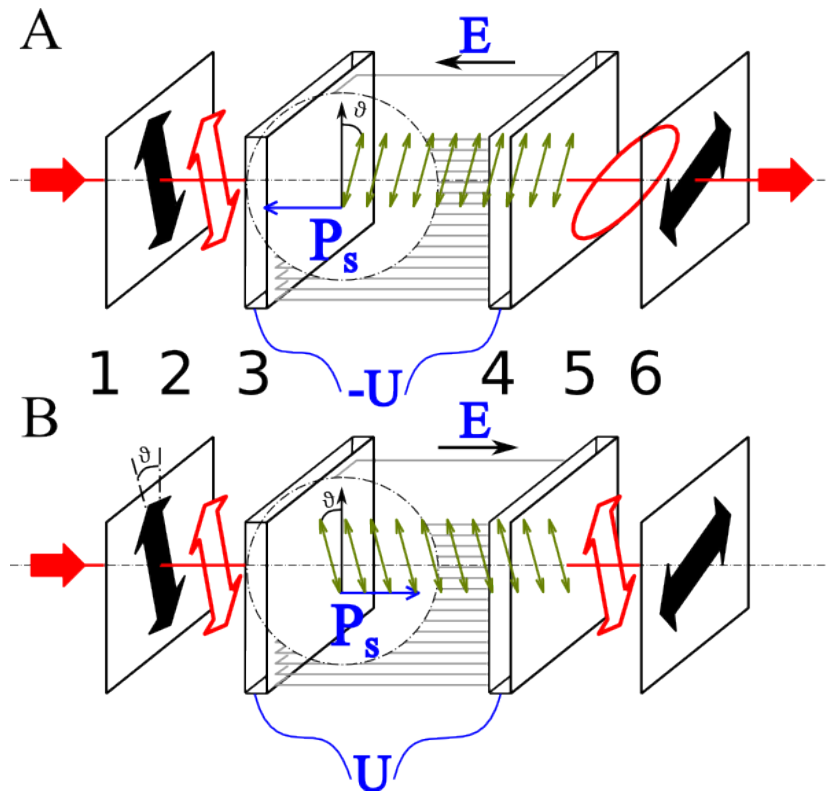
Ez a kijelző csavart szmektikus C fázisú, vagyis ferroelektromos folyadékkristályt tartalmaz. A határoló lapokon olyan speciális felületkezelést kell elvégezni, hogy a molekulák a



17.7. ábra. A csavart nematikus kijelző felépítése és működési elve. 1 - bemeneti polarizátor, 2 - a belépő fény polarizációja, 3,4 - határoló átlátszó elektródák, 5 - a kilépő fény polarizációja, 6 - kimeneti polarizátor

felülettel párhuzamosan helyezkedjenek el. Az elkészítése során azt is biztosítják, hogy a szmeztikus rétegek az elektródákra merőlegesek legyenek. Mivel az  $S_C^*$  fázisban a direktor a rétegnormálissal  $\vartheta$  szöget zár be, a direktor a felületen csak két helyzetben lehet. A két irány között  $2\vartheta$  szög van, az A helyzetben a spontán polarizáció balra, a B helyzetben jobbra mutat.

Ez a határfeltétel nyilvánvalóan nem fér össze az  $S_C^*$  fázis csavarszerkezetével, ezért a csavarszerkezet – a csavarállandó - mintavastagság ( $P/L$ ) aránytól függő mértékben – torzul. Ha a  $P/L > 2$  a felületi kölcsönhatás miatt a csavarszerkezet teljesen eltűnik, a minta teljes vastagságában homogén, az A vagy a B helyzetnek megfelelő, direktor-eloszlás alakul ki (lásd a 17.8. ábrát). Az elektromos tér nélküli esetben az A, ill. B beállítás azonos energiájú, így a minta előéletétől függően a cellában csak A, csak B, vagy mindkét beállású tartomány található. Elektromos tér jelenlétében a ferroelektromos kölcsönhatás révén a spontán polarizáció a térrel párhuzamosan áll be azaz balra mutató tér esetén az A, jobbra mutató esetében a B beállítás jön létre. Mindkét beállítás a cellának stabil állapota, azaz a tér megszüntetésekor nem változik meg. A felületstabilizált



17.8. ábra. A felületstabilizált ferroelektromos folyadékkristály-kijelző felépítése és működési elve. 1 - bemeneti polarizátor, 2 - a belépő fény polarizációja, 3,4 - határoló átlátszó elektródák, 5 - a kilépő fény polarizációja, 6 - kimeneti polarizátor

ferroelektromos kijelző tehát bistabil, az átorientálás csak ellenkező irányú tér hatására következik be. A cella úgy helyezkedik el a keresztezett polarizátorok között, hogy a mintába bemeneti polarizátor párhuzamos a direktor irányával az egyik (a 17.8. ábrán a B) állapotban. Ekkor a rétegen áthaladó fény tisztán extraordinárius nyalábból áll, és így a keresztezett polarizátorokon átmenő fény intenzitás nulla lesz ( $I_B = 0$ ). Az A állapotban az optikai tengely (a direktor) a B állapothoz képest  $2\vartheta$  szöggel el van fordulva. Az átmenő fény intenzitása ez esetben a fény polarizációja és az optikai tengely közötti szögtől ( $2\vartheta$ ) valamint a kettőtörő réteg optikai úthosszkülönbségétől ( $\Delta s = (n_e - n_o)L$ ) függ a következőképpen:

$$I_A = I_0 \sin^2(4\vartheta) \sin^2(\pi \Delta s / \lambda). \quad (17.1)$$

Maximális kontrasztot akkor kaphatunk, ha a dőlésszög az  $S_C^*$  fázisban  $\vartheta = 22,5^\circ$ , és  $\Delta s \approx \lambda/2$ . Mivel a törésmutató anizotrópia szokásos értéke  $n_e - n_o = 0,12 - 0,18$ , ez utóbbi feltétel az  $L \approx 1,5 - 2 \mu\text{m}$  mintavastagsággal elégíthető ki.

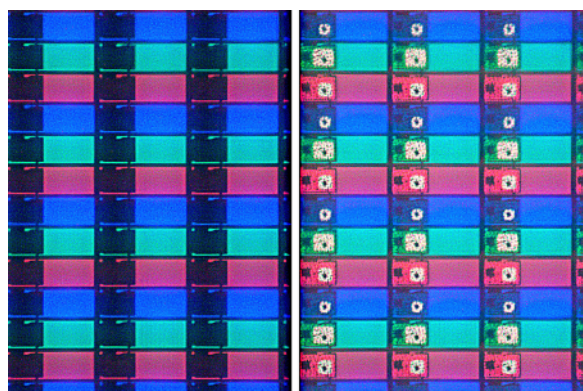
#### 17.4.4. Mi van a lapostévében és az okostelefonban?

Míg a kis felbontású hétszegmenses kijelző minden képelemét közvetlenül lehetett vezérelni, a nagyfelbontású képernyők sok ezer képpontjánál erre nincs lehetőség. E képernyőkben a képpontok sorokból és oszlopokból álló mátrixban helyezkednek el. A mátrix kijelző lehet passzív, vagy aktív. A passzív mátrixnál a az egyes pixelek fényáteresztőképessége a sor- és oszlopelektrodákra adott feszültségimpulzusok hatására soronkénti címezéssel állítható be, amit a pixelnek meg kell őriznie a következő frissítésig (innen a passzív elnevezés). A passzív mátrix előállítása egyszerűbb és olcsóbb, de csak speciális kijelzési módokkal (pl. szuper-csavart nematikus (STN) vagy felületstabilizált ferroelektromos szmektikus) kombinálva használható. Az aktív mátrixban minden képponthoz tartozik egy vékonyréteg tranzisztor (thin film transistor, TFT) kapcsolóelem. A címezés a félvezetőben történik, a tranzisztor pedig folyamatosan biztosítja a pixel állapotának megfelelő térerősséget a folyadékkristály számára. Az aktív mátrix technológia bonyolultabb, de mára már nagy méretű képernyők is gyárthatók, akár a csavart nematikus kijelzési mód felhasználásával is.

A folyadékkristály kijelzési módok alapvetően világos-sötét kontraszt megvalósítását teszik lehetővé. A színes kijelzés megvalósításához az üveg hordozóra pixelenként felváltva vörös, kék és zöld színszűrőket integrálnak. A szemünk a közeli pixeleket összemosza és így látunk egy adott összetett színt. A 17.9. ábrán egy ilyen színes, aktív mátrix képernyő kinagyított részlete látható.

A folyadékkristály-kijelzők nem bocsájtanak ki saját fényt, ezért mögéjük elhelyeznek egy fényt kibocsájtó réteget (=back-light unit). Ez állandóan világít, amikor a kijelző működésben van, ennek a fényét takarja ki a folyadékkristály-kijelző, ha sötét pixelt akarunk megjeleníteni. Éppen ez a pazarlás okozza, hogy ahol a még kisebb fogyasztást akarnak elérni (e-olvasók vagy okostelefonok), ott már nem LCD-t alkalmaznak. A pixelek fényességét itt – az átlátszó elektródák helyett – átlátszó tranzisztorok mátrixa (=thin film transistor, TFT) szabályozza – a megfelelő térerősség létrehozásával. A mátrixok alapvetően lehetnek passzív vagy aktív mátrixok. Előbbiben soronként és oszloponként frissül, az adott pixel fényessége, amit a pixel megőriz a következő frissítésig (innen a passzív elnevezés). Az aktív mátrixban minden képponthoz tartozik egy tranzisztor és minden tranzisztort külön címezhetünk. A passzív mátrix előállítása egyszerűbb, olcsóbb, de nagy felbontású kijelzőt nem lehet vezérelni vele, mert a soronkénti frissítés miatt lassú lesz. Ezenfelül még színszűrő fólia kerül a kijelző felületére, a színes kép előállításához több pixelt hoznak létre, amiket vörös-kék-zöld mintázattal látnak el.

Az első laptop képernyőkben és LCD monitorokban passzív mátrix STN vagy aktív mátrixsal kombinált csavart nematikus kijelzőt (TN-TFT) találunk. Játékosoknak ma is megfelelő ez, mert olcsó és nagy sebességű kijelzőtípus. A nagyméretű képernyőknél (pl. lapos televízió) elengedhetetlen megnövelt láthatósági szöveget két további kijelző típus, az IPS (=in-plane switching) és a MVA (=multi domain vertical alignment) biztosítja. Az IPS felépítése (17.10(a). ábra) hasonlít a csavart nematikuséhoz, a különbség az,



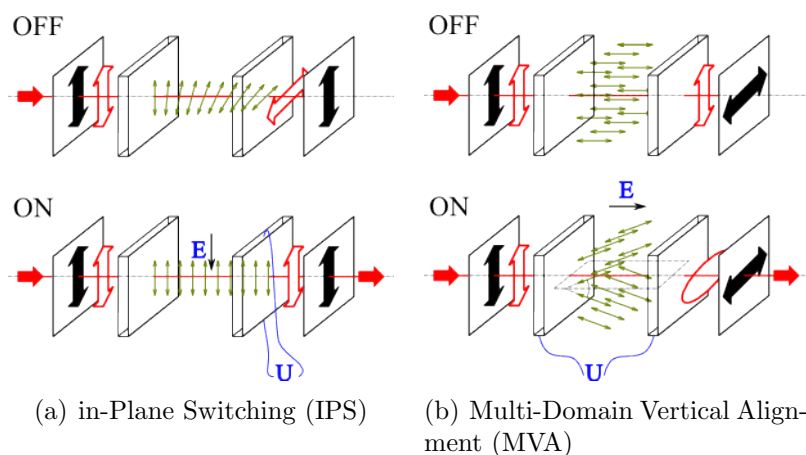
17.9. ábra. Dell Axim X30 kézisámítógép TFT LCD kijelzőjén látható fehér háttér képe. A kép bal oldala a kijelző saját fényével készült, míg a jobb oldalon a külső megvilágítás miatt látszanak az egyes pixelekhez tartozó tranzisztorok is. A képek egy Olympus mikroszkóppal és PixeLINK kamerával készültek. (Forrás: [wikipedia](#))

hogyan az elektródák nem a cella két átellenes oldalán helyezkednek el, hanem egy oldalon elhelyezett két elektródával hoznak létre elektromos teret, ami most a cella síkjában (innen az elnevezés) forgatja el a direktort. A polárszűrők a TN-hez képest elfordítva, párhuzamosan állnak, ezért a kikapcsolt (OFF) állapotban nincs átmenő fény és a bekapcsolt állapotban engedi át a cella a fényt. Az MVA esetén nem csavart folyadékkristályt alkalmaznak (17.10(b). ábra), és kikapcsolt állapotban (OFF) a direktor állása a felületekre merőleges, a keresztezett polárszűrők miatt a cellán nem jut át fény. Bekapcsolt állapotban (ON) a tér hatására – a negatív dielektromos anizotrópia következtében – a direktor az eredeti irányhoz képest kihajlik és a ferroelektromos szmektikus kijelzőnél leírtakhoz hasonlóan a fény a kettőstörés miatt jut át a cellán. A pixelt úgy osztják fel, hogy különböző helyein a direktor más-más irányba hajoljon ki (multi-domain). Erre a nagyobb láthatósági szög érdekében van szükség. Az IPS panel előnye a jó színelbontás, míg az MVA panel kontrasztja jobb és nagyobb szögben látható jól. Mindkettőt és persze a továbbfejlesztett altípusaikat alkalmazzák monitorokban és lapos televíziókban.

A ferroelektromos szmektikus folyadékkristályok nagy méretű kijelzők tömeges gyártására nem váltak be, a prototípusok viszont egészen különös dolgokat is tudtak. A bistabil szerkezet miatt a képernyőn a kikapcsolás után is látható maradt a kép, hiszen a vezérlő feszültséget csak a megváltoztatáshoz szükséges bekapcsolni. Ezen kijelzők alkalmazási területe végül a gyors optikai záruk (shutter) lettek, ilyen folyadékkristály-kijelző található az úgynevezett aktív 3D szemüvegekben, ahol a háromdimenziós hatást úgy érik el, hogy a kivetítőn felváltva küldik a jobb és bal szemnek szánt képeket, a szemüvegek pedig ezzel szinkronban engedik vagy nem engedik be a képeket a szemünkbe.

A modern projektorokban is folyadékkristály-kijelző modulálja a fényt a képalkotáshoz. Az alapszíneknek megfelelően nem is egy, hanem három kijelzőt alkalmaznak,





17.10. ábra. További kijelzőtípusok működési elve

amiknek a képét egymásra vetítik (itt nem lehet különböző színű szomszédos pixelekre bízni az eredményt, mert a nagy pixelméret miatt a színek ekkor „szétcsúszhatnak”).

A folyadékkristály kijelzők nem bocsájtanak ki saját fényt, ezért mögéjük helyeznek egy fényt kibocsájtó réteget (=back-light unit). Ez állandóan világít, amikor a kijelző működésben van, ennek a fényét takarja ki a folyadékkristály kijelző, ha sötét pixelt akarunk megjeleníteni. Éppen ez a pazarlás okozza, hogy ahol még kisebb fogyasztást akarnak elérni (e-olvasók vagy okostelefonok), ott már nem biztos hogy LCD-t alkalmaznak. Az okostelefonokban például egyre gyakoribbak az ún. AMOLED (=active matrix organic light emitting diode) kijelzők. Ezek nem folyadékkristályokat, hanem olyan szerves molekulákat tartalmaznak, amelyek az elektromos áram hatására fényt bocsájtanak ki. Ezek a kijelzők sötét állapotban nem fogyasztanak áramot és ennek megfelelően a teljesítményfelvételük sokkal kisebb lehet, mint az LCD-ké. Fogyasztásuk attól is függ, hogy sötét alapon fehér betűket, vagy fehér alapon fekete betűket jelenítünk meg velük. Hátrányuk, hogy napsütésben még kevésbé láthatóak, mint az LCD-k.

A jelenleg (2013-ban, szerk.) LED TV-ként árult televíziók még LCD kijelzők, a LED (=light emitting diode) bennük csak a hátsó megvilágítás módját jelenti. A televíziók méretében és felbontásában még nem versenyképes az igazi LED-alapú kijelzők előállítása. Az e-olvasók, az energiatakarékos kijelzők gyorsan terjedő új családja, a szokásos kijelzőkétől eltérő követelményeket (nagy fekete-fehér kontraszt, bistabilitás) támasztanak. Bár e követelmények folyadékkristályokkal is kielégíthetőek, az e-tintát más fizikai elven megvalósító megoldások gyakoribbak. Az e-olvasók saját megvilágítással általában nem rendelkezve a visszavert fényben olvashatók, ezért keveset fogyasztanak. Cserébe lassúak, mozgóképek megjelenítésére nem igazán alkalmasak.



## 17.5. Számolási feladat

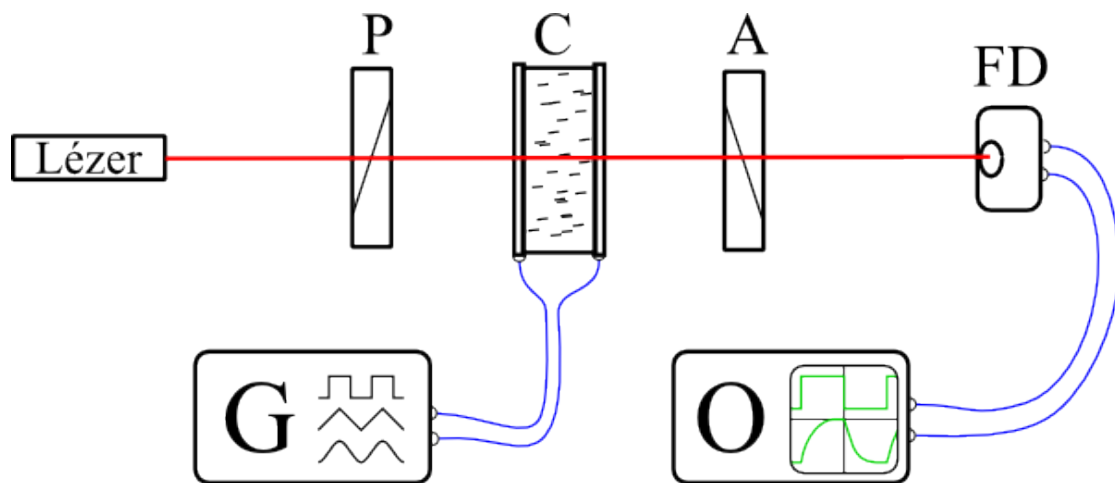
- Ellenőrizzük a (17.1) formula helyességét!

## 17.6. Gyakorló kérdések

1. Mi a folyadékkristály? Mi jellemzi a folyadékkristály halmazállapotot?
2. Mi a direktor?
3. Milyen molekulák/molekulacsoportok jellemzőek a folyadékkristályokra?
4. Mik a folyadékkristályok főbb fajtái, és mi jellemző rájuk?
5. Mi a kiralitás (királis szénatom)? Mi az a csavarállandó?
6. Milyen irányú lehet az  $S_C^*$  anyagokban a spontán polarizáció?
7. Milyen rétegekből áll egy tipikus folyadékkristály-kijelző?
8. Mekkora egy  $T = 10$  ms periodusidejű jel frekvenciája?
9. Mi van az oszcilloszkóp képernyőjének a tengelyein?
10. Mit jelent az oszcilloszkóp képernyőjén a vízszintes vonal?
11. Hogyan lehet az oszcilloszkóppal egyenfeszültséget mérni?
12. Írjon fel egy adott értékhez exponenciálisan tartó függvényt! Mi lesz itt az időállandó, és hogyan lehet megmérni?

## 17.7. Mérési feladatok

1. Vegyük fel az ék alakú minta törésmutatójának hőmérsékletfüggését a  $15 - 40^\circ\text{C}$ -os tartományban,  $1 - 2^\circ\text{C}$ -os lépésekben! Számítsuk ki és ábrázoljuk a mért pontokban a törésmutatókat! Határozzuk meg a fázisátalakulás kritikus hőmérsékletét!
2. Határozzuk meg a mintában a folyadékkristályt alkotó molekulák orientációját (a direktor irányát)!
3. Vegyük fel a csavart nematikus cella feszültség-intenzitás karakterisztikáját  $100$  Hz frekvenciájú szinuszzel a  $0 - 20$  V csúcstól-csúcsig feszültségtartományban (17.11. ábra). Milyen feszültséggel célszerű a kijelzőt működtetni?



17.11. ábra. Mérési elrendezés a folyadékkristály-kijelzők vizsgálatához. G - hullámforma generátor, P - polarizátor, A - analizátor (P-re merőleges állású polárszűrő), C - cella, FD - fotodióda, O - oszcilloszkóp

4. Vegyük fel a csavart nematikus cella frekvencia-intenzitás karakterisztikáját 10 – 1000 Hz frekvenciatartományban az előző feladatban meghatározott optimális feszültségű szinuszzellel! Mit mondhatunk a cella működési sebességéről?
5. Oszcilloszkóppal vizsgáljuk meg a cellán átmenő fény intenzitásának időfüggését különböző frekvenciájú és jelalakú feszültségek esetén! Becsüljük meg a kijelző kapcsolási idejét!
6. Állítsuk be a ferroelektromos cellát a 17.8. ábrán látható módon!
7. Vizsgáljuk meg a ferroelektromos cellán átmenő fény intenzitásának időfüggését különböző frekvenciájú és jelalakú feszültségek esetén! Határozzuk meg a kijelző kapcsolási idejét!
8. Hasonlítsuk össze a két típusú cella működését! Megfelel-e a ferroelektromos cella a felületstabilizált ferroelektromos kijelző működéséről leírtaknak?

### Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozunk Éber Nándornak, aki a mérésnél használt mintákat készítette el számunkra és a mérésleírás elkészítésében is segítséget nyújtott.

## 17.8. Ajánlott irodalom

- [1] F. Reinitzer: *Beiträge zur Kenntniss des Cholesterins*, Monatshefte für Chemie (Wien) **9**, 421–441 (1888).
- [2] O. Lehmann: *Flüssige Krystalle*, Leipzig, 1904.
- [3] Bata Lajos: *Folyadékkristályok*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986.
- [4] G. Meier, E. Sackmann, J. G. Grabmaier: *Application of Liquid Crystals*, Springer Verlag, Berlin, 1975.

## 18. fejezet

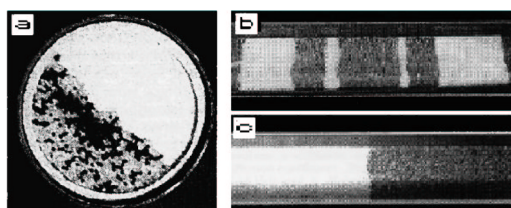
# Granuláris anyagok (Koltai János és Tegzes Pál)

### 18.1. Bevezetés

Granuláris vagy más néven szemcsés anyagoknak azokat a rendszereket nevezzük, amelyek nagy számú  $10^4 - 10^{15}$  makroszkopikus (jellemzően  $10\mu\text{m} - 10\text{m}$  közti nagyságrendű) részecskéből állnak. Ebben a mérettartományban a legjellemzőbb hatások a részecskékre ható gravitációs erő, a két részecske összenyomódásakor fellépő taszító-erő és az érintkezési pontokban jelentkező súrlódási erő. A legegyszerűbb esetben a részecskék között vonzó kölcsönhatás nincs. A gyakorlatban ezt a viszonylag egyszerű képet számos tényező bonyolíthatja, például a részecskék közti közeg (levegő) hatása, nedvesség jelenléte esetén a felületi feszültségből vagy nagyon finom poroknál a Van der Waals kölcsönhatásból adódó vonzó kölcsönhatás, a szemcsék elektrosztatikus feltöltődéséből adódó hosszútávú hatások, stb. Ezek a járulékos hatások igen érdekes jelenségeket okoznak, azonban a szemcsés anyagok viselkedése ezek nélkül is rendkívül gazdag és összetett.

A szemcsés anyagok gyakorlati jelentősége igen nagy, szerepet játszanak a mezőgazdaság és az ipar csaknem minden területén. A gyakorlatban előforduló szemcsés anyagokat lehetetlen felsorolni: ide tartoznak a különböző építőipari alapanyagok, mint pl. a homok és a cement; az élelmiszerek, mint a cukor, a borsó, a fűszerek vagy a burgonya; a mosó- és fertőtlenítőszeres, festékanyagok, gyógyszerek, kozmetikai cikkek, növényvédő és rovarirtó szerek, robbanóanyagok és lőszerek, műanyag-ipari alapanyagok, a szén és más szilárd fűtőanyagok; de ide sorolható számos késztermék is: a műanyagárúk, a különféle elektronikai alkatrészek, a csavarárúk, stb. Ezek hatékony szállítása, tárolása, kezelése és feldolgozása kulcsfontosságú, ez magyarázza, hogy évtizedek óta folynak mérnöki kutatások a szemcsés anyagokkal kapcsolatban.

A fizikusok érdeklődésének középpontjába az 1990-es években kerültek a granuláris anyagok. Világossá vált, hogy fizikai leírásuk korántsem triviális. Mivel a részecskék



18.1. ábra. Szemcsés anyagokban fellépő szegregációs effektusok. a) Radiális szegregáció 2 dimenzióban. A fehér szemcsék 3 mm-es üveggolyók, a feketék 3 ilyen golyóból összeragasztott nagyobb szemcsék. b,c) Axiális szegregáció 3 dimenzióban. Hosszú forgó hengerekbe kétféle szemcseméretű homok keverékét helyezték, a sötét szemcsék nagyobbak, mint a világosak. b) Tranziens szegregációs mintázat. c) Kb.  $10^6$  fordulat után kialakuló végállapot. [1]

átlagos helyzeti energiájához képest az egy szabadsági fokra jutó  $k_B T$  termikus energia elhanyagolható, így elveszik a hőmérséklet átlagoló szerepe, amely a sokrészecske-rendszerek leírását megkönnyítette. Nem alakul ki termikus egyensúly, nincs ergodicitás, külső megzavarás nélkül a rendszer bármely metastabil állapota végtelen sok ideig fennmarad. Keveredés, homogén eloszlások kialakulása helyett rendeződés, szegregáció, komplex struktúrák kialakulása lép fel. Mivel hiányzik a hőmozgás által biztosított mikroszkopikus sebességskála, a granuláris anyagok folyása nem írható

le a Navier-Stokes egyenletekhez hasonlóan, és a kialakuló áramlási kép is gyökeresen különbözik a viszkózus folyadékoktól: általában nem folyik az anyag egésze, hanem szétválik egy nyugvó és egy mozgó fázisra, lejtőkön lavinák, csövekben visszafelé haladó sűrűség hullámok, esetleg a folyást teljesen leállító akadályok alakulnak ki.

A szemcsés anyagok különleges fizikája számos meglepő jelenséghez vezet. Ezek közül a legismertebbek a különböző szegregációs effektusok (18.1. ábra), a rezgéses gerjesztés hatására kialakuló konvekció és halom képződés, valamint a rezgetett vékony granuláris rétegben fellépő jelenségek: a szabályos geometriai formákba rendeződő szubharmonikus állóhullámok, és a lokalizált gerjesztések, az ún. oszcillonok (18.2. ábra).

## 18.2. Nyugalmi állapot

A granuláris anyagok leírása még nyugalmi állapotban sem egyszerű. A fő nehézséget és egyben a probléma érdekességét az adja, hogy a részecskék egymással csak az érintkezési pontokban hatnak kölcsön, amelyek egy kvázi-véletlenszerű hálózatot alkotnak az anyagon belül. A részecskék súlyából és az esetleges egyéb külső mechanikai hatásokból származó erők az anyagon belül csak ezen a hálózaton terjedhetnek tovább. Ezen felül az, hogy egy érintkezési pontban mekkora erő lép fel, az szintén függeni fog az adott mikroszkopikus elrendeződéstől, a részecskék pontos alakjától, felületi tulajdonságaitól;

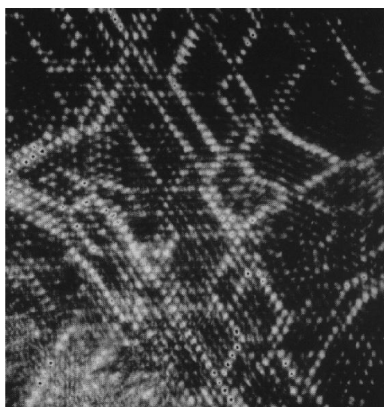


18.2. ábra. Rezgetett vékony granuláris rétegben kialakuló lokalizált állóhullám, úgynevezett oszcillon. A szemcsék 0,15 - 0,18 mm-es bronz golyók, a rétegvastagság 17 részecskényi. Az oszcillonok megjelenéséhez a kísérletet vákuumban kell végrehajtani, a rezgés amplitúdóját és frekvenciáját egy adott szűk tartományban kell beállítani. [2]

vagyis szintén véletlenszerűnek tekinthető. Mindezek következtében a mintában fellépő mechanikai feszültségek eloszlása erősen inhomogén lesz. A kísérletek tanúsága szerint a legnagyobb feszültségek láncszerű struktúrák mentén jelentkeznek, ezeket nevezzük erő-láncoknak (18.3. ábra).

Az erő-láncok lefutását az érintkezési pontok hálózata, s ezen keresztül az egyes szemcsék konkrét helyzete határozza meg. Ebből az következik, hogy egy nyugvó granuláris rendszert nem lehet egyszerűen néhány állapot-jelzővel, mint például a rendszer geometriájával és a pakolás sűrűségével leírni. Látszólag azonos paraméterekkel rendelkező rendszereknek is lényegesen különböző lehet a viselkedése ha más módon készültek s emiatt más bennük az erő-láncok elhelyezkedése. Azt mondhatjuk, hogy a granuláris rendszereknek „memóriája van” az érintkezési pontok hálózatában rejtetten tárolódik az információ a minta előéletéről.

Az erő-láncok szerepét és a memória-effektusok fontosságát egy egyszerű példával világítjuk meg. Egy vízszintes felületen hozzunk létre homok halmot olyan módon, hogy egy szűk tölcseren keresztül öntjük a homok szemeket a készülő halom tetejére. Ha ekkor megmérjük a halom alján fellépő függőleges erők eloszlását, arra a meglepő eredményre jutunk, hogy bár a halom közepe felé haladva a mért erő fokozatosan növekszik, közvetlenül a csúcs alatt nem maximum, hanem egy lokális minimum figyelhető meg. Ennek az a magyarázata, hogy a kialakuló erő-láncok rendszere a boltívekhez hasonlóan két oldalra vezeti le a közepén lévő anyag súlyát. Ha azonban más módon, egy szítán keresztül öntve építünk fel egy geometriailag azonos homok halmot, akkor az erőeloszlás megváltozik, és a lokális minimum eltűnik.



18.3. ábra. Polarizált fény segítségével láthatóvá tett feszültségeloszlás két dimenziós granuláris anyagban. A világosabb szemcsék nagyobb feszültséget viselnek. Jól látható, hogy ezek a szemcsék láncszerű struktúrákban helyezkednek el.[3]

A laborgyakorlat során az erőláncok hatását vizsgáljuk két egyszerű kísérletben. Az első kísérletben az erőláncok jelenlétének egy makroszkopikus következményét vizsgáljuk, a második kísérletben pedig mikroszkopikus szinten, az egyes szemcsékre ható erőket mérjük.

### 18.3. A nyomás mélységfüggése granuláris oszlopban

A laborgyakorlat első mérése során magas, hengeres tartóba helyezett granuláris anyag alján mérjük a függőleges irányban ható nyomóerőt. Több mint száz éve ismert tény, hogy a szemcsés anyagokban fellépő nyomás nem írható le a hidrosztatikából jól ismert  $P(z) = \rho gz$  képlettel. Az oszlop magasságát növelve az oszlop alján a nyomás nem nő lineárisan a végtelenig, hanem egy adott karakterisztikus magasság fölött telítésbe megy, és végtelen magas oszlop esetén is véges nyomást mérhetünk. Ez a jelenség az anyag belsejében és a falaknál fellépő sűrűlódás és a kialakuló erőláncok rendszerének közvetlen következménye: a boltívszerűen rendeződő erőláncok az edény falának közvetítik szemcsék súlyából származó erőt, és egy idő után a hozzáadott anyag teljes súlyát a falak tartják meg.

A jelenség kvantitatív leírására Janssen 1895-ben javasolt egy egyszerű modellt, amelynek feltevései szigorúan véve ugyan nem mind megalapozottak, eredményei viszont jól egyeznek a kísérletekkel. Ennek a modellnek azóta számos finomított illetve továbbfejlesztett változata látott napvilágot, és a probléma gyakorlati jelentőségéből adódóan sokan végeztek kísérleteket is. A kísérleti eredmények alapján nem lehet azonban a különböző modellek közül egyet, mint legjobbat kiválasztani, minthogy az adatok szórása

igen nagy, és még azonos minta-előkészítési eljárás használatával is gyakran ellentmondó eredmények születnek. A laborgyakorlat során mi egy igen egyszerű kísérleti elrendezést használunk, és a jelenség lényegének bemutatására szorítkozunk, így eredményeink értelmezéséhez használhatjuk Janssen gondolatmenetét.

### 18.3.1. A Janssen-modell rövid ismertetése

Tekintsünk egy  $R$  sugarú függőleges hengeres edényt megtöltve granuláris anyaggal, melynek átlagos sűrűsége  $\rho$ ! Feltesszük, hogy a függőleges nyomás nagysága csak a mélységtől függ, tehát  $P(x, y, z) = P(z)$ . Az anyag minden  $dz$  vastagságú,  $S = R^2\pi$  felületű vízszintes szeletének egyensúlyban kell lennie. Erre a szeletre hat a saját tömegéből adódó gravitációs erő, a fölötte és alatta mérhető nyomás különbségéből származó erő és a falaknál fellépő súrlódási erő:

$$\rho g S dz - \frac{dP(z)}{dz} S dz - dF_{\text{frict}} = 0. \quad (18.1)$$

A modell lényege, hogy feltesszük, hogy a vízszintes irányban mérhető nyomás arányos a függőleges nyomással:  $P_{\text{hor}}(z) = KP(z)$ , ahol  $K$  egy konstans, az ún. Janssen együttható. Ezen kívül feltesszük azt is, hogy a falaknál fellépő tapadási súrlódási erők mind felfelé mutatnak, és maximális értéküket veszik fel, így :

$$dF_{\text{frict}} = \mu KP(z) \cdot 2\pi R dz, \quad (18.2)$$

ahol  $\mu$  a fal és az anyag közti súrlódási együttható. Ezt behelyettesítve a (18.1) egyenletbe a következő inhomogén lineáris differenciálegyenletet kapjuk:

$$\frac{dP(z)}{dz} + \frac{1}{\lambda} P = \rho g, \quad (18.3)$$

ahol

$$\lambda = \frac{R}{2\mu K}. \quad (18.4)$$

A differenciálegyenlet megoldása a  $P(0) = 0$  kezdőfeltétellel:

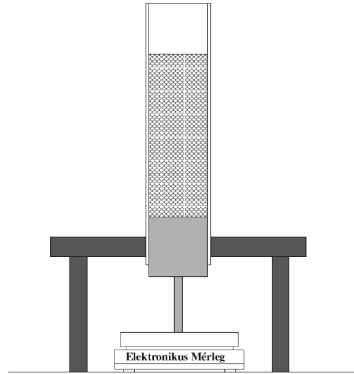
$$P(z) = \lambda \rho g [1 - e^{-z/\lambda}], \quad (18.5)$$

vagyis  $z$  növelésével a nyomás exponenciálisan telítésbe megy, és a telítődés karakterisztikus távolsága  $\lambda$ . Ez az eredmény viszonylag jó egyezést mutat a kísérletekkel.

### 18.3.2. A mélységfüggés-mérés menete

A mérési összeállítás vázlatos rajza a 18.4. ábrán látható. A szemcsés anyag egy függőleges üveghengerben helyezkedik el, melynek átmérője 4,7 cm, magassága kb. 60 cm. A





18.4. ábra. Mérési összeállítás a granuláris anyag alján fellépő nyomás mérésére

henger alját egy könnyen mozgó dugattyú zárja le. A dugattyúra ható erőt elektronikus mérleggel mérjük, melynek felbontása  $\pm 2\text{g}$ , méréshatára  $5000\text{g}$  (kerüljük a túlterhelését!). A mérlegről leolvashatjuk a granuláris oszlop  $m_l$  látszólagos tömegét. A (18.5) egyenletből következik, hogy a látszólagos tömegnek szintén exponenciális telítődést kell mutatnia az oszlop  $m$  valódi tömegének függvényében:

$$m_l(m) = m_\infty [1 - e^{-m/m_\infty}]. \quad (18.6)$$

A mérés során ezt az összefüggést próbáljuk kimérni.

## 18.4. A mikroszkopikus erőeloszlás vizsgálata

### 18.4.1. A q-modell

Mint korábban említettük az erőláncok lefutását az érintkezési pontok kvázi-véletlenszerű hálózata szabja meg, így azt pontosan nem tudjuk megjósolni. Megkísérelhetjük viszont ennek a véletlenszerű hálózatnak a statisztikus leírását, s ebből értékes információt nyerhetünk a kialakuló erőkre vonatkozóan is. C.-h. Liu és társai 1995-ben javasoltak egy egyszerű elméleti modellt, ami jóslatot ad az egyes szemcsékre ható erők eloszlására [4].

A modell feltevése szerint az erőláncok kialakításában domináns szerepet játszik az, hogy a szemcsék elhelyezkedésében mutatkozó szabálytalanságok miatt egy kiszemelt szemcsére felülről ható erők nem egyenletesen oszlanak meg az őt tartó szemcsék között. Tekintsünk egy szabályos rácsot, melynek minden rácsponthoz egy egységnyi tömegű részecske található. Minden részecske az alatta lévő rétegben lévő  $N$  másik részecskén nyugszik. Egy adott szemcsére ható összes súlyerő ennek az  $N$  részecskének továbbított erőt véletlenszerű megoszlásban: az  $i$ -ik részecske által a  $j$ -ik részecskének továbbított erőt

jelölje a  $q_{ij}$  véletlen változó. (Az egyszerűség kedvéért a modellben eltekintünk az  $N$  koordinációs szám változásaitól és nem foglalkozunk az erők vízszintes komponensével.) Hasonlóképpen egy adott részecskére ható súlyerő a felette lévő rétegben vele kapcsolatban lévő  $N$  darab szemcse járulékaiból adódik össze, ehhez adódik a saját súlya (= 1). Eszerint az  $M$  mélységben lévő  $i$ -ik részecske által megtartott súly,  $w(M, i)$ , a következő sztochasztikus egyenletet kell, hogy kielégítse:

$$w(M, i) = 1 + \sum_{j=1}^N q_{ji}(M-1)w(M-1, j). \quad (18.7)$$

A valóságban a  $q_{ij}$  változók térben korreláltak: ha egy ponton az erők adott módon oszlanak meg, akkor annak kihatása van a pont környezetére is. A modell keretein belül figyelmen kívül hagyjuk ezeket a térbeli korrelációkat, és feltesszük, hogy a  $q_{ij}$  változók mindenütt azonos eloszlást követnek. Ez a feltevés lényegében az átlagtér-közelítésnek felel meg. A  $q_{ij}$  változók eloszlására sokféle feltevést tehetünk, az egyetlen megkötés, hogy eleget kell tennie a

$$\sum_{j=1}^N q_{ij} = 1 \quad (18.8)$$

kényszerfeltételnek, ami az egyes szemcsék egyensúlyát biztosítja. A legegyszerűbb választás az, amikor a kényszerfeltételnek eleget tevő minden  $q_{ij}$  készlet valószínűsége azonos. Belátható, hogy ekkor az egy szemcse által megtartott redukált súly,  $v = w/M$  eloszlásfüggvénye  $M \rightarrow \infty$  határesetben egy adott eloszláshoz tart:

$$P_{\text{egyenletes}}(v) = \frac{N^N}{(N-1)!} v^{(N-1)} e^{-Nv}. \quad (18.9)$$

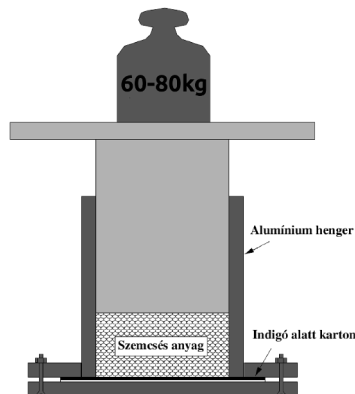
Megmutatható, hogy ha a  $q_{ij}$ -k eloszlására más feltevést teszünk, átlagtér-közelítésben akkor is hasonló eredményre jutunk, nagy  $v$ -k esetén:

$$P(v) \propto v^{N-1} e^{-av}, \quad (18.10)$$

ahol  $a$  konstans. Arra jutottunk, tehát, hogy a szemcséken mérhető erők eloszlása exponenciálisan cseng le. Ez jóval lassabb lecsengés, mint a Gauss-eloszlásban szereplő  $e^{-x^2}$ , vagyis arra utal, hogy az átlagos erőnél lényegesen nagyobb erők súlya meglepően nagy. Ezt az eredményt fogjuk a gyakorlat során kísérletileg ellenőrizni.

### 18.4.2. Az erőeloszlás mérés menete

A mérést a 18.5. ábrán látható elrendezésben végezzük. Egy henger alakú tartó aljára kartonlapra helyezett indigót erősítünk. A tartóba szabályos üveggolyókból álló szemcsés anyagot töltünk, amelyre egy dugattyú segítségével kb. 600 – 800 N nagyságú erővel



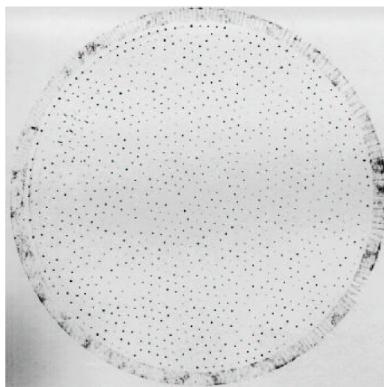
18.5. ábra. Mérési összeállítás a szemcsés anyagban az egyes szemcsékre ható erők eloszlásának vizsgálatára

hatunk. Az erő a szemcsés anyagban az erőláncokon keresztül továbbítódik a falaknak és az edény aljának. Az edény alján lévő szemcsék nekinyomódnak az indigónak, és a rájuk ható erővel arányos nagyságú nyomot hagynak a kartonpapíron. Így a kartonlapon lévő foltok méreteloszlásából következtethetünk az erőeloszlásra.

A kísérlet egyszerű, de odafigyelést igényel, hajtsuk végre gondosan! A kartonlapot és az indigót vágjuk méretre, és a csavarokkal erősítsük a tartó alá. Ügyeljünk, hogy közben az indigó ne fesse meg a lapot, mert az megnehezíti az eredmény kiértékelését! Töltsünk szemcsés anyagot a tartóba! Igen fontos, hogy a töltéskor a szemcsék ne ütközzenek nagy sebességgel a tartó aljának, mert az ettől származó nyomok teljesen elmoshatják a végeredményt. Az óvatos töltésben segíthet egy, az edénybe helyezett lap, mely lefékezi a golyókat. Itt jegyezzük meg, hogy a kísérlethez használt anyag nem olcsó, és csak külföldről szerezhető be, vigyázzunk rá, hogy ne szóródjon ki! A szemcsés anyag felszínét óvatos, vízszintes irányú rázással hozzuk vízszintesbe, ekkor ráhelyezhetjük a dugattyút! A dugattyúra ráállva a testsúlynak megfelelő, kb. 60 – 80 kg-mal terheljük meg felülről a szemcséket! Igyekezzünk a dugattyúra egyenletes erővel hatni, tehát nem ugrálni rajta, de arra is figyeljünk, hogy ne essünk le róla!

Néhány másodperc múlva le lehet lépni a dugattyúról.

A dugattyút óvatosan távolítsuk el: mivel nagyon pontosan illeszkedik a hengerbe, ezért a levegő nehezen tud a helyére bejutni, ennek ellenére szép lassan azért kiemelhető. A dugattyú alá gyakran rátapad egy-két szemcsé, figyeljünk rá, hogy ezek ne guruljanak el. A szemcsés anyag kiöntése és a tartó szétcsavarozása után megtekinthetjük a kapott mintázatot, ami a 18.6. ábrához lesz hasonló. Ezt egy scanner segítségével számítógépbe visszük, majd a 18.7.1. szakaszban leírt módon meghatározzuk a foltok méreteloszlását. A statisztikai hibák csökkentése érdekében hajtsunk végre több független mérés, és ezek együtteséből határozzuk meg az eloszlást.



18.6. ábra. Az indigóra nyomódó részecskék által hagyott tipikus mintázat az erőeloszlás mérésénél

Ahhoz, hogy a méreteloszlást erőeloszlássá transzformáljuk, meg kellene becsülnünk, hogy egy adott foltméret mekkora erőnek felel meg. Ez azonban viszonylag nehézkes, és feltehetjük, hogy a foltméret – meglehetősen nagy szórással – arányos a ható erővel. Mivel úgysis az eloszlásfüggvény alakjára vagyunk kíváncsiak, ezért mindegy, hogy nyomóerőt ( $N$ -t) vagy foltméretet (pixelszámot) használunk. A lineáris közelítés miatt az egyikről a másikra való áttérés nem változtatná meg az eloszlásfüggvény alakját.

## 18.5. Számolási feladatok

- Igazoljuk, hogy, a (18.6) egyenlet valóban következik a (18.5) egyenletből, és adjuk meg  $m_\infty$  értékét a kísérlet paramétereivel!

## 18.6. Gyakorló kérdések

1. Mik a granuláris anyagok?
2. Milyen kölcsönhatások hatnak a részecskék között?
3. Miért nem működnek a szokásos statisztikus fizikai módszerek a granuláris anyagokra?
4. Milyen a nyomás mélységfüggése granuláris anyagoszlopban?
5. Mik a Janssen-modell legfőbb feltételezései?
6. Írjuk fel a Janssen-modell differenciálegyenletét!

7. Mit ír le a Janssen-együtthető? Mekkora lenne egy hagyományos folyadékban a Janssen-együtthető értéke?
8. Miért kell többször megismételni a mélységfüggés mérését?
9. Mekkora tapadási együtthető egy lejtőre helyezett test esetén?
10. Mit ír le a q-modell?
11. Milyen a granuláris anyaggal töltött edény alján mérhető redukált súly eloszlásfüggvénye?
12. Miért érdemes többször megismételni az erőeloszlás mérését?
13. Milyen szemcsékkel kell az erőeloszlás mérést elvégezni? Miért?
14. Miért tartozik ez a mérés a modern fizika témakörébe? Miért a XX. század utolsó évtizedében indult a terület erőteljes fejlődésnek?

## 18.7. Mérési feladatok

### A nyomás mélységfüggésének mérése granuláris anyagoszlopban

1. A mérés során a hengerbe ismert tömeget kell fokozatosan adagolni. Ehhez használhatjuk a mérésnél található merőkanalat. A nagyobb pontosság (illetve egy felesleges véletlenszerű hiba kiküszöbölése érdekében a poharakba előre mérjük ki ismert, egyforma tömegeket a vizsgált anyagból. A betöltés a poharaktól folyamatos és megfelelő pontossággal megismételhető lesz. Anyagtól függően 1 – 2 merőkanálnyi anyagot töltünk a poharakba!
2. Mérjük meg üres henger esetén a dugattyú tömegét! Becsüljük meg a dugattyú súrlódásából származó hiba nagyságát. A mérleget ne tárazzuk, mert akkor hibásan fog mérni (a mérleg nullszintje elcsúszik)!
3. Mérjük ki a látszólagos tömeg függését a valódi tömegtől az egyik granuláris anyag esetén! Minden anyag esetén legalább 3 független méréssorozatot végezzünk, és adjunk becslést a mért adatok szórására! Mérjük az oszlop magasságát is, és becsüljük meg az anyag sűrűségét! (Mivel a modell a sűrűséget egyenletesnek veszi, ezért a magasságot elegendő minden feltöltés végén megmérni.) Vizsgáljunk meg két különböző töltési eljárást!
4. A mérési adatokra illesszünk a (18.6) egyenletnek megfelelő függvényalakot, és határozzuk meg  $m_\infty$  értékét! Elemezzük a jósolt függvényalaktól való esetleges eltéréseket! Vessük össze a mért adatok szórását a mérési pontatlanságokból és a berendezés tökéletlenségéből származó bizonytalansággal!

5. Egyszerű méréssel becsüljük meg az anyag és az üvegfal közti súrlódási együtthatót! (Például alkalmas tárgyra ragasszunk fel szemcséket és helyezük lejtőre.)
6. A mért  $m_\infty$  értékekből határozzuk meg a Janssen-együtthatót és hibáját!

### Az erőeloszlás mérése granuláris anyaggal töltött edény alján

1. Készítsünk legalább 5 darab lenyomatot a korábban részletezett módon! A lenyomatok elkészítése során törekedjünk arra, hogy azok azonos körülmények között készüljenek el!
2. A fent ismertetett módon határozzuk meg az egyes szemcséken mérhető erők eloszlását! A kapott görbét ábrázoljuk szemilogaritmikus ábrában, ahol az exponenciális lecsengés egy egyenesként jelenik meg! Illesszünk a (18.10) egyenletnek megfelelő függvényalakot, illetve a folyadékknál várható Gauss-görbés  $e^{-x^2}$  lecsengést! Hasonlítsuk össze ezen két elméleti görbe illeszkedését! Minden mért adatunkra becsüljük meg a mérés hibáját is!
3. Vizsgáljuk meg az eloszlásfüggvény homogenitását is! A lenyomaton egyenlő területű részeket kijelölve, az egyes részekeken mérhető eloszlásfüggvények eltérése utalhat inhomogenitásra. Ezen vizsgálat elvégzésére vágjuk fel két egyenlő területű darabra a kör alakú lenyomatot, készítsünk mindkettőből egy-egy hisztogramot, majd hasonlítsuk össze őket!

Kétféle felosztási módot is próbáljunk ki: az első esetben egy átmérővel bontsuk jobb ill. baloldali részekre, a második esetben egy koncentrikus körrel egy belső körlapra és egy külső körgyűrűre.

## 18.7.1. Praktikus tanácsok

### A mélységfüggés mérése

- Törekedjünk arra, hogy minél kevesebb véletlen eseményt, zavart vigyünk a mérésbe! Ne várákozzunk véletlenszerű időtartamokat két pohár betöltése között, ne rázogassuk az anyagot, stb.
- Érdemes egy másik asztalon jegyzetelni a mérés során.
- A mérlegnek van „auto-logoff” funkciója, ami kikapcsolja a mérleget, ha túl hosszan tétlenkedünk.
- A csillapított betöltés során a pálcával ne lökjük meg a hengert, és ne tömörítsük vele a granuláris anyagot a hengerben!

## Az erőeloszlás mérése

A mérés során ügyeljünk az alábbi követelmények betartására:

1. A pontosabb eredmények elérése érdekében több lenyomaton mérhető eloszlást kell együtt kiértékelni. Az egyes eloszlások összeadása csak akkor jogos, ha azok azonos módon készültek. Azaz ugyanakkora terheléssel, ugyanolyan módon szkennelve, ugyanolyan küszöbszintet használva, stb.
2. A mérés során digitális képeket kell elemezni. Fontos, hogy a feldolgozás során tilos veszteséges kép-formátumot (pl. **jpeg**) használni, mert a veszteséges tömörítés okozta információvesztés illetve az általa okozott zaj megzavarhatja a mérést. A képek **bmp** formátumban készülnek, legegyszerűbb a feldolgozás során végig ilyen formátumot használni.

A kiértékelés folyamata:

1. Az elkészült lenyomatok beszkenyelése, legalább 600 dpi felbontásban, 8bpp szürkeárnyalatos **bmp** fájlba. Erre mód van a laborban, de a keletkező kb. 20 MB nagyságú képeket el kell tudni vinni (pendrive, scp, ...)! Ha ez megoldhatatlan, akkor a kiértékelés ezen részét megbeszélte időpontban (laboridőben, ha van elég idő) a tanszéken is el lehet végezni.
2. Képfeldolgozó program és kiértékelő program letöltése. Ajánlott ingyenes képfeldolgozó program a **gimp**, amelyet **WINDOWS**-hoz a <http://www.gimp.org> oldalon találtak. **LINUX** alatt általában a disztribúcióban benne van vagy feltehető, de ha nincs, akkor a <http://www.gimp.org> oldalról beszerezhető. A kiértékelő programok a labor honlapjáról tölthetőek el.
3. Képfeldolgozó (**WINDOWS**: Paint, Photoshop, **gimp**, **LINUX**: **gimp**) program segítségével ki kell vágni a képekből a kiértékelendő kör alakú tartományt.
4. Küszöbérték kiválasztása (az ennél fényesebb pontok jelentik majd a háttérrel, a sötétebbek a foltokat). A **gimp**-ben az **Eszközök->Színeszközök->Küszöbszint** menüpont segítségével a legegyszerűbb. A küszöbértéket addig kell változtatgatni, amíg az előképen szemmel láthatóan csak a háromszögrácsba illeszkedő pontok maradnak meg. A panelen található hisztogramon egy csúcs látszik, ennek a csúcsnak bal szélénél érdemes próbálgatni. A küszöbértéket meg kell jegyezni, és a további ábrákon is ezt használni (ha egyforma papírt használtok a mérés alatt, akkor ez a papír „fehér” színe).
5. A **dispot** (windows-on **dispot.exe**) program futtatása, magától értetődően. (A bemenetként megadott képnek 8 bites, szürkeárnyalatú **bmp** formátumúnak kell

lennie. Biztonság kedvéért érdemes a képformátumot tesztelni: a lenyomatból apró részeket kivágni, amelyeken 0, 1, 2 folt látható, ezekre lefuttatni a programot és az eredményt kézzel ellenőrizni. Hibás képformátum esetén a program lehet, hogy némán butaságot fog csinálni, és hibás eredményt fog adni.)

6. Az `histog` program (windows-on `histog.exe`) futtatása, magától értetődően. Érdemes többféle dobozméretet (10, 15, 20, 30) megpróbálni. A túl kicsi sem jó, de a túl nagy sem mutat semmit!
7. A `gnuplot` program segítségével az eloszlásfüggvényre Gauss– illetve exponenciális függvényt is kell illeszteni. Az illesztés hibáját figyelembe véve el kell dönteni, hogy melyik illeszkedik jobban. Az eredményeket szemilogaritmusan (`set log y`) is rajzoljátok fel!

### **Köszönetnyilvánítás**

A jegyzet elkészítésében nyújtott segítségéért köszönet illeti Ábel Dánielt, a Biológiai Fizika Tanszék korábbi doktoranduszát.

## **18.8. Ajánlott irodalom**



- [1] R. Chicarr, R. Peralta-Fabi, and R.M. Velasco. Segregation in dry granular systems. In Behringer and Jenkins, editors, *Powders et Grains 97*, pages 479–481. Balkema, Rotterdam, 1997.
- [2] Paul B. Umbanhowar, Francisco Melo, and Harry L. Swinney. Localized excitations in a vertically vibrated granular layer. *Nature*, 382:793–796, 1996.
- [3] G.W. Baxter. Stress-distributions in a two dimensional granular material. In Behringer and Jenkins, editors, *Powders et Grains 97*, pages 345–348. Balkema, Rotterdam, 1997.
- [4] C. h. Liu, S. R. Nagel, D. A. Schecter, S. N. Coppersmith, S. Majumdar, O. Narayan, and T. A. Witten. Force Fluctuations in Bead Packs. *Science*, 269(5223):513–515, 1995.

# A. függelék

## Atomspektroszkópia (Kürti Jenő)

### A.1. Bevezetés

Az **A.** függelékben az atomi energiaszintek termjelölését, a spektrumvonalak finom- és hiperfinom felhasadását, a Zeeman-effektust valamint a röntgentermeket ismertetjük röviden.

### A.2. Atomi termék jelölése

Maga a *term* fogalma spektroszkópiai eredetű, amit még a diszkrét energiaszintek felfedezése előtt vezettek be (Ritz-féle kombinációs elv). Manapság gyakran értik *term* alatt magát az energianívót, az **A.** és **B.** függelékben mégis a spektroszkópiában elterjedt  $E = hcT$  összefüggés alapján fogunk különbséget tenni term ( $T$ ) és energia ( $E$ ) között. Ezek szerint például a Bohr-féle (Planck-féle) feltétel így írható:  $\tilde{\nu} = T' - T'' = (E' - E'')/hc$ , ahol  $\tilde{\nu}$  a spektroszkópiában használatos hullámszám (dimenziója  $1/m$  vagy  $1/cm$ ).

Atomi energianívók jellemzése az alábbi kvantumszámokkal lehetséges:

- $n$  : főkvantumszám (1, 2, 3, 4, ..., betűjelöléssel: K, L, M, N, ...)
- $L$  : az eredő pályá-impulzusmomentum kvantumszáma (0, 1, 2, 3, 4, ..., melyet betűjelöléssel szokás megadni: S, P, D, F, G, ...)
- $S$  : az eredő spin-impulzusmomentum kvantumszáma (ezt a  $2S + 1$  multiplicitással szokás megadni)
- $J$  : az elektronok össz-impulzusmomentum kvantumszáma (a lehetséges értékek  $L + S, \dots, |L - S|$  közé esnek, egyesével változva)

- $m_j$  : mágneses kvantumszám ( $j, j - 1, \dots, -j$ )

A felsorolt kvantumszámok segítségével a következő módon szokás fölírni az egyes atomi energiaszinteket:

$$n^{2S+1}L_J \quad . \quad (A.1)$$

Ezzel a jelöléssel pl. a nátriumatom alapállapota (melynek konfigurációja  $1s^22s^22p^63s^1$ , rövidebb jelöléssel  $[\text{Ne}]3s$ ):  $3^2S_{1/2}$  (kiejtése: három-dublett-S-egyketted). Itt az első szám a legkülső (ún. világító) elektron állapotának főkvantumszáma ( $n=3$ ), a betű a pálya-impulzusmomentum kvantumszámot jelöli ( $S$ , azaz  $L=0$ ), a bal felső szám a lehetséges spinbeállások száma, az ún. multiplicitás ( $2S + 1 = 2$ , azaz  $S = 1/2$ ), míg a jobb alsó index megadja az össz-impulzusmomentumot ( $J = 1/2$ ). (Mivel a nulla pálya-impulzusmomentumú  $S$  állapot és az  $S$  spin jelölése nagyon hasonlít, figyelmet kell fordítani azok megkülönböztetésére!)

Az elterjedt konvenció szerint nagy betűt használunk a többelektronos rendszer (az egész atom) állapotainak (impulzusmomentumainak) jelölésére, míg az egyelektron-állapotok illetve momentumok jelölése kis betűvel történik. Azonos  $n$  főkvantumszámú egyelektron-állapotok alkotják az ún. héjakat (K-héj, L-héj, ...). Adott héj alhéjakra bomlik, az  $l$  mellékkvantumszám szerint. Az alhéjak energia szerinti sorrendje:  $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < \dots$ . Ennek okára később még visszatérünk.

Noha a *konfiguráció - term - nívó - állapot* elnevezések használatát néha lazán szokták venni, és az utóbbiak jelentése gyakran keveredik, nem árt leszögezni, hogy szigorúan véve ezeknek van jól definiált értelme. Lássuk ezt a He példáján! Egy atom konfigurációját azzal specifikáljuk, hogy megadjuk az elektronok számát az egyes alhéjakon. A He-atom egy lehetséges gerjesztése lehet pl. a következő konfiguráció:  $1s^12p^1$ . Tekintettel az elektronok megkülönböztethetlenségére ez összesen  $2 \cdot 6 = 12$  különböző lehetőséget, állapotot jelent. Ez két term-re válik szét:  $2^1P$  illetve  $2^3P$ . Egy term-et tehát az  $L$  és  $S$  kvantumszámok jellemeznek. Az atomi nívó jellemzésére már a  $J$  kvantumszámot is meg kell adni, ami attól függ hogyan áll egymáshoz képest a pálya- és a spin-momentum. Az egyik term egyúttal egyetlen nívót (szintet) jelent:  $2^1P_1$ , a másik azonban három nívót:  $2^3P_0$ ,  $2^3P_1$  és  $2^3P_2$ . Ha az egyes nívók  $2J + 1$ -szeres degenerációját összeadjuk, megkapjuk az összesen 12 állapotot. Az azonos konfigurációhoz tartozó különböző termek, finomabb felbontásban pedig az egyes nívók közötti energiakülönbségek okára később még visszatérünk (Hund-szabályok). Végül pedig: egy adott atomi nívóhoz tartozó állapotoknak a mágneses kvantumszám szerinti degenerációja külső mágneses tér hatására megszűnik (Zeeman-felhasadás).

### A.3. Mágneses momentumok

Az atomok többfajta mágneses momentummal rendelkezhetnek, ami egyrészt - a belső kölcsönhatásokon keresztül - az energianívók további felhasadásához vezet (a spin-pálya

kölcsönhatás a finomszerkezetet eredményezi, míg a magmágneses momentummal való kölcsönhatás a hiperfinom szerkezetet), másrészt az atomi mágneses momentum(ok) külső mágneses térrel való kölcsönhatása(i) az energianívók további felhasadását eredményezi(k) (Zeeman-effektus).

Az atomok mágneses momentuma három komponensből adódik: az elektronok magköri pályamozgásából, valamint az elektronspin továbbá a magspin mágneses momentumaiból. Mindhárom komponens megadható a megfelelő impulzusmomentum-vektorral. (Itt  $\vec{L}$ ,  $\vec{S}$ ,  $\vec{J}$  és  $\vec{I}$  a  $\hbar$  egységekben mért, dimenziótlan impulzusmomentumokat jelöli.)

Az elektron pálya-impulzusmomentumával ( $\vec{L}$ ) kapcsolatos mágneses momentum a következő alakban adható meg:

$$\vec{\mu}_L = -g_L \mu_B \vec{L}. \quad (\text{A.2})$$

Itt  $\mu_B = e\hbar/2m_e \approx 9,2740 \cdot 10^{-24}$  J/T, az ún. Bohr-magneton,  $m_e$  az elektron tömege,  $g_L = 1$  az elektron pályamozgáshoz tartozó g-faktora. (A negatív előjel az elektron negatív töltése miatt van.)

Az elektronspinhez ( $\vec{S}$ ) tartozó mágneses momentum:

$$\vec{\mu}_S = -g_S \mu_B \vec{S}. \quad (\text{A.3})$$

Itt  $g_S \approx 2$  az elektronspin g-faktora. A pontosabb spektroszkópiai érték:  $g_S = 2,00232\dots$  (A Dirac-egyenlet szerinti egzaktul 2-től való eltérésnek sugárzáselméleti oka van.)

A magspinhez ( $\vec{I}$ ) tartozó mágneses momentum:

$$\vec{\mu}_I = g_I \mu_N \vec{I}. \quad (\text{A.4})$$

Itt  $\mu_N = e\hbar/2m_p \approx 5,0508 \cdot 10^{-27}$  J/T, az ún. mag-magneton,  $m_p$  a proton tömege,  $g_I$  az atommag g-faktora, ami általában egységnyi nagyságrendű.

## A.4. Durva szerkezet, Hund-szabályok

Az atomi energiaszintek legjelentősebb, ún. durva szerkezetét az elektronok mozgási energiája valamint az atommaggal illetve egymással való (vonzó illetve taszító) Coulomb-kölcsönhatása szabja meg.

Egyetlen elektront tartalmazó (hidrogénszerű) atomokra, ionokra (H, He<sup>+</sup>, Li<sup>++</sup>, Be<sup>+++</sup> ...) csak az atommag vonzó hatása érvényesül. Ilyenkor – nemrelativisztikus közelítésben – az egyes termek csak a főkvantumszámtól függenek. (Az, hogy egy kötött állapotban lévő elektron energia-sajátértékei nem függenek a pálya-impulzusmomentumtól, az  $1/r$ -es potenciál sajátossága.) Az egyes termek már a Bohr-modellből helyesen adódnak:

$$T_n^0 = \frac{E_n^0}{hc} = -R_M \frac{Z^2}{n^2}, \quad (\text{A.5})$$

ahol  $R_M$  az  $M$  magtömeghez, ill.  $R_\infty$  a végtelen nagy magtömeghez tartozó Rydberg-állandó:

$$R_M = R_\infty \cdot \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}} \quad (\text{A.6a})$$

$$R_\infty = \frac{1}{hc} \cdot \frac{m_e e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2}, \quad (\text{A.6b})$$

és  $Z$  a rendszám,  $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$  pedig a finomszerkezeti állandó.

Az egyelektronos atomokra vonatkozó A.5 képlet relativisztikus korrekcióival lejjebb külön foglalkozunk. Előbb azonban a többelektronos atomokban föllépő sokkal jelentősebb hatásokat vesszük számba.

Először is: az egyelektron-állapotok  $l$  szerinti degenerációja megszűnik, ha több elektron van az atomban. Más szóval: adott héjhoz tartozó alhéjak energiája különböző. Ennek oka elsősorban az atommag elektromos terének a többi elektron általi árnyékolása, ami annál jelentősebb, minél távolabb kerül a kiszemelt elektron a magtól. A mag közelében való megtalálási valószínűsége ugyanis annál kisebb, minél nagyobb a pályamomentuma. (Egyre jobban „kiszorul” a centrifugális hatás miatt.) Adott  $n$  főkvantumszám mellett tehát az egyelektron-energia mélyül csökkenő  $l$  kvantumszámmal. Nátriumra pl. a legkülső elektronnak  $3s$  állapotban mintegy 2,1 eV-tal mélyebb az energiája, mint a  $3p$  állapotban. A kettő közti átmenet ( $3^2P \rightarrow 3^2S$ ) adja a Na színképében legerősebb, sárga színű, ún. D-vonalat  $\approx 589$  nm-nél.

Kölcsönhatásmentes elektronokra egy adott konfigurációhoz tartozó minden egyes term energiája azonos lenne, függetlenül a termet jellemző spin- illetve pályamomentum értékétől. Valójában az adott konfigurációhoz tartozó különböző termek nem degeneráltak, és ez megjelenik a spektrumvonalak durva szerkezetében. Sőt, ha egy adott termhez több különböző  $J$  eredő impulzusmomentum tartozik, akkor ezek degenerációja is megszűnik. Mivel ez utóbbi felhasadás az előzőhöz képest kisebb mértékű, ez adja a spektrumvonalak ún. finomszerkezetét. Az adott konfigurációhoz tartozó különböző nívók energiájának sorrendjére vonatkozik a három empirikus, ún. Hund-szabály. Hangsúlyozzuk, hogy ezek nem szigorúan megalapozottak, de az alapállapot meghatározására jól használhatók. A gerjesztett állapotok sorrendjére is gyakran jól működnek, de nem mindig, ezért óvatosan kell bánni velük.

A három Hund-szabály, csökkenő erősséggel:

$S=\max.$  szabály) A legmélyebb energiájú szint multiplicitása (eredő spinje) *maximális*. Hangsúlyozandó, hogy ez NEM a spinek közötti valamilyen közvetlen kölcsönhatás eredménye, hanem a Pauli-elv következménye. A szabály mögött az áll, hogy ilyenkor a sokelektron-állapot szimmetrikus a spinváltozókra, tehát antiszimmetrikus kell legyen a térbeli változókra, hogy a teljes hullámfüggvény antiszimmetrikus legyen a részecske-cserére (Pauli-elv). Ez azt jelenti, hogy a térbeli antiszimmetria miatt az elektronok azonos helyen való tartózkodásának nulla a valószínűsége, az elektronok maximálisan

elkerülik egymást. Az egyszerű magyarázat szerint emiatt csökken az elektronok közötti Coulomb-taszítás. Valójában ennél még fontosabb, hogy az elektronok egymást elkerülve mindnyájan kicsit közelebb kerülhetnek az őket vonzó atommaghoz úgy, hogy közben a köztük lévő taszítás nem nő meg túlságosan.

$L=\max.$  szabály) Adott multiplicitás mellett a legnagyobb pályamomentumú állapot energiája a legmélyebb, Ez kvalitatívan úgy szemléltethető, hogy az azonos irányban keringő elektronok jobban távol tudják tartani egymástól magukat, mint az ellenkező irányban keringők, amelyek minden körbemenetelnél kétszer is „találkoznak”.

$J=\min./\max.$  szabály) Adott  $S$  és  $L$  mellett energetikailag az a legkedvezőbb, ha minimális az eredő teljes perdület ( $J$ ) – amennyiben az adott atomi alhéj nem több mint felég van betöltve. Felénél jobban betöltött alhéjra pedig  $J$  maximális kell legyen, más szóval a zárt alhéjhoz „hiányzó” teljes impulzusmomentum legyen minimális. (Emlékeztetőül:  $J$  lehetséges értékei  $|L - S|$  és  $L + S$  között változnak, egyesével.) Ennek a szabálynak a háttérében a spin-pálya kölcsönhatás áll, amiről a következő pontban lesz szó.

Nézzük mindezt a szénatom példáján! A szénatom alapállapotú konfigurációja:  $1s^2 2s^2 2p^2$ . A legkülső,  $2p$  alhéjban a két elektron összesen  $(6 \cdot 5)/2 = 15$ -féleképpen helyezhető el. Ennek a 15 atomi állapotnak az energia szerinti felhasadása:  $2^3P_0 < 2^3P_1 < 2^3P_2 < 2^1D_2 < 2^1S_0$ . Az első Hund-szabály szerint a tripllett term mélyebben van a két szinglett termnél (az utóbbiakat nívóknak is hívhatjuk). A második Hund-szabály szerint a szinglett termek közül a D mélyebben van, mint az S. Végül, a harmadik Hund-szabály szerint a tripllett term fölhasad három nívóra, melyek közül a  $J=0$  a legmélyebb energiájú.

## A.5. Finomszerkezet, spin-pálya kölcsönhatás

A spin-pálya kölcsönhatás egy relativisztikus korrekció, még hozzá talán a legfontosabb. A legkisebb rendszámú elemeknél ugyan még összemérhető vele a másik relativisztikus korrekció, a kinetikus energia  $p^2/2m$ -es képletének módosítása – ahogy arra a H-atomnál majd utalunk. Azonban a spin-pálya kölcsönhatás erőssége a rendszám negyedik hatványával nő, tehát – szinte csak a H-atom kivételével – döntő mértékben ez határozza meg az energiaszintek finomszerkezetét.

Tulajdonképpen magának a spinnek a léte a legjelentősebb, és még álló elektronra sem elhanyagolható relativisztikus korrekció! Az elektront relativisztikusan helyesen leíró Dirac-egyenletből következő spint, mint diszkrét változót, semmiképpen nem hagyhatjuk el. A spinnek az energiaszintekre való – a Pauli-elven keresztüli áttételes – hatását a Hund-szabályoknál már tárgyaltuk.

A spin-pálya kölcsönhatás – a Dirac-egyenlet egy finomabb következményeként – azt a tényt írja le, hogy egy elektron spin- és térbeli változói nem teljesen függetlenek. A fizikai lényeg azonban a Dirac-egyenlet nélkül is megérthető. A spin-pálya kölcsönhatás eredete szemléletesen: a  $\vec{v}$  sebességgel mozgó elektron az atommag (centrális) elektromos terét

$(\vec{E} \propto \vec{r}/r^3)$  részben  $(\vec{v} \times \vec{E}$ -vel arányosan) mágneses térnek érzi  $(\vec{B}_b \propto \vec{v} \times \vec{E} \propto \vec{v} \times \vec{r} \propto \vec{L})$ . Az elektron  $\vec{S}$  spinjével arányos  $\vec{\mu}_S$  mágneses dipólusmomentumnak ebben a belső  $\vec{B}_b$  mágneses térben

$$-\vec{\mu}_S \vec{B}_b \propto \vec{S}(\vec{v} \times \vec{E}) \propto \vec{S}(\vec{v} \times \vec{r}) \propto \vec{S}\vec{L} = \xi(r)\vec{S}\vec{L} \quad (\text{A.7})$$

energiája van.

Példa: számítsuk ki azt az átlagos belső mágneses teret, amely  $2 \cdot 10^{-4}$  eV spin-pálya kölcsönhatási energiát eredményez egy elektronra!

Az A.7 képletben ki nem írt konstansokat tartalmazó  $\xi(r)$ -t az elektron térbeli hullámfüggvényével kiátlagolva a következő alakra jutunk:

$$K_{SO} = \lambda \vec{L}\vec{S}. \quad (\text{A.8})$$

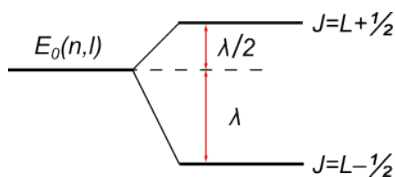
Tekintve, hogy a mag elektromos tere a  $Z$  rendszámmal arányos, valamint  $\frac{1}{r^3}$  várható értéke  $Z^3$ -nel arányos, összességében a  $\lambda$  spin-pálya csatolási állandó értéke a rendszám negyedik hatványával nő:

$$\lambda \propto Z^4. \quad (\text{A.9})$$

A finomszerkezet ezek után könnyen megérthető. A spin-pálya kölcsönhatás következtében nem mindegy, hogy az elektron spinje ( $\vec{S}$ ) és pályamomentuma ( $\vec{L}$ ) hogy áll egymáshoz képest, más szóval mekkora az eredő impulzusmomentum ( $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ):

$$\lambda \vec{L}\vec{S} = \frac{\lambda}{2} \left( (\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}\vec{L} - \vec{S}\vec{S} \right) = \frac{\lambda}{2} ((J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))). \quad (\text{A.10})$$

Például  $L = 1$  és  $S = 1/2$  esetén az eredetileg degenerált term fölhasad két szintre, az A.1. ábrán látható módon. Ez eredményezi pl. az alkáliatomok spektrumában megfigyelhető jellegzetes dubletteket. A nátrium D-vonala ily módon – elegendő felbontás esetén – két közeli vonalra hasad föl:  $D_1$  (589,593 nm) és  $D_2$  (588,9963 nm).



A.1. ábra. A spin-pálya kölcsönhatás okozta finom felhasadás

$\lambda$  rendszámfüggése (lásd A.9) alapján érthető, hogy míg a nátrium sárga dublettjében a vonalak között csupán 0,6 nm a hullámhosszkülönbség, addig a nagyobb rendszámú cézium finomszerkezeti felhasadása sokkal nagyobb: 42,2 nm.

Egy atom energiaszintjeinek ábráját, berajzolva a megengedett átmeneteket is, a hozzájuk tartozó hullámhossz-értékekkel együtt Grotrian-diagramnak nevezzük. Ilyenekkel lehet találkozni „A hidrogén és az alkáliatomok optikai színeképek vizsgálata” c. mérésnél.

A megengedett optikai átmenetekre vonatkozó kiválasztási szabályok:

$$\Delta S = 0 \quad (\text{A.11a})$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (\text{A.11b})$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{A.11c})$$

$$(\text{de a } J = 0 \rightarrow J = 0 \text{ tiltott}) \quad (\text{A.11d})$$

A termjelölésekkel kapcsolatban eddig leírtak szigorúan véve csak addig alkalmazhatók, amíg az egyes elektronok spin-pálya kölcsönhatása ( $\lambda_i \cdot l_i s_i$ ) sokkal kisebb, mint a durva szerkezetet meghatározó egyéb kölcsönhatások. Ebben az esetben van jól definiált értelme eredő pályá- ( $\vec{L} = \sum \vec{l}_i$ ) illetve eredő spin-momentumról ( $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$ ) beszélni. Az eredő teljes impulzusmomentum ( $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ) pedig ezekből tevődik össze, a jól ismert vektormodell keretein belül. Ez az ún. LS-csatolás (Russel–Saunders-csatolás). A másik véglet az, amikor az egyes elektronok spin-pálya csatolása nagyon nagy. Ilyenkor előbb az egyedi pályá- és spin-momentumok csatolódnak össze ( $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ ), a teljes impulzusmomentum pedig ezek eredője ( $\vec{J} = \sum \vec{j}_i$ ). Ez az ún.  $jj$ -csatolás.

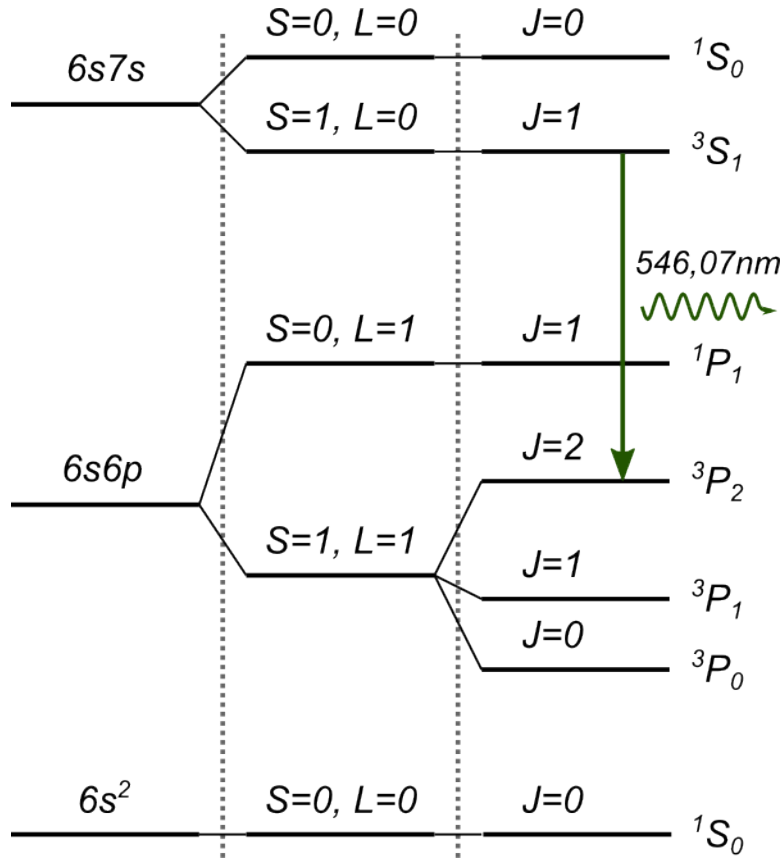
Valójában még az olyan nagy rendszámú atomokban, mint a Hg vagy az Pb sem teljesülnek maradéktalanul a  $jj$ -csatolás feltételei, hanem még ezek is a két véglet közé esnek. A gyakorlatban ilyenkor is az LS-csatolásnak megfelelő termjelöléseket használjuk. Egyetlen fontos következménye van annak, hogy a pályá- és spin-momentumok erősen összecsatolódnak: az A.11a kiválasztási szabályok nem teljesülnek szigorúan. A Hg-ra pl. az LS-csatolásban szigorúan tiltott szinglett-triplett átmenetek ( $\Delta S \neq 0$ ) is megjelennek, sőt kifejezetten erősek. A higanygózlámpa színeképeiben a legerősebb vonal az UV-tartományba esik (253,7 nm), és formálisan (az LS-jelölésben) egy  $6s6p \ ^3P_1 \rightarrow 6s^2 \ ^1S_0$  multiplicitás-váltó átmenetként írható le.

A Hg-atom alapállapotú konfigurációja:  $[\text{Xe}] 4f^{14}5d^{10} 6s^2$ . Az alsó energiaszinteket a 6s alhéjon lévő két legkülső elektron gerjesztései szabják meg, ezt szemlélteti az A.2. ábra. (Vegyük észre, hogy az egyes konfigurációkhoz tartozó nívók energia-sorrendje megfelel a Hund-szabályoknak!)

Néhány atom jellegzetes spektrumvonalait és a hozzátartozó nívókat az A.1. táblázat tartalmazza.

Történeti okokból még röviden kitérünk a hidrogénatom finomszerkezetének néhány jellegzetességére. A spektroszkópiában talán a Balmer-sorozat vörös,  $H_\alpha$  ( $n = 3 \rightarrow n = 2$  átmenet, 656,3 nm) vonalát tanulmányozták a legrészletesebben. A Dirac-egyenlet segítségével minden relativisztikus korrekciót (spin-pálya kölcsönhatás, mozgási energia ill. impulzus relativisztikus kezelése) egzaktul figyelembe lehet venni. Eredményül a





A.2. ábra. A Hg két külső elektronjának alsó energianívói

következő adódik hidrogénre, illetve egyelektronos, hidrogénszerű ionokra:

$$T_{n,j} = \frac{E_{n,j}}{hc} = \frac{E_n^0}{hc} \left( 1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right), \quad (\text{A.12})$$

ahol  $E_n^0$  a nemrelativisztikus eredmény (lásd A.5). A korrekció tehát az  $\alpha \approx 1/137$  finomszerkezeti állandó négyzetével arányos. Az  $n=2$  ill.  $n=3$  főkvantumszámú nívók nemrelativisztikus durva szerkezetét, illetve azok relativisztikus finom felhasadását mutatja az A.3. ábra. (Mivel csak egyetlen elektronnal van szó, használhatnánk a kisbetűket is, mégis maradtunk az atomi állapotokra szokásos nagybetűs jelöléseknél.)

Az A.12 képlet szerint az azonos  $j$ -hez, de különböző  $l$ -hez tartozó nívók elfajultak (ld. A.3b). Lamb és Retherford (1947) azonban kísérletileg kimutatták, hogy a  $2^2S_{1/2}$  és a  $2^2P_{1/2}$  nívók hidrogénnél 1058 MHz frekvenciával elkülönülnek (ld. A.3c). Ez a Lamb-eltolódás (Lamb-shift), amely a kvantumelektrodinamika kidolgozásához vezetett. A Lamb-eltolódás az elektromágneses mező zérus ponti energiájának fluktuációjával kapcsolatos. Az  $l$  szerinti elfajulás más nívóknál is megszűnik, de a felhasadás sokkal kisebb.

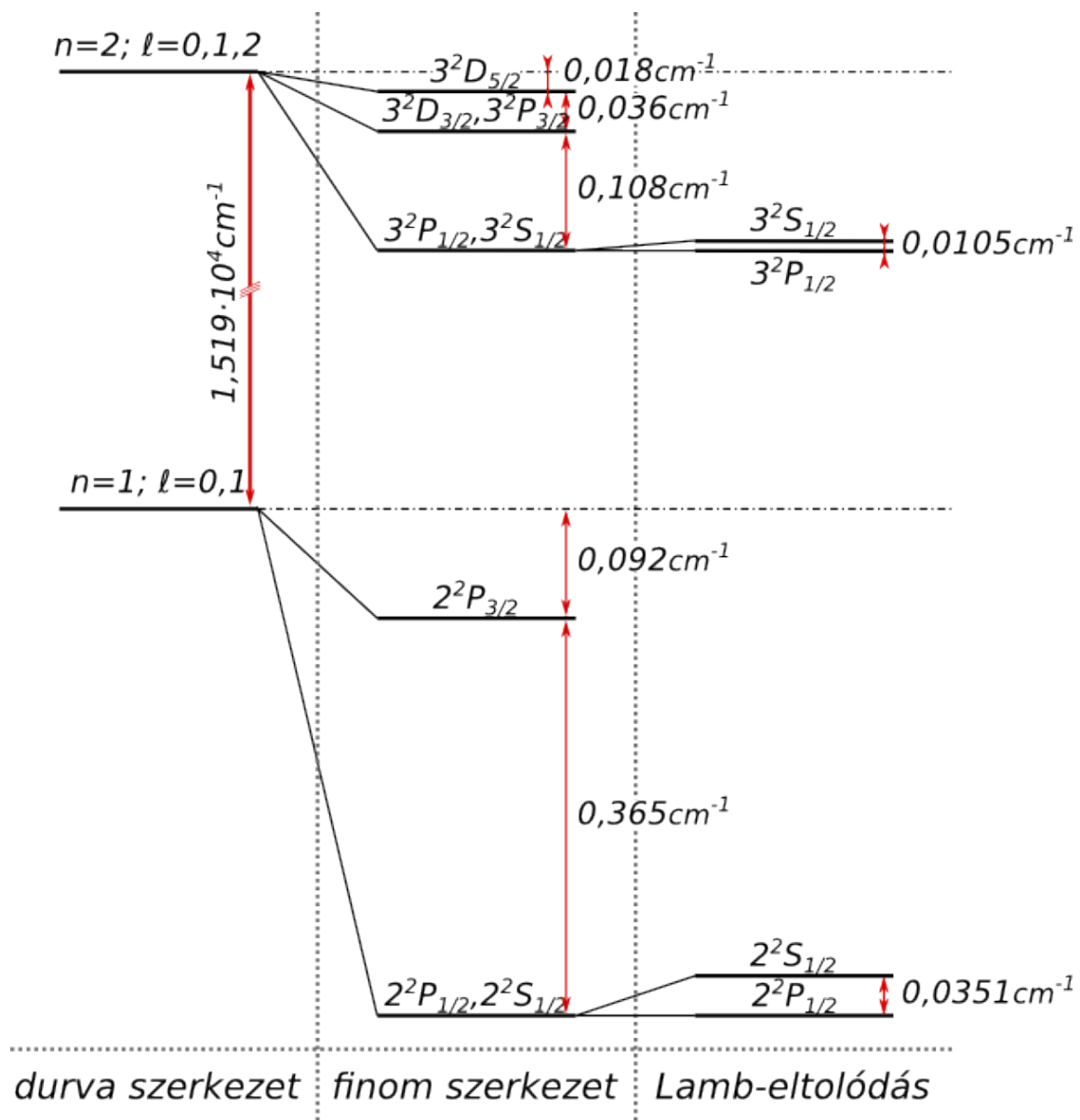
Elem	Vonal (nm)	Átmenetek				
Na	589,59 (D <sub>1</sub> )	3s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	-	3p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>
	588,99 (D <sub>2</sub> )		<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	-		<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>
Rb	794,7 (D <sub>1</sub> )	5s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	-	5p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>
	780,8 (D <sub>2</sub> )		<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	-		<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>
Cd	643,85	5s5p	<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	-	5s5d	<sup>1</sup> D <sub>2</sub>
	508,58		<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	-	5s6s	<sup>3</sup> S <sub>1</sub>
	479,99		<sup>3</sup> P <sub>1</sub>	-		<sup>3</sup> S <sub>1</sub>
	467,82		<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	-		<sup>3</sup> S <sub>1</sub>
Hg	578,97	6s6p	<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	-	6s6d	<sup>3</sup> D <sub>1</sub>
	576,96		<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	-		<sup>3</sup> D <sub>2</sub>
	546,07		<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	-	6s7s	<sup>3</sup> S <sub>1</sub>
	491,60		<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	-	6s8s	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
	435,84		<sup>3</sup> P <sub>1</sub>	-	6s7s	<sup>3</sup> S <sub>1</sub>
	434,36		<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	-	6s7d	<sup>3</sup> D <sub>1</sub>
	433,92		<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	-		<sup>3</sup> D <sub>2</sub>
	410,81		<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	-	6s9s	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
	407,78		<sup>3</sup> P <sub>1</sub>	-	6s7s	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
	404,66		<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	-		<sup>3</sup> S <sub>1</sub>

A.1. táblázat. Néhány atom jellegzetes spektrumvonala.

## A.6. A Zeeman-effektus

Zeeman a XIX. század végén felfedezte, hogy mágneses térben egyes spektrumvonalak több vonalra hasadnak fel. A felhasadt vonalak az eredetihez képest szimmetrikusan helyezkednek el. A felfedezéskor normális Zeeman-effektusnak nevezték el, amikor a felhasadt vonalak száma három. Ezt az esetet ugyanis Zeeman és Lorentz a klasszikus fizikán belül értelmezni tudta, beleértve a vonalak polarizációs tulajdonságait is. A felfedezésre és magyarázatára közösen kapták a második fizikai Nobel-díjat 1902-ben. Normális Zeeman-effektus pl. a Cd 643,85 nm-es vörös vonalának felhasadása. Ezzel szemben anomális Zeeman-effektusnak hívjuk, ha a felhasadt vonalak száma több mint három. Ilyen pl. a Na D-vonalainak felhasadása. Utóbb kiderült, hogy a normális effektus a ritkább, az anomális effektus a gyakoribb. Az anomálisnak elnevezett esetben a komplikációt az okozza, hogy az atomnak kétfajta impulzusmomentuma lehet, és a kettőhöz nem egyforma súllyal társul mágneses momentum (v.ö. A.2-t és A.3-t).

A Zeeman-felhasadás oka az atomi mágneses momentumok és a külső mágneses tér



A.3. ábra. A hidrogén  $n = 2$  és  $n = 3$  nívóinak durva (a) illetve finom (b) szerkezete, valamint a Lamb-eltolódás az alsó nívóra (c).

kölcsönhatása, mely az alábbi járulékot adja a Hamilton-operátorhoz:

$$K_Z = -(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S)\vec{B} = \mu_B(g_L\vec{L} + g_S\vec{S})\vec{B} = \mu_B(\vec{L} + 2\vec{S})\vec{B}. \quad (\text{A.13})$$

(Itt felhasználtuk, hogy  $g_L = 1$  és  $g_S = 2$ .)

A helyzet egyszerű abban az extrém esetben, ha a mágneses tér olyan nagy, hogy a Zeeman-kölcsönhatás jóval erősebb, mint a spin-pálya kölcsönhatás. Ekkor a pályamomentum és a spin szétcsatolódnak, az állapotok külön-külön jellemezhetők az  $m_L$  és  $m_S$  kvantumszámokkal, az energianívók Zeeman-kölcsönhatás miatti felhasadása pedig:

$$E(B) = E_0 + \mu_B B(m_L + 2m_S). \quad (\text{A.14})$$

( $E_0$  jelöli a zérus külső mágneses térben érvényes energiát, továbbá a  $z$ -tengelyt a külső mágneses tér irányába vesszük.) Ezt az esetet úgy tekinthetjük, mint az  $\vec{L}$  és  $\vec{S}$  külön-külön precesszióját a  $\vec{B}$  külső mágneses tér körül. Ez az ún. Paschen–Bach-effektus, eléréséhez azonban rendkívül nagy (10–100 T) mágneses tér szükséges.

Nem extrém nagy (legfeljebb néhány tesla) tereknél a spin-pálya csatolás erősebb a Zeeman-kölcsönhatásnál. Az  $\vec{L}$  és  $\vec{S}$  a  $\vec{J}$  körül precesszál, míg a külső mágneses térrel való kölcsönhatás a  $\vec{J}$  precessziójához vezet  $\vec{B}$  körül. Az A.13 kölcsönhatásban egy, a  $\vec{B}$  irányába vett átlagos mágneses momentumot kell meghatározni:

$$\langle \mu_J \rangle = \mu_L \cos\Theta_{LJ} + \mu_S \cos\Theta_{SJ}, \quad (\text{A.15})$$

ahol pl.  $\Theta_{LJ}$  az  $\vec{L}$  és  $\vec{J}$  közötti szöget jelöli. A Zeeman-energia:

$$E_Z = - \langle \mu_J \rangle B \cos\Theta_{JB}. \quad (\text{A.16})$$

A fenti egyenletben szereplő cos-függvények az alábbi kifejezésekkel számolhatók:

$$\cos\Theta_{JB} = \frac{J_z}{J}, \quad \cos\Theta_{LJ} = \frac{\vec{L}\vec{J}}{LJ}, \quad \cos\Theta_{SJ} = \frac{\vec{S}\vec{J}}{SJ}. \quad (\text{A.17})$$

A skalárszorzatok meghatározásához néhány kvantummechanikai összefüggést kell alkalmazni. Így  $\vec{L}\vec{J} = \vec{L}(\vec{L} + \vec{S}) = \hat{L}^2 + \vec{L}\vec{S}$  és  $\hat{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}$ , továbbá  $\hat{J}^2 = J(J+1)$ .

Példa: Számítsuk ki a fentiek szerint az (A.17) képletben szereplő mennyiségeket, majd igazoljuk az alábbi (A.18) és (A.19) összefüggéseket!

Végül, mágneses térben az energianívókat az alábbi kifejezéssel adhatjuk meg:

$$E(B) = E_0 + \mu_B B \cdot g_J m_J, \quad (\text{A.18})$$

ahol  $g_J$  a Landé-faktor:

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (\text{A.19})$$

A felhasadáson kívül szükség van még a kiválasztási szabályokra is. Az A.11a szabályokon kívül még egy további szabályt kell figyelembe venni:

$$\Delta m_J = 0, \pm 1 \quad (\text{A.20a})$$

$$(\text{de } m_J = 0 \rightarrow m_J = 0 \text{ tiltott, ha } \Delta J = 0). \quad (\text{A.20b})$$

A  $\Delta m_J = 0$  komponensek a mágneses térrel párhuzamosan polarizáltak és  $\pi$ -komponensnek nevezik, míg a  $\Delta m_J = \pm 1$  komponensek a mágneses térre merőlegesen polarizáltak és  $\sigma$ -komponensnek nevezik. A mágneses térre merőleges megfigyelési irány esetén valamennyi komponens megfigyelhető, és a vonalak mind lineárisan polarizáltak. A mágneses térrel párhuzamos megfigyelési irány esetén csak a  $\sigma$ -komponensek figyelhetők meg, polarizációjuk cirkuláris.

A Zeeman-vonalak relatív intenzitásai a térre merőleges megfigyelésnél [1]:  
a  $J \rightarrow J - 1$  átmenetekre:

$$m_J \rightarrow m_J \pm 1 \quad I = a(J \mp m_J - 1)(J \mp m_J) \quad (\text{A.21a})$$

$$m_J \rightarrow m_J \quad I = 4a(J + m_J)(J - m_J) \quad (\text{A.21b})$$

a  $J \rightarrow J$  átmenetekre:

$$m_J \rightarrow m_J \pm 1 \quad I = b(J \pm m_J + 1)(J \mp m_J) \quad (\text{A.22a})$$

$$m_J \rightarrow m_J \quad I = 4bm_J^2 \quad (\text{A.22b})$$

ahol  $a$  és  $b$  határozatlan állandók. Az A.21a egyenlet a  $J \rightarrow J + 1$  átmenetekre is alkalmazható annak figyelembevételével, hogy az a  $J \rightarrow J - 1$  átmenetek fordítottja és a mikrofolyamatok reverzibilisek.

Ezek után a nátrium D-vonalainak Zeeman-felhasadását az A.4. ábra szemlélteti a mágneses térre merőleges megfigyelési irány esetén.

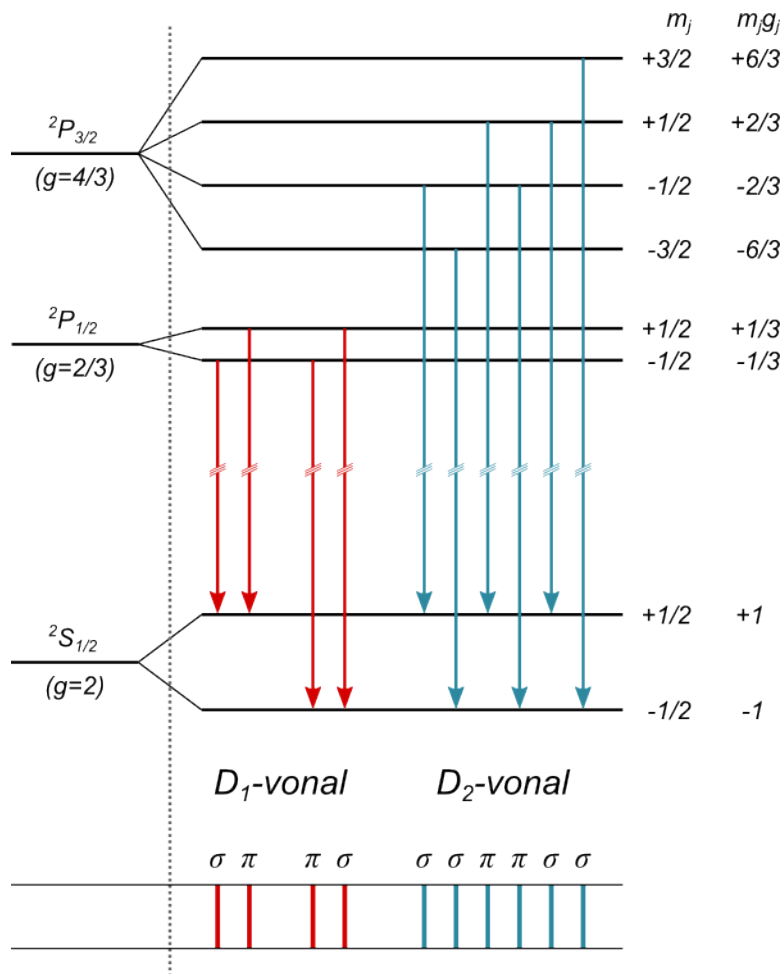
Példa: Számolással kövessük a nátrium D-vonalainak Zeeman-felhasadását!

Példa: Határozzuk meg a Hg-atom 546,07 nm-es zöld vonalának (lásd A.2. ábra) Zeeman-felhasadását, a polarizáció és az intenzitás-viszonyok figyelembevételével! (Ez a példa kötelező a Zeeman-effektust mérő hallgatók részére.)

Példa: Határozzuk meg a Cd-atom 643,85 nm-es vörös vonalának (lásd A.1. táblázat) Zeeman-felhasadását!

## A.7. A hiperfinom kölcsönhatás

Egyes spektrumvonalak nagy felbontásban ( $10^{-3} - 1 \text{ cm}^{-1}$ ) igen finom (ún. hiperfinom) szerkezettel rendelkeznek. Pauli ezt a hiperfinom szerkezetet a magspinhez járuló mágneses momentummal hozta kapcsolatba. A mágneses momentum kölcsönhat az elektronok által a mag helyén keltett mágneses térrel és ez vezet a hiperfinom felhasadáshoz. Itt röviden kitérünk a hiperfinom kölcsönhatással kapcsolatos néhány kérdésre (pl. Zeeman-effektus hiperfinom felhasadásánál), de a problémakör mélyebb megismeréséhez feltétlenül az irodalomra kell hagyatkoznunk.



A.4. ábra. A nátrium D-vonalainak Zeeman-felhasadása.

Hasonlóan a spin-pálya kölcsönhatáshoz (ld. (A.8) egyenletet), a hiperfinom kölcsönhatás a következő alakban írható:

$$K_{hf} = A_J \vec{J} \cdot \vec{I}, \quad (\text{A.23})$$

ahol  $A_J$  a hiperfinom kölcsönhatási állandó,  $\vec{J}$  és  $\vec{I}$  pedig az elektronfelhő eredő impulzusmomentuma, illetve a mag spinje. A hiperfinom kölcsönhatásban a legnagyobb járulékot az s-elektronok adják, mert egyedül nekik nem nulla a mag helyén való megtalálási valószínűségük. Ezt az izotrop részt Fermi-féle kontakt-kölcsönhatásnak hívjuk. A nem nulla pálya-impulzusmomentumú elektronok dipól-dipól jellegű járuléka anizotróppá teszi a hiperfinom kölcsönhatást. Mivel azonban ez a járulék sokkal kisebb a kontakt-kölcsönhatásnál, ezért a továbbiakban nem foglalkozunk  $A_J$  anizotropiájával.

Az [A.23](#) kölcsönhatás az  $\vec{I}$  és  $\vec{J}$  precessziójához vezet az eredő  $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$  teljes impulzusmomentum körül és az adott  $E_J$  energiájú (de  $m_J$  szerint elfajult) energianívó hiperfinom felhasadását ( $E_F$ ) eredményezi:

$$E_F = E_J + \frac{1}{2}A_J[F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)]. \quad (\text{A.24})$$

Itt  $F$  és  $I$  a megfelelő impulzusmomentum kvantumszámok, hasonlóan  $J$ -hez. Így az adott nívó  $2J+1$  (ha  $I \geq J$ ), illetve  $2I+1$  (ha  $J \geq I$ ) hiperfinom nívóra hasad fel. Analógia vonható a finom és a hiperfinom felhasadás között, ha az  $(L, S, J)$  kvantumszámokat a  $(J, I, F)$  kvantumszámoknak feleltetjük meg. Pl. a Rb-atom alapállapota két hiperfinom szintre hasad, melyek között az energiakülönbség az [\(A.24\)](#) egyenlet alapján:

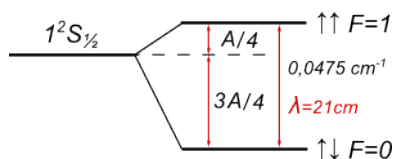
$$\Delta E = A_J(I + \frac{1}{2}) = h\nu_0. \quad (\text{A.25})$$

A gerjesztett állapotok hiperfinom felhasadása sokkal kisebb. A Rb-izotópokra néhány adatot az [A.2.](#) táblázat tartalmaz.

Atom	Gyakoriság (%)	$I$	$g_I$	$\nu_0 = \Delta E/h$ (MHz)
$^{85}\text{Rb}$	72,2	5/2	0,541	3036
$^{87}\text{Rb}$	27,8	3/2	1,834	6835

A.2. táblázat. Hiperfinom felhasadási adatok a Rb alapállapotára.

A hiperfinom felhasadásra a legismertebb, „klasszikus” példa a hidrogén alapállapotának felhasadása, amint azt az [A.5.](#) ábra mutatja.



A.5. ábra. A hidrogén ( $^1\text{H}$  izotóp) alapállapotának hiperfinom szerkezete. A proton és az elektron spinje parallel (triplett) és antiparallel (szinglett) állhat.

Kölcsönhatás nélkül ez az állapot négyszeresen degenerált lenne, hiszen mind az elektron, mind a proton ( $^1\text{H}$  izotóp atommagja) spinje kétféleképpen állhat. A hiperfinom kölcsönhatás miatt a triplett parallel és a szinglett antiparallel beállítás energiája nem egyforma. A szinglett állapot van mélyebben, közöttük a különbség éppen  $A$ , ami hidrogénre  $21 \text{ cm}^{-1}$ -nek felel meg.

Külső mágneses tér alkalmazása esetén a hiperfinom vonalak Zeeman-felhasadása figyelhető meg. (Ehhez azonban nagyfelbontású, pl. mágneses rezonancia módszer szükséges. Lásd „Az optikai pumpálás” c. mérést.) Kis mágneses tereknél ( $\approx 10^{-4}$  T = 1 G) megmarad az  $\vec{I}$  és a  $\vec{J}$  erős csatolása. Hasonlóan az (A.18) egyenlethez, egy  $E_F$  energiájú hiperfinom vonal  $2F + 1$  (közelítőleg egyenlő távolságban lévő) Zeeman-alsóvára hasad fel:

$$E(m_F) = E_F + \mu_B B \cdot g_F m_F. \quad (\text{A.26})$$

Itt  $m_F$  az F mágneses kvantumszáma ( $m_F = F, F - 1, \dots, -F$ ) és

$$g_F \simeq g_J \frac{F(F + 1) + J(J + 1) - I(I + 1)}{2F(F + 1)}. \quad (\text{A.27})$$

A  $g_F$  kísérleti meghatározásával a magspinre ( $I$ ) nyerhetünk információt. Vegyük figyelembe, hogy  $J = 1/2$  esetén ( $F = I \pm 1/2$ ) a  $g_F$  csak előjelben különbözik a két hiperfinom vonalra:

$$g_F(F = I \pm \frac{1}{2}) = \frac{g_J}{(2I + 1)}, \quad (\text{A.28})$$

azaz a Zeeman-felhasadás nagysága azonos egy adott izotóp mindkét hiperfinom vonalára.

Míg a finomszerkezetnél az  $\vec{L}$  és  $\vec{S}$  szétcsatolódása csak igen erős mágneses tereknél következik be (Paschen–Bach-effektus), addig a hiperfinom szerkezet (melyre  $A_J/h \approx 1000$  MHz) Zeeman-felhasadásánál  $\approx 0,1$  T mágneses tér már erősnek számít. A  $\mu_B B g_J \gg A_J$  nagy mágneses tereknél (hiperfinom Paschen–Bach-effektus) a Zeeman-alsók energiáit az alábbi kifejezés adja meg:

$$E(m_J, m_I) = \mu_B B g_J m_J - \mu_N B g_I m_I + A_J m_J m_I. \quad (\text{A.29})$$

Az (A.29) egyenlet jobb oldalán az első tag adja a domináló,  $m_J$  szerinti felhasadást (a Rb alapállapotában  $m_J = \pm 1/2$ ), míg a harmadik tag az adott alsó további  $(2I + 1)$ -szeres hiperfinom Zeeman-felhasadását (ld. az A.6. ábra határesetét nagy B-re).

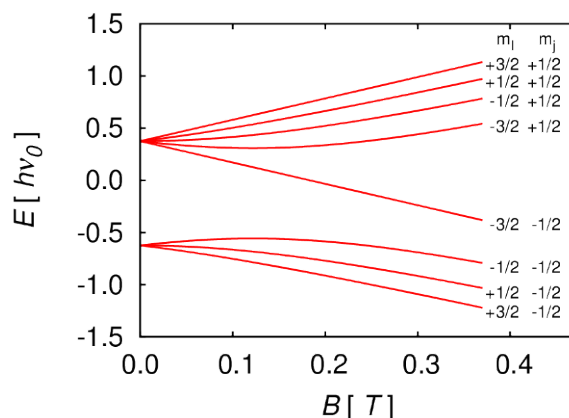
Közbenső mágneses tereknél a probléma lényegesen bonyolultabb. A  $J = 1/2$  és tetszőleges  $I$  esetén (a hidrogén és az alkálifémek alapállapotai) egzaktul megoldható, és a megoldást a Breit-Rabi-egyenlet adja meg [2]:

$$E(m_J, m_I) = -\frac{h\nu_0}{2(2I + 1)} - \mu_N B g_I m_F \pm \frac{h\nu_0}{2} \left[ 1 + \frac{4m_F}{2I + 1} x + x^2 \right]^{1/2}, \quad (\text{A.30})$$

ahol  $h\nu_0$  az (A.25) egyenlettel adott hiperfinom felhasadás,  $m_F = m_I \pm 1/2$  és a  $\pm$  jel az  $F = I \pm 1/2$  hiperfinom vonalakra vonatkozik, míg az  $x$  paraméter:

$$x = \frac{(g_J \mu_B + g_I \mu_N) B}{h\nu_0}. \quad (\text{A.31})$$





A.6. ábra. A Breit–Rabi-egyenlet által adott Zeeman-felhasadás  $I = 3/2$  esetén a mágneses tér függvényében (az adott skálán x nulla és 1,5 között változik)

Az (A.30) egyenlet mágneses tér (ill.  $x$ ) függését az A.6. ábra mutatja a  $^{87}\text{Rb}$  izotóp ( $I=3/2$ ) alapállapotának (hiperfinom) Zeeman-felhasadására.

A továbbiakban (a kísérletileg fontos) Zeeman-alnívók közötti energiakülönbség viselkedésével foglalkozunk a mágneses tér és a felbontás függvényében. Kis mágneses tereknél ( $\approx 1$  G) és kisebb felbontásban a Zeeman-alnívók közötti energiakülönbség az (A.26) és (A.28) egyenletek alapján:

$$\Delta E = \mu_B B \frac{gJ}{(2I + 1)}, \quad (\text{A.32})$$

mely ugyanaz egy adott izotóp mindkét hiperfinom vonalára. Mint fentebb megjegyeztük, a  $\Delta E$  mérésével a magspin ( $I$ ) határozható meg. Kis mágneses tereknél ( $\leq 5$  G) és nagyobb felbontásban a Zeeman-alnívók közötti energiakülönbség már nem egyenlő, megjelenik az  $F$ -től való függés. Ezt az (A.30) egyenlet  $x$ -szerinti sorfejtésével (első rendig) láthatjuk:

$$\Delta E(F = I + 1/2) = \frac{B}{2I + 1} (\mu_B g_J - \mu_N g_I 2I) \quad (\text{A.33a})$$

$$\Delta E(F = I - 1/2) = \frac{B}{2I + 1} (\mu_B g_J + \mu_N g_I 2I). \quad (\text{A.33b})$$

Tehát nagyobb felbontásban a hiperfinom alnívókra a Zeeman-felhasadás már különböző. Az (A.33) egyenlet alapján a magmágneses momentum ( $\mu_N$ ) is meghatározható. Példaként a  $^{87}\text{Rb}$  izotópra  $B = 1$  G térnél a rezonanciafrekvencia ( $\Delta E/h$ ) az (A.32) egyenletből 700 kHz, míg ez nagyobb felbontásnál az (A.33) egyenlet alapján két vonalra hasad, melyek 698,8 kHz és 701,65 kHz körül jelennek meg. Nagy felbontásnál (és nagyobb mágneses tereknél) az (A.30) egyenletet kell figyelembe venni, mely megadja a hiperfinom alnívók  $(2F + 1)$ -szeres felhasadását.

## A.8. Röntgen-termek

A röntgensugarak felfedezése után két fontos irányban folytatódtek a kutatások: kristályszerkezet-vizsgálat és a röntgensugarak spektroszkópiája terén (egyéb fontos alkalmazásokat nem említve). Hamarosan megállapították, hogy a röntgen-spektrumok egyszerűek és elemről elemre szabályosan változnak („karakterisztikus” röntgensugárzás).

A karakterisztikus röntgensugárzást a belső energianívókról történő gerjesztés utáni sugárzásos átmenet (fluoreszcencia) adja. A röntgen-termséma alapján az egyes röntgen-vonalakat az alapján nevezik el, amely héjra (K, L, ...) történik az átmenet az emisszió során. A legerősebb vonalak rendszerint a K és az L vonalak. (Ezek a legalkalmasabbak elemazonosításra röntgenfluoreszcenciás analízisnél.) Az átmenetek kiválasztási szabályai miatt az erős röntgenvonalak ( $K_\alpha$ ,  $K_\beta$ , ...) éles kettős vonalak.

Moseley az elemek egész sorát tanulmányozva megállapította, hogy egy adott röntgen-vonal (pl.  $K_{\alpha 1}$ ) frekvenciájának gyöke és az elemek rendszáma ( $Z$ ) között lineáris összefüggés van. (Ez a Moseley-törvény.) A Moseley-törvény alapján egy fontos következtetés volt, hogy az akkor (1922) ismert elemek közül a  $Z=43$ , 61, 72, 75, 85, 87 rendszámú elemek „hiányoznak”.

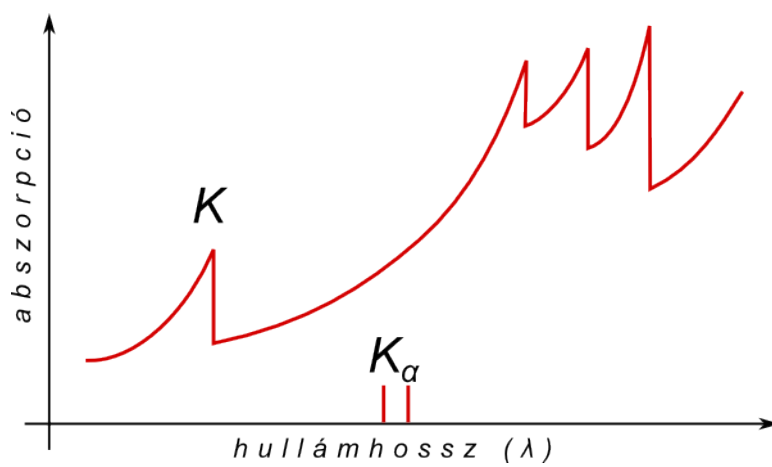
A Moseley-törvény egyszerű magyarázatát már a Bohr-elmélet alapján meg lehetett adni. A hidrogénszerű atomok energianívóihoz (A.5 egyenlet) hasonlóan, közelítőleg ugyanezen összefüggés érvényes a röntgen-termekre is, azzal a megszorítással, hogy  $Z$  helyett  $(Z - a)$ -t kell helyettesíteni, ahol „ $a$ ” egy árnyékolási együttható, mely a többi (maghoz közeli) elektron árnyékolási hatását fejezi ki. Az „ $a$ ” együttható a K vonalakra közelítőleg 1, míg a többi vonalakra növekszik. Így pl. a  $K_\alpha$  vonalakra kapjuk:

$$\nu_{K_\alpha} = Rc(Z - a)^2(1/1^2 - 1/2^2) = 3/4Rc(Z - a)^2, \quad (\text{A.34})$$

amely a Moseley-törvény.

Az abszorpciós röntgen-spektrumok lényeges különbséget mutatnak az (éles) emissziós spektrumokkal szemben. Az abszorpciós spektrum egy sorozat abszorpciós élből áll (A.7. ábra). Az abszorpciós él megjelenésének magyarázata a következő: A K él helyénél hosszabb hullámhosszú foton energiája nem elegendő a K héjról gerjeszteni (vagy ionizálni) az ott kötött elektront, így az ilyen energiájú fotonok csak az L, M, ... héjakat gerjeszthetik. A gerjesztő foton elnyelési valószínűsége az él alatti hullámhosszknál  $\lambda^3$ -el arányos, ez adja az abszorpciós görbe (A.7. ábra) alakját az él alatt. (Az A.7. ábrán a megfelelő karakterisztikus sugárzás relatív helyét is feltüntettük a  $K_\alpha$  vonalakra.)

Az abszorpcióban az adott abszorpciós él két oldalán fellépő nagy különbség lehetővé teszi a jó kontrasztú röntgenfelvételek készítését orvosi vagy metallurgiai átvilágításoknál. Az abszorpciós él (hasonlóan a karakterisztikus sugárzáshoz) elemről elemre szabályszerűen változnak, így egy elem egy adott hullámhosszú röntgensugárzást nagyon eltérően abszorbeál. Így pl. orvosi felvételeknél a szöveteket alkotó elemek átlagos rendszáma közel azonos a levegőével, míg a csontok abszorpcióját a nagyobb rendszámú kalcium határozza meg.



A.7. ábra. Röntgen abszorpciós élék

## A.9. Ajánlott irodalom

- [1] C. Candler: Atomic Spectra, 2nd ed. Van Nostrand, Princeton, 1964
- [2] A. Corney: Atomic and Laser Spectroscopy, Clarendon Press, Oxford, 1977
- [3] L.D. Landau, E.M. Lifsic: Elméleti fizika, Tankönyvkiadó, 1978
- [4] P.W. Atkins: Molecular Quantum Mechanics, 2nd ed. Oxford University Press, Oxford New York, 1983
- [5] Elméleti fizikai példatár 4. kötet, Tankönyvkiadó, 1984
- [6] D.W. Preston, E.R. Dietz: The Art of Experimental Physics, John Wiley and Sons, N.Y., 1991
- [7] H. Haken, H.C. Wolf: The Physics of Atoms and Quanta, 7th ed., Springer Berlin Heidelberg New York, 2005
- [8] Erostyák J. - Kürti J. - Raics P. - Sükösd Cs., Fizika III, Szerk.: Erostyák János és Litz József, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2006

## B. függelék

# Molekulaspektroszkópia (Kürti Jenő)

### B.1. Bevezetés

A B. függelékben röviden összefoglaljuk a molekulák stacionárius állapotai (molekulatermek) és a közöttük elektromágneses sugárzás hatására végbemenő átmenetek néhány jellemzőjét. Alapvetően kétatomos molekulákra koncentrálnak. Többatomos molekulák termjeivel és a közöttük lévő átmenetekkel kapcsolatban a csoportelméleti (ábrázoláselméleti) tanulmányokra, illetve az irodalomjegyzékben megadott művekre utalunk.

### B.2. Molekulatermek jelölése

Molekulatermek jellemzése az alábbi jelölésekkel lehetséges:

- $J$  : forgási (impulzusmomentum) kvantumszám
- $v$  : rezgési (vibrációs) kvantumszám
- $B, B_e, B_0$  : forgási (rotációs) állandó
- $T_e(T_e'', T_e')$  : elektronterm (alap-, ill. gerjesztett állapotban)
- $E_e(E_e'', E_e')$  : az elektronterm energiája (alap-, ill. gerjesztett állapotban)
- $T_v, T(v)$  : rezgési (vibrációs) term
- $E_v, E(v)$  : a rezgési (vibrációs) term energiája
- $T_r, T(J), T(J, K)$  : forgási (rotációs) term

- $E_r, E(J), E(J, K)$  : a forgási (rotációs) term energiája

Külön érdemes megemlíteni az azonos atommagú (homonukleáris) kétatomos molekulákat, melyek szimmetriacsoportja  $D_{\infty h}$ . Ilyenkor görög betűvel adjuk meg a pályaimpulzusmomentumnak a szimmetriatengelyre vett vetületét:  $\Lambda(\lambda) = \Sigma(\sigma), \Pi(\pi), \Delta(\delta)$ , stb. (Szokás szerint kis betűvel az egyes molekulapályákat, nagy betűvel a teljes molekulát jellemezzük.) Inverziócentrummal rendelkező molekuláknál az állapotnak az inverzióval szembeni párosságát vagy páratlanságát a  $g$  (gerade) vagy  $u$  (ungerade) jobb oldali alsó index jelöli. Jobb felső + vagy – index jelöli, hogy a molekula szimmetriatengelyére illeszkedő valamely tükörsíkra vonatkozóan az állapot szimmetrikus vagy antiszimmetrikus. A bal felső index – az atomi jelöléshez hasonlóan – itt is az eredő spinnek megfelelő multiplicitást adja meg. Ezzel a jelöléssel pl. az  $O_2$  molekula alapállapota:  ${}^3\Sigma_g^-$  (kiejtése: triplett-sigma-gé-mínusz), míg a  $H_2$  vagy az  $N_2$  molekula alapállapota:  ${}^1\Sigma_g^+$ .

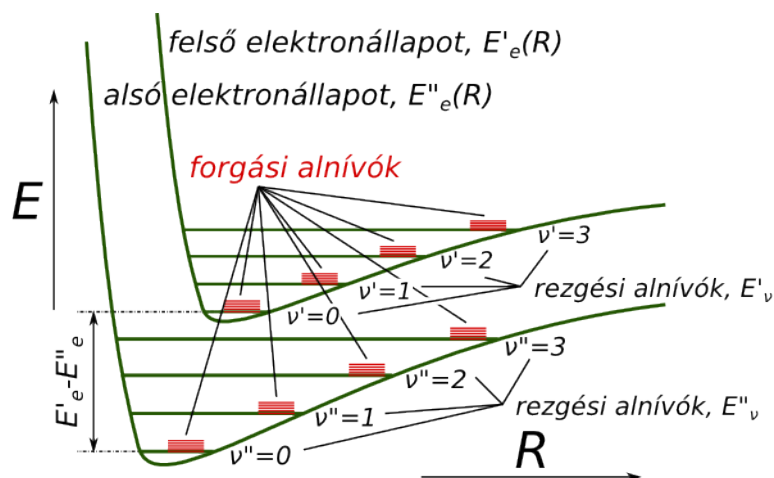
Spektroszkópiai átmeneteknél a felső, nagyobb energiájú állapotot ' , az alsó, alacsonyabb energiájú állapotot " jelöli. Tehát a Planck-féle feltétel:  $\tilde{\nu} = T' - T'' = (E' - E'')/hc$ , ahol  $\tilde{\nu}$  a spektroszkópiában használatos hullámszám (dimenziója  $1/m$  vagy  $1/cm$ ).

## B.3. Molekulatermek osztályozása

A molekulát alkotó atommagok és elektronok egymás Coulomb-terében való mozgásának leírása – még nemrelativisztikus esetben is – egzaktul megoldhatatlan kvantummechanikai többtest-probléma. Ennek a mozgásnak viszonylag leegyszerűsített tanulmányozását az teszi lehetővé, hogy a magok  $M$  jellemző tömege több nagyságrenddel nagyobb az elektron  $m$  tömegénél ( $m/M \approx 10^{-4} - 10^{-5}$ ). A molekulán belül emiatt a magok és az elektronok sebességeinek aránya elhanyagolhatóan kicsi. Az elektronok energiaállapotainak vizsgálatakor a magok helyzetét jó közelítéssel időben állandónak tekinthetjük. Másrészt, a magok mozgásának leírásakor az elektronok által keltett Coulomb-teret idő szerint átlagolhatjuk. Ezt a közelítést – amely bizonyos, általában teljesülő feltételek esetén kielégítő eredményt ad – szokás Born–Oppenheimer-közelítésnek nevezni.

### B.3.1. Elektrontermek

Az atomi termék energiáit (lásd az A. függelék) számokkal jellemezhetjük. A molekulák elektrontermjei a magok közötti távolságok – mint paraméterek – függvényei. Ilyen potenciális energia görbét mutat a B.1. ábra. A termék energiája már tartalmazza a magok között ható elektrosztatikus taszítás járulékát is. Kötétt állapotban  $E_e$ -nek az egyensúlyi magtávolság helyén minimuma van. Az elektrontermek jellemző energiája 1–10 eV.



B.1. ábra. Kéttomos molekulák elektron-, rezgési- és forgási-energiaállapotai

### B.3.2. Rezgési termék

A magok egymáshoz képesti mozgását adott elektronállapot mellett úgy tekinthetjük, mint az elektronterm energiája által szolgáltatott külső potenciáltérben végzett egyensúlyi helyzet körüli rezgést. Az egyensúlyi helyzet kis környezetében a potenciál a kitérés másodfokú függvénye, ezáltal a rezgés első közelítésben harmonikus lesz. Ennek megfelelően a rezgési termék energiája:

$$E(v) = h\nu \left( v + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{B.1})$$

ahol

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

a rezgésszám, és  $\mu$  a redukált tömeg. Kéttomos molekulák esetén  $\mu$  értéke  $M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ ,  $k$  pedig a kötés erősségére jellemző erőállandó. Többatomos molekuláknál az egyensúlyi helyzet körüli mozgás kis kitérések esetén a magok koordinátáinak lineáris kombinációjaként felírható normálkoordináták szerinti, egymástól független harmonikus rezgőmozgások, az ún. normálrezgések szuperpozíciójának tekinthető. Egy ilyen normálrezgést rezgési módusnak nevezzük. Ha az  $i$ -edik rezgési módus normálkoordinátája  $\xi_i(t)$ , annak időfüggését klasszikusan a

$$\xi_i(t) = \xi_0 \cdot \cos(2\pi\nu_i t) \quad (\text{B.2})$$

egyenlet írja le. A molekula teljes rezgési energiája,  $E_v$  az egyes módusok energiájának összegeként írható fel:

$$E(v_1 v_2 \dots) = \sum_i h\nu_i \left( v_i + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{B.3})$$

A rezgési módusok száma általánosan a szabadsági fokok számával egyenlő. Ha  $N$  a magok számát jelzi, akkor a módusok száma  $3N - 6$ , kivéve a lineáris molekulákat, ahol ez az érték  $3N - 5$ . A normálmódusok frekvenciái nem feltétlenül különbözőek; szimmetria esetén a termék egy része kétszeresen, vagy akár többszörösen elfajulhat. Ilyenkor ezeknek a módusoknak a frekvenciája egybeeshet.

A fenti modell természetesen csak közelítés, ennek érvényessége gyakran elromlik és további feltételezéseket kell tennünk.

a) Az egyensúlyi helyzet körül a potenciál csak kis rezgések esetén tekinthető harmonikusnak; kétatomos molekulákra például jobban közelíthető az ún. Morse-potenciállal:

$$V(\rho) = D_e \cdot (1 - e^{\alpha\rho})^2$$

ahol  $\rho = (r - r_0)/r_0$  az egyensúlyi helyzettől számított relatív kitérés,  $\alpha$  és  $D_e$  konstansok.

A Morse-potenciál számot ad a véges kötési energiáról is. A  $V(\infty) = D_e$  aszimptotikus energiaszint nem más, mint a disszociációnak a potenciálvölgy aljától mért energiája. A  $D_0$  disszociációs energia, amely az alapállapot energiaszintjétől mérődik, ennél egy kicsivel (ti. a zérusponti energiával) kevesebb. A Morse-potenciál – az elvárással ellentétben – véges értéket vesz föl  $r = 0$ -ra, de szerencsére ez az érték igen magas, így számot ad a kis magtávolság melletti erős Coulomb-taszításról is.

A Schrödinger-egyenlet analitikusan megoldható a Morse-potenciál esetére. Az energianívók közötti különbség nem állandó, hanem a gerjesztési kvantumszám növekedésével lineárisan csökken.

b) További bonyodalmat okoz, hogy az anharmonicitás miatt a különböző módusok nem lesznek szigorúan függetlenek. Ez az ún. kombinációs frekvenciák megjelenéséhez vezet.

A rezgési termék energiája a 0,05–0,5 eV-os tartományba esik.

### B.3.3. Forgási termék

Az egyensúlyi helyzetükben lévő magok merev testként gázállapotban forgást végezhetnek. Ha a molekula fő tehetetlenségi nyomatékait rendre  $\Theta_A$ ,  $\Theta_B$ ,  $\Theta_C$ , jelöli, és a  $J$  impulzusmomentumnak e tengelyek irányába eső komponensei  $J_A$ ,  $J_B$ ,  $J_C$ , akkor a klasszikus forgás energiáját az

$$E_r = \frac{J_A^2}{2\Theta_A} + \frac{J_B^2}{2\Theta_B} + \frac{J_C^2}{2\Theta_C} \quad (\text{B.4})$$



kifejezés adja meg. Az impulzusmomentum négyzete,

$$|J|^2 = J_A^2 + J_B^2 + J_C^2 \quad (\text{B.5})$$

a kvantummechanika szerint csak a  $\hbar^2 J(J+1)$  értékeket veheti fel, ahol  $J = 0, 1, 2, \dots$ . Mivel a forgás energiájának nagyságrendje lényegesen kisebb a rezgésénél, első rendben tekinthetjük a két mozgást függetlennek (merev rotátor). A rezgés és forgás kölcsönhatásából származó, a spektrumvonalak értelmezése során bevezetett magasabbrendű korrekciókat (centrifugális-, Coriolis-) itt nem tárgyaljuk, helyette az Irodalomjegyzékre utalunk.

### B.3.4. Kéttomos és lineáris molekulák rotációs termjei

A továbbiakban – a bevezetőben említettek alapján – energiák helyett termekkel fogunk számolni. Ha  $\Theta_A = 0$ ,  $\Theta_B = \Theta_C$ , a forgási termekre a

$$T(J) = BJ(J+1)$$

kifejezés adódik, ahol

$$B = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2\Theta_B}. \quad (\text{B.6})$$

Szimmetrikus pörgettyű alakú molekula esetén, ahol  $\Theta_A \neq 0$ , de  $\Theta_B = \Theta_C$ , az impulzusmomentumnak az  $A$  szimmetriatengelyre vett vetülete is kvantált:

$$J_A = \hbar K \quad K = 0, 1, \dots, J. \quad (\text{B.7})$$

A forgási termek  $J$  és  $K$  függvényében a következők lesznek:

$$T(J, K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2 \quad (\text{B.8})$$

ahol

$$A = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2\Theta_A}. \quad (\text{B.9})$$

A forgási termek energiája a rezgési energiáknál kb. két nagyságrenddel kisebb; jellemző értékei  $10^{-3} - 10^{-4}$  eV.

## B.4. Elektromágneses átmenetek

A molekula teljes energiája az eddigiek alapján az  $E = E_{el} + E_v + E_r$  alakba írható, ahol  $E_{el} \gg E_v \gg E_r$ . Az elektrontermek rezgési termekre, azok pedig forgási termekre hasadnak fel (B.1. ábra). Elektromágneses sugárzás vagy ütközések hatására a termek között átmenetek jöhetnek létre. A továbbiakban az elektromágneses dipólsugárzás hatására létrejövő átmeneteket vizsgáljuk.

### B.4.1. A rezgési-abszorpció klasszikus értelmezése

Ha a molekula egyik normálkoordinátájával a  $\vec{p}$  dipólusmomentum is változik, azaz ha  $d\vec{p}/d\xi_i \neq 0$ , akkor egy, az időben  $\nu$  frekvenciával változó elektromágneses mező rezonanciát tud előidézni, ha valamelyik rezgési módusra teljesül a rezonanciafeltétel:  $\nu = \nu_i$ .

### B.4.2. A Rayleigh- és a Raman-szórás klasszikus értelmezése

Ha a molekulának nincs is saját dipólmomentuma, elektromos tér hatására a

$$p_{ind} = \alpha E \quad (\text{B.10})$$

indukált dipólmomentum jön létre. Tegyük fel, hogy az  $\alpha$  polarizálhatóság lineárisan függ a  $\xi_i$  normálkoordinátától – azaz eltekintünk a nemlineáris effektusoktól:

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 \xi_i(t) + \dots = \alpha_0 + \alpha_1 \xi_0 \cos(2\pi\nu_i t) + \dots, \quad (\text{B.11})$$

akkor egy  $\nu_0$  frekvenciájú monokromatikus fény által reprezentált, időben periodikusan változó,  $E(t) = E_0 \cos(2\pi\nu_0 t)$  alakú elektromos tér első rendig közelítve:

$$\begin{aligned} p_{ind} &= E_0 (\alpha_0 \cos(2\pi\nu_0 t) + \alpha_1 \xi_0 \cos(2\pi\nu_i t) \cos(2\pi\nu_0 t)) = \\ &= E_0 \alpha_0 \cos(2\pi\nu_0 t) + \frac{1}{2} E_0 \alpha_1 \xi_0 (\cos(2\pi(\nu_0 + \nu_i)t) + \cos(2\pi(\nu_0 - \nu_i)t)) \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

dipólmomentumot indukál. Ez az időben változó dipólmomentum a maga részéről elektromágneses sugárzást hoz létre. Az ily módon szórt sugárzás tehát a (B.12) egyenlet első tagjának megfelelően tartalmazni fog egy  $\nu_0$  frekvenciájú (Rayleigh-szórt), valamint a második, illetve a harmadik tagnak megfelelő  $\nu_0 \pm \nu_i$  frekvenciájú (úgynevezett Raman-szórt) komponenst. Utóbbi esetben aszerint beszélünk Stokes- vagy anti-Stokes folyamatról, hogy a szórt fény frekvenciája nagyobb vagy kisebb a bejövő fény frekvenciájánál.

A rezgési módusok gerjesztéséhez hasonló gondolatmenetet alkalmazhatunk a forgások gerjesztésére is.

A B.2. ábra szemlélteti a szimmetrikus lineáris  $CO_2$  molekula infravörös abszorpcióra, ill. Raman-szórásra alkalmas rezgési módusait.

Forgások esetében hasonlóan gondolkodhatunk, mint azt a B.2. ábrán is láthatjuk, a szimmetrikus kétatomos molekulák forgását abszorpcióval nem gerjeszthetjük, csak Raman-szórás útján.

### B.4.3. A Raman-szórás kvantummechanikai modellje

Ha a molekula elektronállapota nem változik, a Planck-féle egyenlet abszorpció esetén a

$$h\nu = \Delta E_v + \Delta E_r, \quad (\text{B.13})$$

Molekula			
Rezgési módus			
A polarizálhatóság változása a normálkoordináta függvényében			
A polarizálhatóság deriváltja	$\neq 0$	$0$	$0$
Raman-aktivitás	$+$	$-$	$-$
A dipólmomentum változása a normálkoordináta függvényében			
A dipólmomentum deriváltja	$0$	$\neq 0$	$\neq 0$
Infravörös aktivitás	$-$	$+$	$+$

B.2. ábra. A  $CO_2$  molekula rezgési módusainak infravörös- és Raman-aktivitása

Raman-szórásnál a

$$h\nu_0 = \Delta E_v + \Delta E_r + h\nu', \quad (\text{B.14})$$

alakot ölti. Termikus egyensúlyban a Stokes-folyamat ( $\nu' < \nu_0$ ) valószínűsége nagyobb, mint az anti-Stokes-folyamaté ( $\nu' > \nu_0$ ), a Boltzmann-faktornak megfelelően.

Az abszorpció illetve Raman-szórás folyamatai során teljesül a perdületmegmaradás. Mivel a foton impulzusmomentuma dipólsugárzás esetén  $\hbar$  egységekben 1,  $J''$  és  $J'$  különbsége nem lehet nagyobb 1-nél (abszorpció) illetve 2-nél (Raman-szórás). Ha a molekula forgástengelye és dipólmomentuma párhuzamos, akkor az abszorpció, ill. a Raman-szórás folyamatára a következő kiválasztási szabályokat kapjuk:

$$1 = |\Delta J| \quad \Rightarrow \quad \Delta J = \pm 1 \quad (\text{B.15a})$$

$$1 = |\Delta J \pm 1| \quad \Rightarrow \quad \Delta J = 0, \pm 2 \quad (\text{B.15b})$$

$\Delta J$  itt a molekula teljes impulzusmomentuma egy vetületének megváltozását jelenti ( $\hbar$  egységekben), a forgási kvantumszámét csak akkor, ha minden egyéb – elektronmozgásból, rezgésből (kérdés: hogyan?) szimmetrikus pörgettyűnél  $k$ -ból származó – impulzusmomentum-járulék állandó marad. Ez a feltétel maradéktalanul teljesül pl. a kétatomos molekulák rezgési-forgási átmeneteire.

#### B.4.4. Rezgési átmenetek

Ha  $\Delta E_{el} = 0$ , azaz a molekula elektronállapota nem változik, a rezgési kvantumszám megváltozása abszorpció illetve Raman-szórás esetén:

$$\Delta v = 1 \quad (\text{B.16a})$$

$$\Delta v = \pm 1. \quad (\text{B.16b})$$

A rezgések anharmonicitása miatt azonban a kiválasztási szabály nem szigorú. Létrejöhetnek (bár kisebb valószínűséggel)  $\Delta v = 2$  átmenetek is (felharmonikus sávok), többatomos molkuláknál pedig egyszerre több rezgési kvantumszám is megváltozhat, másszóval ún. kombinációs sávok jöhetnek létre: pl.  $\Delta v_1 = 3, \Delta v_2 = -1$  stb.

„Sávokról” azért szokás beszélni, mert egyfajta rezgési átmenethez több különböző forgási átmenet is járulhat, ezek kis felbontású spektrométerrel mérve egybeolvadnak, széles sávokat képezhetnek.

### B.5. Kéttatomos molekulák rezgési-forgási átmenetei

#### B.5.1. Termrendszer

Vizsgáljuk meg a kéttatomos molekulák rezgési-forgási termjeit kicsit részletesebben a  $v$  rezgési és  $J$  forgási kvantumszám függvényében (B.3. ábra):

$$T(v, J) = \tilde{\nu}_0 \left( v + \frac{1}{2} \right) + B_v J(J+1)! \quad (\text{B.17})$$

Itt  $B_v$  a  $v$  rezgési kvantumszámtól függő rotációs állandó:

$$B_v = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2\Theta} = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2\mu \langle r^2 \rangle_v}, \quad (\text{B.18})$$

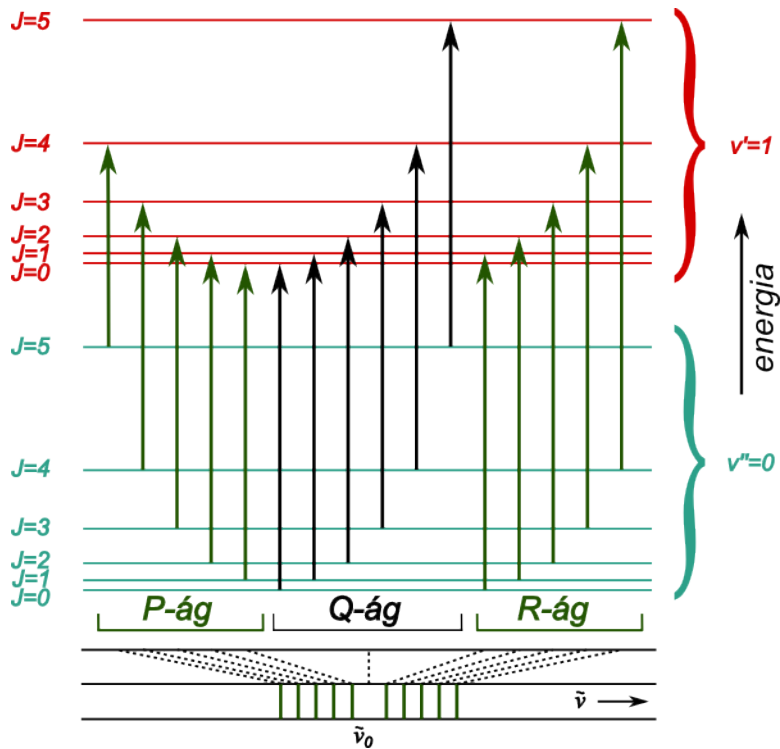
ahol  $\mu$  a redukált tömeg,  $\langle r^2 \rangle_v = \langle r_e^2 \rangle_v + \langle (r - r_e)^2 \rangle_v$  pedig a két mag távolságának négyzetes átlaga a  $v$ -ik rezgési állapotban.

Ha  $r_e$  az egyensúlyi magtávolság,

$$\langle (r - r_e)^2 \rangle_v \propto (v + 1/2). \quad (\text{B.19})$$

Ugyanis  $\langle (r - r_e)^2 \rangle_v$  a harmonikus oszcillátor energiájának várható értéke, ami – az ekvipartíció tétele szerint – a felét teszi ki a teljes energiának. Ez utóbbi pedig  $v + 1/2$ -del arányos. Innen adódik, hogy a  $B_v$  forgási állandót  $(v + 1/2)$  hatványai szerint sorbafejtjük. A számítást első rendig elvégezve:

$$B_v = B_e - \alpha \left( v + \frac{1}{2} \right) + \dots, \quad (\text{B.20})$$



B.3. ábra. Kéttomos molekulák rezgési-forgási termjei és infravörös elnyelési színeke

ahol

$$B_e = \frac{1}{hc} \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} \quad (\text{B.21})$$

az egyensúlyi magtávolsághoz tartozó forgási állandó,  $\alpha$  pedig kísérletileg, vagy adott modelltől meghatározandó érték.

### B.5.2. Infravörös elnyelési színekép

Mivel a rezgési energia kb. egy nagyságrenddel nagyobb a szobahőmérsékletű gáz átlagos termikus energiájánál, a molekulák túlnyomó része a  $v = 0$  rezgési állapotban van. Az elnyelés során tehát leggyakoribbak a  $v = 0 \rightarrow 1$  átmenetek. Ha a forgási kvantumszám az átmenet előtt  $J_0$ , utána  $J_1$ , akkor az elnyelt fény hullámszáma (B.17) alapján:

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}(v = 0 \rightarrow 1; J = J_0 \rightarrow J_1) &= [T(1, J_1) - T(0, J_0)] = \\ &= \tilde{\nu}_0 + B_1 J_1(J_1 + 1) - B_0 J_0(J_0 + 1). \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Dipólsugárzás esetén  $\Delta J = J_1 - J_0 = \pm 1$ . Eszerint belátható, hogy a spektrum két részből fog állni:

$\Delta J = -1$  esetén (P-ág):

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_P(J_0) &= \tilde{\nu}_0 + B_1 J_0(J_0 - 1) - B_0 J_0(J_0 + 1) = \\ &= \tilde{\nu}_0 - (B_0 + B_1)J_0 - (B_0 - B_1)J_0^2.\end{aligned}\tag{B.23}$$

$\Delta J = +1$  esetén (R-ág):

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_R(J_0) &= \tilde{\nu}_0 + B_1(J_0 + 1)(J_0 + 2) - B_0 J_0(J_0 + 1) = \\ &= \tilde{\nu}_0 - (B_0 + B_1)(J_0 + 1) - (B_0 - B_1)(J_0 + 1)^2.\end{aligned}\tag{B.24}$$

Mindkét ág vonalainak  $J$ -függését általánosan kifejezhetjük, ha a P-ágban a  $J_0 = -x$ , az R-ágban pedig a  $J_0 + 1 = x$  helyettesítést tesszük:

$$\tilde{\nu}(x) = \tilde{\nu}_0 + (B_0 + B_1)x - (B_0 - B_1)x^2.\tag{B.25}$$

Belátható, hogy az  $x = 0$  eset kizárt, mivel  $J_0 \geq 0$ . Mint azt a **B.3.** ábra mutatja, a közel azonos távolságra elhelyezkedő elnyelési vonalak sorát az  $x = 0$  helyen hiányzó – szaggatott vonallal jelölt – a  $\Delta J = 0$  *tiltott átmenet*nek megfelelő elnyelési vonal (nullrés) teszi jellegzetessé. Történeti érdekesség, hogy a Bohr-modell alapján ez a nullrés nem létezne.

A **(B.25)** kifejezéssel megadott elnyelési sáv (Fortrat-parabola) a rövid hullámhosszú oldalon – az R-ágban – egy minimális hullámhosszú vonallal, az ún. sávfejjel rendelkezik, ezután az R-ágban a hullámhosszak ismét növekedni kezdenek: történetileg a Fortrat-parabolát először elektron-átmenetnél, a látható tartományba eső optikai spektrumban figyelték meg. A sávfej a rövid hullámhosszú oldalon a sáv éles végét jelentette.

A sávfejeket emissziós elektron-spektrumokban lehet megfigyelni nagy felbontás esetén.

### B.5.3. Raman-átmenetek

A rezgési átmenetekénél nagyobb energiájú fotonok rugalmatlanul szóródhatnak molekulákon, megváltoztatva annak rezgési-forgási állapotát; a szóródás folyamán energiacsere jön létre a molekula és az elektromágneses tér között (Raman-szórás). Az infravörös elnyeléssel való összehasonlítás céljából most nem foglalkozunk tisztán forgási átmenetekkel, amikor  $\Delta v = 0$ . (Az ennek megfelelő elnyelési spektrum a távoli infravörös, illetve a mikrohullámú tartományba esne.)

Raman-szórás esetén  $\Delta v = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 2$ . A spektrum  $\Delta v$  előjele alapján két fő ágból fog állni (Stokes-, ill. anti-Stokes-ág). Mindkét ág  $\Delta J$  szerint – az infravörös spektrumok forgási finomszerkezeténél alkalmazott osztályozás logikáját követve – egyenként 3 részre bontható:  $\Delta J = \pm 2$  esetén O-, illetve S-ágról,  $\Delta J = 0$  esetén Q-ágról beszélünk. (A Q-ágot feltüntettük a **B.3.** ábrán.) Az átmenetek energiáit az infravörös elnyelés esetéhez hasonlóan számíthatjuk. (Kérdés: Hogyan kaphatjuk meg a nitrogén molekula  $B_e$  egyensúlyi forgási állandóját a Raman-színkép O—S ágai alapján?)

### B.5.4. A színekvonalak relatív intenzitása

Az abszorpció intenzitása az adott átmenet valószínűségével, a kiinduló állapot betöltöttségével és a végállapot elfajultságával (degeneráltságával) arányos. A kiinduló állapot betöltöttsége hőmérsékletfüggő; a Boltzmann-statisztika szerint:

$$n_J \propto (2J + 1) \cdot e^{-\frac{hcBJ(J+1)}{kT}}. \quad (\text{B.26})$$

A forgási végállapot elfajultsága  $(2J_1 + 1)$ . Az átmeneti valószínűséget a kvantumelmélet segítségével lehet kiszámolni.

A  $J_0 \rightarrow J_1$  átmenetre közelítőleg az

$$I_{J_0 \rightarrow J_1} \propto (J_0 + J_1 + 1) \cdot e^{-\frac{hcBJ_0(J_0+1)}{kT}} \quad (\text{B.27})$$

eloszlást kapjuk. Előfordulhat, hogy a spektrométer felbontása nem elegendő a sáv forgási szerkezetének kimutatására. Ekkor a maximális intenzitású vonalak távolságából,

$$\tilde{\nu}_R(max) - \tilde{\nu}_P(max) = \sqrt{\frac{8kTB}{hc}} \quad (\text{B.28})$$

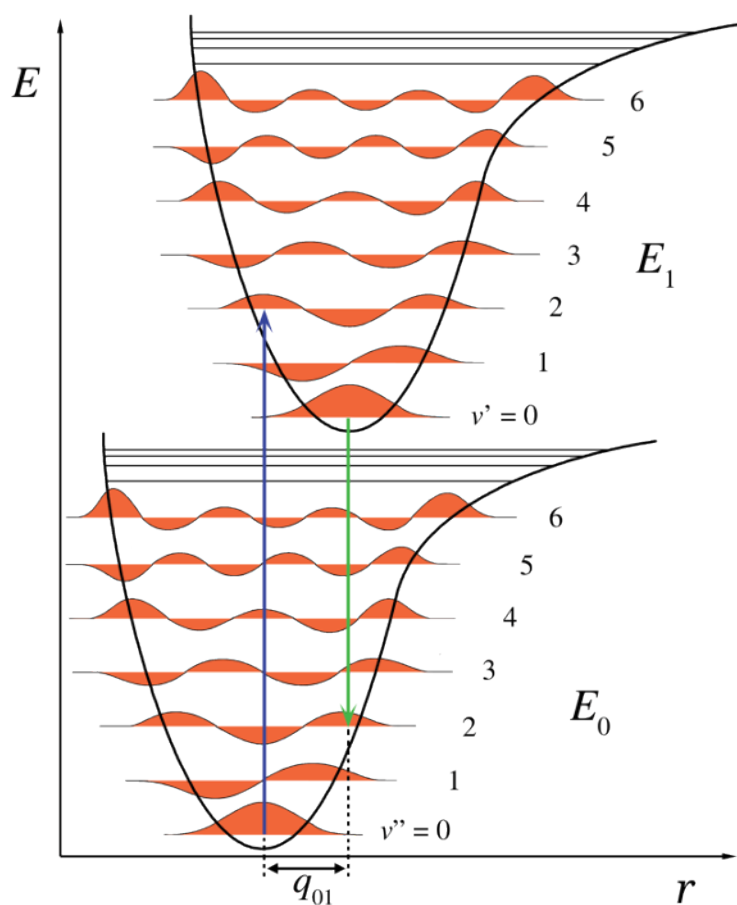
kaphatjuk meg a  $B$  forgási állandót.

### B.5.5. Elektronátmenetek. A Franck–Condon elv

Mivel az elektronok mozgása legalább három nagyságrenddel gyorsabb, mint a magoké, egy elektronátmenet ideje alatt a magoknak „*nincs idejük*” elmozdulni, a közöttük meglévő távolságok nem változnak.

Ha az elektrontermeket a magtávolság függvényében ábrázoljuk, az átmenetek függőleges nyilakkal szemléltethetők (B.4. ábra). Ezek a nyilak a magok legvalószínűbb tartózkodási helyeit kötik össze. Ezek a rezgési alapállapotban ( $v = 0$ ) az egyensúlyi magtávolság, rezgési gerjesztett állapotban ( $v \neq 0$ ) pedig a klasszikus fordulópont környéke. Az elnyelési spektrum rezgési komponenseinek intenzitásviszonyaiból – a Franck–Condon elv segítségével – következtetni lehet az elektronterm görbék egymáshoz képesti helyzetére, vagyis, hogy mennyire változik az egyensúlyi magtávolság az elektronok alap- illetve gerjesztett állapotában (lásd B.4. ábra).

Molekulák emissziós elektronszíneképei esetében hasonló elvet használhatunk, csak az átmenetek iránya fordított. Figyelembe kell venni azt is, hogy egy gerjesztett molekula igen gyakran először sugárzásmentes átmenetekkel (más molekulákkal történő ütközések révén) lekerül a gerjesztett elektronállapot legalsó rezgési nivójára. Ezt követően már fény kibocsátásával kerül vissza az alacsonyabb energiájú elektronállapotba (alapállapotba) – ez a fluoreszcencia. A fluoreszcenciaspektrum az abszorpciós spektrumhoz képest eltolódik kisebb energiák felé. Az abszorpciós spektrumon a gerjesztett állapot rezgési szerkezete látható, míg a fluoreszcenciaspektrumon az alapállapoté. A két spektrum struktúrája mintegy ’tükörképe’ egymásnak. Mindez jól látható a B.5. ábrán.



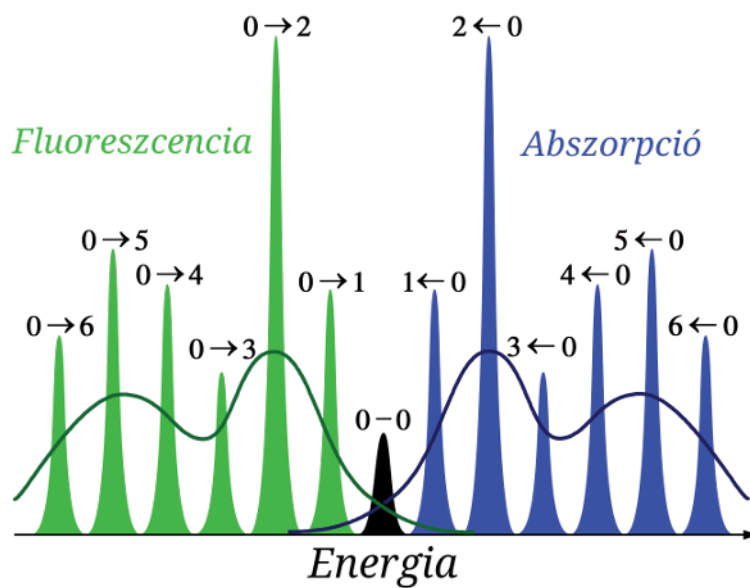
B.4. ábra. A Franck–Condon elv szemléltetése

### B.5.6. Disszociáció, predisszociáció

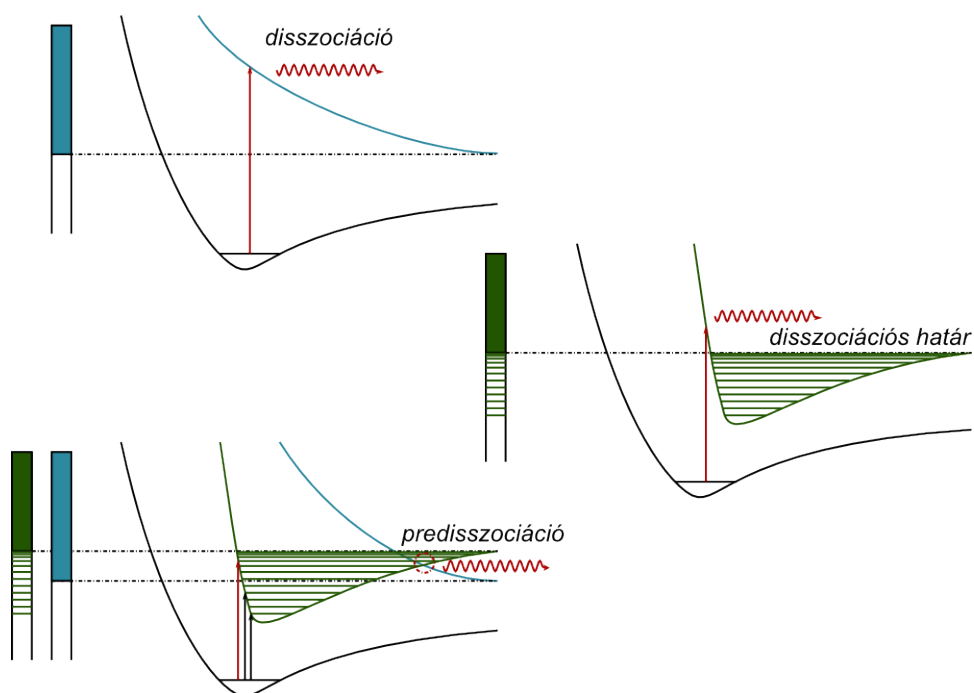
Ha fényelnyelés következtében a molekula disszociál, szabad atomok keletkeznek, melyeknek mozgási energiája tetszőleges értéket vehet fel. Ezért a színek a rövidebb hullámhosszak irányában egy adott határtól kezdve folytonossá válik. A B.6. ábra a disszociációs folyamatok három lehetséges módját mutatja.

## B.6. Ajánlott irodalom





B.5. ábra. Egy molekula abszorpciós- és fluoreszcenciaspektruma



B.6. ábra. Molekulák disszociációjának jelentkezése elektron-sávszínképekben

- [1] G. Herzberg: Molekulaszínképek és molekulaszervezet, I-II., Akadémiai Kiadó, 1956, 1959
- [2] Kovács I., Szőke J. (szerk): Molekulaspektroszkópia, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987
- [3] L.D. Landau, E.M. Lifsic: Elméleti fizika, Tankönyvkiadó, 1978
- [4] C.S. Johnson Jr., L.G. Pedersen: Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics, Addison-Wesley, 1974
- [5] P. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry, 9th ed., Oxford University Press, 2009
- [6] P.W. Atkins: Molecular Quantum Mechanics, 2nd ed. Oxford University Press, Oxford New York, 1983
- [7] H. Haken, H.C. Wolf: Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, 2nd ed., Springer, 2004

## C. függelék

# Lézerek (Kürti Jenő)

### C.1. Bevezetés

A C. függelékben a lézerekre vonatkozó legalapvetőbb ismereteket ismertetjük. Egy lézer a kényszerített (stimulált, indukált) emisszió jelenségén alapuló fényerősítő. Neve az angol elnevezés kezdőbetűiből áll, LASER = *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation* (magyarul: fényerősítés a sugárzás kényszerített emissziója útján). A mikrohullámú tartományban működő fényerősítőt MASER-nek (ejtsd: mézer) nevezzük. Az első mézert (ammóniamézer) 1954-ben, az első látható tartományban működő lézert (rubinlézer) pedig 1960-ban fejlesztették ki.

Sok lézeralkalmazásnál azt a tényt aknázzuk ki, hogy a lézer által emittált fény frekvencia szerinti energiaeioszlása rendkívül szűk tartományra koncentrálódik, azaz nagyintenzitású és monokromatikus lesz. Más alkalmazásokban a lézerek által kibocsátott fénynyaláb kis keresztmetszetét és csekély divergenciáját használják ki, például iránykitűzésre, vagy optikai pontosságú jusztróizásra.

Napjainkban a lézerek alkalmazási területe rendkívülien kitágult és ez természetesen azzal járt együtt, hogy egyes lézertípusok gyártása tömegmértéket öltött, például félvezető lézereket használnak olyan tömegcikkekben, mint a CD-olvasók, lézer nyomtatók, faxok.

### C.2. A koherencia

A lézerek egyik legfontosabb tulajdonsága, hogy az általuk emittált fény sokkal nagyobb koherenciájú, mint a termikus gerjesztésű forrásoké. E megállapítás természetesen elsősorban a folytonos üzemű lézerekre vonatkozik, melyek általában szűkebb frekvenciasávban sugároznak, mint az impulzus-üzeműek. A kisugárzott fény koherenciahossza – lézertípustól és konstrukciótól függően – néhány centimétertől több tíz méterig terjed.

Koherensnek nevezzük azt a fényt, amelynél egy tetszőleges  $A$  pontban, a különböző

pillanatban beeső fény fáziskülönbsége csak a két időpont közötti időtartamtól függ:

$$\phi(\vec{r}_A, t_1) - \phi(\vec{r}_A, t_2) = \phi(\vec{r}_A, t_1 - t_2).$$

Hasonlóan, egy adott időpillanatban, a tér különböző pontjaiban a fáziskülönbség:

$$\phi(\vec{r}_A, t_i) - \phi(\vec{r}_B, t_i) = \phi(\vec{r}_A - \vec{r}_B, t_i).$$

Más szóval: ha ismerjük a fényhullám fázisát a tér egy pontjában, valamely időpillanatban, akkor ennek alapján bármikor megadhatjuk a pillanatnyi fázisértéket a tér egy másik pontjában (természetesen, ha ismerjük a frekvenciáját). Az ilyen tulajdonságú hullámtól származó diffraktált (vagy egyéb módon kettéosztott) nyalábok szuperpozíciójuk során mindig és mindenütt jól megfigyelhető interferencia-képet eredményeznek (a megvilágítási maximumok és minimumok jól elkülöníthetők).

A valóságban a fenti két koherencia-feltétel egyike sem teljesül tökéletesen. Az időbeli koherencia teljesülésének elvi akadályja, hogy a fény nem folyamatos hullámok alakjában, hanem véges méretű hullámcsomagokként terjed. Amíg az egyik hullámcsomag keresztülhalad a kiválasztott ponton, a koherencia feltétele teljesül, azt azonban semmi sem garantálhatja, hogy a következő hullámcsomag az őt megelőzőével azonos fázisú legyen. Az ugyanazon pontban mérhető fázis tehát csomagról-csomagra változhat. Az időbeli koherencia így tehát csak addig áll fenn, amíg ugyanaz a hullámcsomag van a vizsgált pontban, ezt az időtartamot viszont a csomag geometriai mérete határozza meg, azaz az  $l_c$  koherencia-hossz és a koherens állapot fennmaradásának ideje között fennáll, hogy

$$l_c = c\Delta t,$$

ahol  $c$  a fény terjedési sebessége. A koherenciahossz a fentiek alapján kapcsolatba hozható a fényforrás monokromatikusságával is, ugyanis minél inkább monokromatikus a fény, annál hosszabb hullámcsomagokból áll, azaz

$$l_c = c/\Delta\nu.$$

A térbeli koherencia a fényforrások kiterjedtségével függ össze. A termikus fényforrások ugyanis úgy foghatók fel, mint nagyszámú, egymástól függetlenül sugárzó, pontszerű fényforrások összessége. A tér valamely pontjába jutó eredő fény fázisa attól függ, hogy a fényforrás mely pontjaiban történt emisszió.

A fénytér koherenciájának jellemzésére bevezethetjük a komplex koherencia-fokot:

$$\gamma_{AB}(\tau) = \frac{\Gamma_{AB}(\tau)}{[\Gamma_{AA}(0) \cdot \Gamma_{BB}(0)]^{1/2}}, \quad (\text{C.1})$$

ahol

$$\Gamma_{AB} = \langle U_A(t + \tau) \cdot U_B^*(t) \rangle$$

a fényamplitúdó korrelációs függvénye. A koherencia kísérleti adatokkal történő jellemzésére a fény interferenciájakor kialakuló csíkrendszer láthatóságát szokás használni.

$$V = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}}. \quad (\text{C.2})$$

Ki lehet mutatni, hogy ha a két interferáló nyaláb intenzitása megegyezik, a C.2 és a C.1 kifejezések között fennáll, hogy

$$V = |\gamma_{AB}(\tau)|. \quad (\text{C.3})$$

A fénytér koherencia-tulajdonságait a fentiekben visszavezettük a fényforrás tulajdonságaira. Felmerül a kérdés, nem képzelhető-e el, hogy a fény koherenciája a terjedés során megváltozik. E kérdésre nemleges a válasz, mert E. Wolf kimutatta, hogy a hullámcsomagok közötti korrelációk ugyanazon hullámegyenlet szerint terjednek, mint maguk a hullámcsomagok.

Az, hogy a kísérleteinkben használt fény mennyire koherens, alapvetően a fényforrás megválasztásakor dől el, a nagy koherenciát igénylő mérésekhez célszerű minél pontszerűbb (nem leképezéssel kicsinyítve!), és minél monokromatikusabb forrást választanunk. E választást nagymértékben segíti, hogy a fenti feltételeknek sok szempontból a lézerek felelnek meg leginkább.

### C.3. A lézerműködés alapelve

A lézerek alapvető működésének megértéséhez néhány kvantummechanikai alapfogalomra van szükségünk. Egy kvantált energiaszintekkel rendelkező rendszerben az  $E_m < E_n$  energiájú állapotok közötti átmenet

$$h\nu = E_n - E_m \quad (\text{C.4})$$

energiájú foton kibocsátásával ( $E_n \rightarrow E_m$ ) vagy elnyelésével ( $E_n \leftarrow E_m$ ) jöhet létre. Itt  $h$  a Planck-állandó,  $\nu$  a foton frekvenciája. Ezen átmenetek a  $P_{nm}$  (emisszió) és a  $P_{mn}$  (abszorpció) átmeneti valószínűségekkel jellemezhetők, melyekre fennáll, hogy

$$P_{mn} = u_\nu \cdot B_{mn} \quad (\text{C.5a})$$

$$P_{nm} = A_{nm} + u_\nu \cdot B_{nm}, \quad (\text{C.5b})$$

ahol  $u_\nu$  — a rendszerben kialakult elektromágneses sugárzás energiasűrűsége az átmenet energiájánál,  $B_{mn}$  — az abszorpció átmeneti valószínűségének együtthatója,  $B_{nm}$  — az indukált emisszió átmeneti valószínűségének együtthatója,  $A_{nm}$  pedig a spontán sugárzásos legerjesztődés valószínűsége (Einstein-együtthatók). Az *indukált emisszió* során kibocsátott foton nem különböztethető meg az emissziót kiváltó fotontól, azzal irány és energia szerint, de még fázisát tekintve is megegyezik. Az ilyen újabb foton megjelenése tehát nem változtatja meg az eredeti fénytér koherenciatulajdonságát.

Tételezzük fel, hogy van egy olyan rendszerünk, mely két ( $E_1 < E_2$ ) energiaszinttel rendelkezik. Essen be rendszerünkre egy síkhullám, melynek frekvenciája éppen megfelel a két szint közötti átmenet energiájának. Legyen továbbá a két állapot betöltöttsége  $N_1$  illetőleg  $N_2$ . Ekkor a (C.5a) összefüggés alapján az időegység alatt elnyelt energia:  $h\nu \cdot u_\nu \cdot B_{12} \cdot N_1$ . Ugyanezen idő alatt az emittált energia két részből tevődik össze, egyrészt a spontán emisszió következtében fellépő inkoherens sugárzásból ( $h\nu \cdot A_{21} \cdot N_2$ ), másrészt az indukált emisszió során a térbe koherens módon visszasugárzott,  $h\nu \cdot u_\nu \cdot B_{21} \cdot N_2$  nagyságú energiából. Az egyenesvonalúnak feltételezett terjedés következtében a sugárzási tér energiasűrűsége és a fény intenzitása között fennáll, hogy

$$I_\nu = u_\nu \cdot v, \quad (\text{C.6})$$

ahol  $v$  a fény terjedési sebessége az adott közegben. Ha az  $u_\nu$  nem túlságosan kicsi, a spontán emissziótól származó tagot a megadott irányba történő visszasugárzás szempontjából elhanyagolhatjuk.

Tehát a  $dt$  idő alatt bekövetkezett összes energiaváltozás:

$$du_\nu = h\nu \cdot u_\nu \cdot (B_{21} \cdot N_2 - B_{12} \cdot N_1) \cdot dt. \quad (\text{C.7})$$

Ha a  $dt = dx/v$  összefüggés alapján behelyettesítjük  $dt$  értékét, akkor a beeső fény intenzitásának változása, amíg a közegben egy  $dx$  hosszúságú szakaszt befut:

$$dI_\nu = \frac{h\nu n}{c} \cdot I_\nu \cdot (B_{21} \cdot N_2 - B_{12} \cdot N_1) \cdot dx, \quad (\text{C.8})$$

ahol  $v = c/n$  és  $n$  a közeg törésmutatója. Ennek az egyenletnek a megoldása:

$$I_\nu(x) = I_{\nu 0} \cdot e^{k_\nu x}, \quad (\text{C.9})$$

ahol a  $k_\nu$  extinkciós együttható

$$k_\nu = \frac{h\nu n}{c} \cdot (B_{21} \cdot N_2 - B_{12} \cdot N_1). \quad (\text{C.10})$$

Ha az adott frekvencián  $k_\nu$  értéke negatív, az anyagon történő áthaladás során a fény intenzitása exponenciálisan csökken. ha azonban  $k_\nu > 0$ , a beeső fény ugyanilyen függvény szerint erősödni fog. Figyelembe véve a  $B_{12} = B_{21}$  összefüggést, a fényerősítés feltétele, hogy a betöltési számok  $N_2 - N_1$  különbsége pozitív legyen.

Fényerősítés kialakításához tehát ún. populációinverziót kell létrehoznunk, illetőleg folyamatos működtetés esetén fenntartanunk. Termikus egyensúlyban a két energiaszint betöltöttségének arányát a Boltzmann-eloszlás írja le:

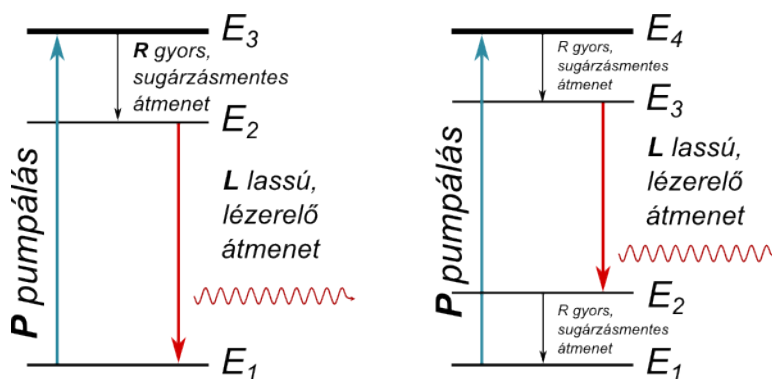
$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}} = e^{-\frac{h\nu}{kT}}, \quad (\text{C.11})$$

ahonnan látszik, hogy termikus egyensúly esetén nem alakulhat ki populációinverzió, mert minden pozitív hőmérsékletre  $N_2 < N_1$ . A hőmérséklet növekedésével az  $N_2/N_1$  hányados lassan növekszik és csak végtelen nagy hőmérsékleten éri el az 1 értéket.

A (C.11) egyenlet alapján szobahőmérsékleten szinte nem is találunk atomot gerjesztett állapotban, mert például  $\lambda = 600 \text{ nm}$  esetében  $h\nu = 3,31 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ ,  $T = 300\text{K}$ -en pedig  $kT = 4,14 \cdot 10^{-21} \text{ J}$ , tehát  $N_2/N_1 = 1,89 \cdot 10^{-35}$ .

A populációinverzió kialakítására tehát más módszert kell választanunk. Ehhez az szükséges, hogy a két, lézerelő energiaszinten kívül, további szintek is legyenek az anyagban, melyeket közbenső szintekként használhatunk. Ha rendszerünk három energiaszinttel rendelkezik, és a két gerjesztett szint közül az egyik olyan, hogy erről az alapállapotba történő visszatérés valamilyen ok miatt nehezebben mehet végbe, akkor a C.1a. ábrán látható rendszerünk lesz. A gerjesztés történjék a magasabban fekvő,  $E_3$  szintre. Innen az elektronok egy része (lehetőleg kis része) spontán emisszióval visszatér az alapállapotba, egy másik része pedig ugyancsak spontán emisszióval az  $E_2$  szintre gerjesztődik le. Ha az  $E_2$  szintről a spontán emisszióval történő legerjesztődés valószínűsége kicsi, akkor innen nagy valószínűséggel indukált emisszióval térhet vissza az elektron az alapállapotba, következésképp ennél az átmenetnél léphet fel lézerelés. Az  $E_2 - E_3$  szintpáron a termikus egyensúlytól eltérő, populációinverziót mutató állapot alakulhat ki.

Látjuk, hogy a populációinverzió kialakításának stratégiája három energiaszint esetében az, hogy minél több gerjesztett elektront igyekszünk a lézerelő szintek közül a felsőn tartani. Egy lehetséges másik stratégia, amikor a lézerelésben szerepet játszó alsó szintet – a felső betöltése mellett – igyekszünk minél jobban kiüríteni. Ennek megvalósítása ún. négy szintes rendszerrel lehetséges (lásd a C.1b. ábrát). Ilyenkor a felső lézerelő szintről ( $E_3$ ) legerjesztődő elektron az  $E_2$  szintre jut, mely rendkívül gyorsan kiürül az alapállapot felé. A lézerelés ekkor az  $E_3 \rightarrow E_2$  átmenet során jön létre. A legtöbb lézer ilyen sémával működik.



C.1. ábra. A lézerelési szintek sémája: háromszintes lézer (bal), négy szintes lézer (jobb)

Az eddig elmondottak alapján tehát rendelkezünk egy olyan mechanizmussal, mely-

nél az anyagon keresztülhaladó fény az áthaladás során erősödik (intenzitása nő). Az erősítés mértékét a  $k_\nu$  extinkciós együttható mellett az átvilágított anyag vastagsága (a fény úthossza az anyagon) szabja meg. Gyakran előfordul, hogy a  $k_\nu$  értéke olyan kicsi és/vagy a fellépő veszteségek olyan nagyok, hogy a reális esetekben nem juthatunk érdemi fényerősítéshez. Ilyenkor a lézerelő anyag két végére elhelyezett tükrök segítségével többször végigfuttatva a fényt az anyagon, megvalósíthatjuk az erősítést. Könnyen belátható, hogy ha az erősítő közeg valamely pontjában kiinduláskor a  $h\nu$  energiájú fotonok sűrűsége  $n$ , akkor többszöri oda-visszafutás után e ponton keresztül átáramló energiasűrűség

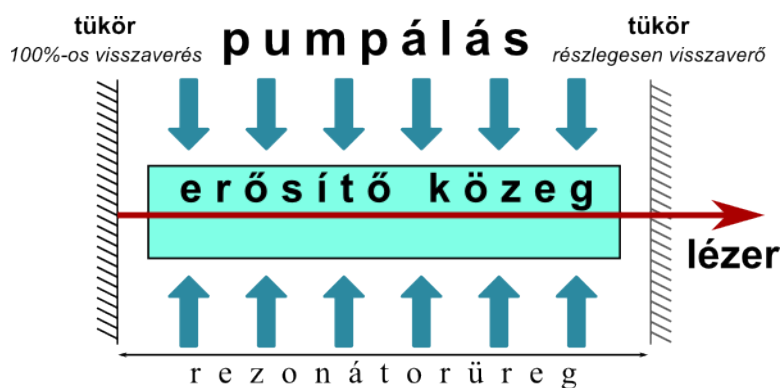
$$p = nh\nu(1 + e^{[2(k_\nu L - \gamma) + \dots]}) = \frac{nh\nu}{1 - e^{[2(k_\nu L - \gamma)]}}, \quad (\text{C.12})$$

ahol  $L$  az erősítésre használt anyag hossza (mérete a fényterjedés irányában),  $\gamma = \ln r$  a veszteségi tényező (a tükrökről a ráeső fénynek csak  $r$ -ed része verődik vissza és  $r < 1$ ,  $k_\nu$  az extinkciós együttható. A

$$k_\nu \approx \frac{\gamma}{L} \quad (\text{C.13})$$

feltétel teljesülése esetén a lézerben haladó fényteljesítmény a végtelenhez tart, ezért a (C.13) feltételt az öngerjesztés feltételének nevezik és a  $k_\nu$  ennél valamivel kisebb értékei mellett már fellép a lézeres fénygerjesztés. (Az  $r$  reflexió az üreg "zárt" végén lévő tükrök esetében nagyobb, mint 99%, míg a "nyitott" oldalon, ahol a lézerfény kilép, általában 96...99% közé esik. Különösen nagy teljesítményű lézereknél technikai problémát jelenthet a lézer-optika anyagának megválasztása, hogy a lézeren belüli fényintenzitás ne okozzon tartós károsodást.)

A lézer két végére elhelyezett tükrök segítségével egyúttal egy optikai rezonátort (üreget) alakítottunk ki: a lézer aktív térfogatába eső valamely pontba a jobb és bal oldalról érkező, visszaverődött fénynek fázishelyesen kell összeadódnia, nem alakulhat ki



C.2. ábra. A lézer-rezonátor vázlata

véletlenszerű interferencia. Ezért a stabil működés azt kívánja, hogy a két tükrök között



állóhullámok alakuljanak ki, azaz

$$n\lambda = 2L' \quad (n = 1, 2, \dots),$$

ahol  $\lambda$  a fény hullámhossza a lézerelő közegben és  $L'$  a tükrök egymástól való távolsága. Az egymás után következő módusok között a hullámhossz változása nagyon csekély:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{1}{n}.$$

A  $k_\nu$  extinkciós együttható frekvencia-függése általában olyan, hogy értéke egy szélesebb sávban teszi lehetővé a lézerműködést. Ebbe a frekvenciasávba több ilyen, ún. longitudinális módushoz tartozó frekvencia is beleeshet, ezért a lézer általában több módusban is üzemel. Ugyanehhez a kérdéskörhöz tartozik, hogy az üregben transzverzális irányban is kialakulhatnak rezgési módusok, melyek a nulladrendűtől eltekintve (mely Gauss-nyaláb), úgy jelentkeznek, hogy a kilépő lézerfény keresztmetszetében a fény intenzitáseloszlásában nullahelyek jelennek meg.

## C.4. Lézertípusok

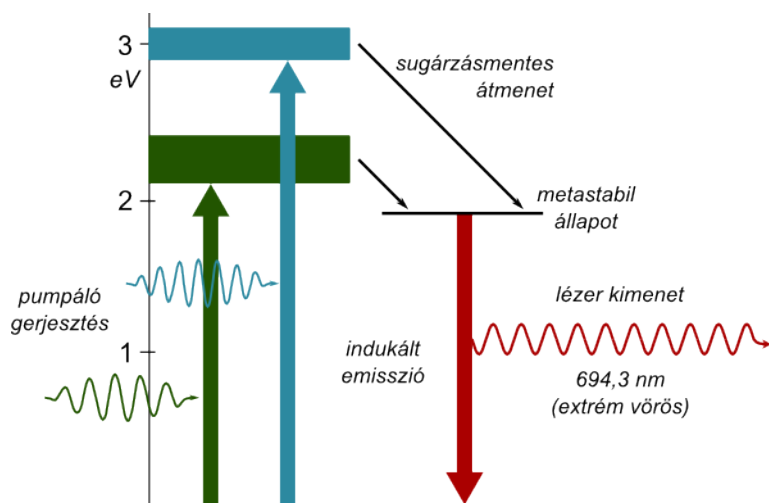
A lézereket több szempont alapján csoportosíthatjuk:

- üzemmódjaik szerint lehetnek folytonos-, vagy impulzusüzeműek,
- a lézerelő anyag jellegzetessége szerint gáz-, folyadék- vagy szilárdtestlézerek, illetőleg
- félvezető-, festék-, kémiai- és excimer lézerek, hogy csak az ismertebbeket említsük.

Általában a lézerelő anyag határozza meg az emittált fény frekvenciáját, illetőleg a festéklézerek esetében frekvenciatartományát. Az alábbiakban röviden ismertetünk néhány olyan elterjedt lézertípust, melyekkel a laboratóriumi gyakorlatok során találkozhatunk.

Az ún. háromszintes lézeres működés valósul meg a legelőször felfedezett impulzusüzemű rubinlézerekben (lásd a C.1. és a C.3. ábrákat).

A rubinban, mely Cr szennyező atomokat tartalmazó  $\text{Al}_2\text{O}_3$  kristály, a  $\text{Cr}^{3+}$ -ionok gerjesztődnek. Az  $E_3$  szint” ebben az esetben két, elég széles energiasáv, melyeket a  $\lambda_1 \approx 500 \dots 600$  nm, illetőleg  $\lambda_2 \approx 360 \dots 440$  nm hullámhosszúságú zöld és kékeslila fényvel gerjeszthetünk. A gerjesztési sáv szélessége fontos szerephez jut a megvalósítás során, ugyanis a gerjesztésre használt villanólámpák a gerjesztési energiát egy széles frekvenciatartományban szolgáltatják. Ezekből a sávokból a  $\text{Cr}^{3+}$ -ionok nagy valószínűséggel (kb.  $5 \cdot 10^{-8}$  sec idő alatt) sugárzás nélküli átmenetek útján egy hosszú élettartamú (3 ms körüli), metastabil szintre jutnak, ahol ily módon ”fennakadván”, kialakíthatják az alapállapothoz képesti populációinverziót. Az  $E_2$  és az  $E_1$  szintek közötti átmenet során az anyag  $\lambda \approx 694,3$  nm hullámhosszúságú sugárzást bocsát ki. Miután a rubin esetében mind az  $E_2$ , mind az  $E_1$  szint dublett,



C.3. ábra. A rubinlézer energiaszintjei és átmenetei sematikusan

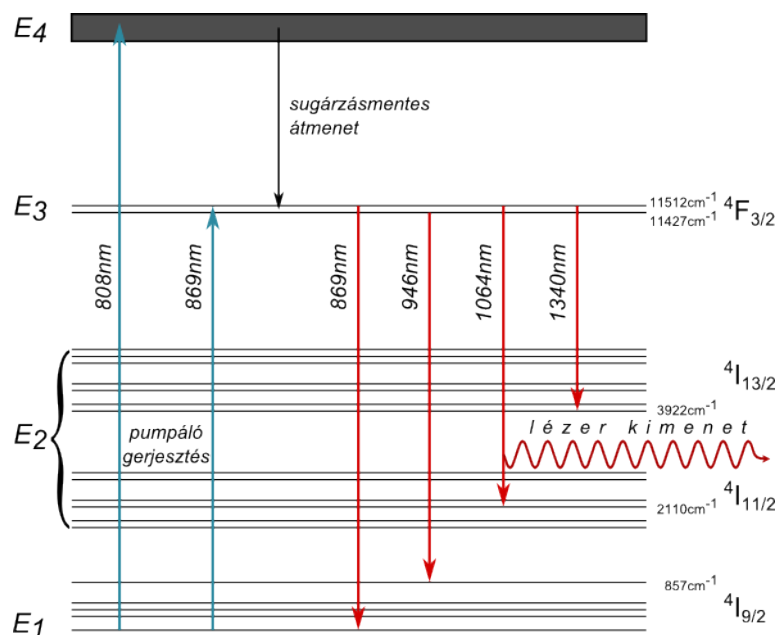
ezek felhasadása miatt a rubinlézer által emittált fény hullámhossza és vonalszélessége hőmérsékletfüggő. (Ugyanez az átmenet játszódik le akkor is, amikor a rubin megvilágítása után vörös fény kibocsátásával fluoreszkál.)

A négy energiaszinttel működő lézer példái a  $\text{Nd}^{3+}$ -ion gerjesztett állapotait felhasználó Nd-lézerek. Ezeket a *Nd*-szennyezőst hordozó közeg alapján *Nd* :YAG-lézereknek (YAG = Yttrium-Aluminium-Gránát), *Nd* :üveg-lézereknek nevezik.

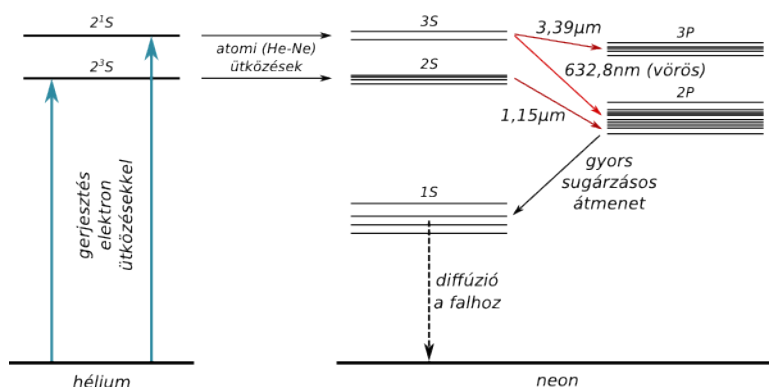
A  $\text{Nd}^{3+}$ -lézerekben a pumpálást általában villanólámpákkal oldják meg, ezek a Nd-ionokat viszonylag nagy energiájú szintekre gerjesztik, ahonnan sugárzás nélküli átmenetek során a  ${}^4F_{3/2}$  szintre jutnak. Ezen a hosszabb élettartamú szinten jön létre a populációinverzió. A lézerfény kibocsátása a rövid élettartamú és emiatt gyorsan kiürülő  ${}^4I_{11/2}$  szintre való legerjesztődés során történik. A  ${}^4F_{3/2}$  állapot két szintre, míg a  ${}^4I_{11/2}$  állapot hat szintre hasad fel. Emiatt több, különböző hullámhosszúságú sugárzás emittálása lehetséges, melyek közül a legnagyobb erősítéssel rendelkező, 1064 nm hullámhosszúságút szokták használni (lásd a C.4. ábrát).

Mint említettük, a Nd-lézer populációinverziós szintje hosszú élettartamú, a lézerelés küszöbenergiája pedig viszonylag alacsony, emiatt a szokásos üzemmódban (impulzusüzemű gerjesztés) a lézer egy körülbelül 200  $\mu\text{sec}$  hosszú impulzus-sorozatot sugároz ki, melyben az egyes impulzusok 2...4  $\mu\text{sec}$ -os időközökkel követik egymást, és energiájuk relatíve kicsi. Emiatt szokás az ún. *Q-kapcsolás*, amikor a lézer rezonátorának jósági tényezőjét külső vezérléssel változtatjuk, és így elérhető, hogy a kb. 200  $\mu\text{sec}$  idejű pumpálás alatt a lézer ne emittáljon, hanem ezt követően adjon ki egy rövid (<10 nsec) és nagy intenzitású impulzust.

A legelterjedtebb lézertípusok közé tartozik a He-Ne lézer, mely folytonos üzemű, gáztöltésű lézer. (Általában 100 Pa He és 10 Pa Ne töltettel.) A gerjesztést egyenáramú, vagy váltakozóáramú kisüléssel hozzák létre, melynél a kisülési áramot esetenként modulálni lehet, így a lézerkimeneten modulált fényjelet kaphatunk.



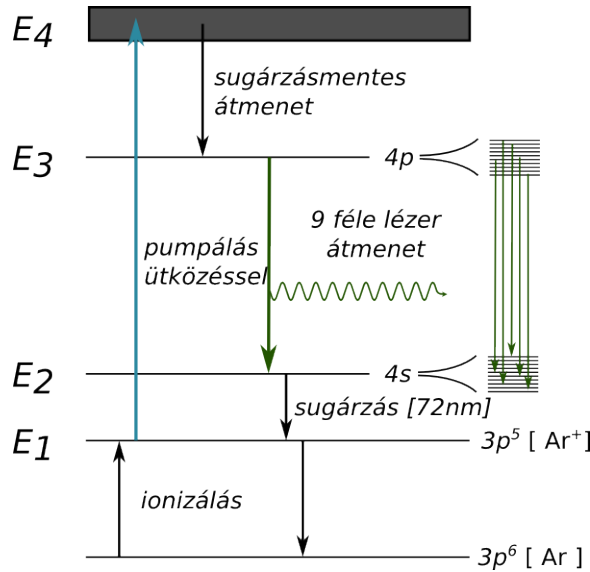
C.4. ábra. Az  $\text{Nd}^{3+}$  lézerelő energiaszintjei (nem méretarányosan)



C.5. ábra. A He-Ne lézer lézerelő energiaszintjei (nem méretarányosan)

A He-Ne lézerben a lézerelő átmenet a Ne gerjesztése során alakul ki. Jellegzetes emissziós vonalainak hullámhossza 3390 nm, 1150 nm és az általában használt vörös fényű 632,8 nm (lásd a C.5. ábrát). A lézert gerjesztő kisülésben az elektronok ütközése révén végül is a héliumatomok két metastabil, hosszú élettartamú állapota telítődik: a  $2^3\text{S}$  állapot ( $10^{-4}$  sec) és a  $2^1\text{S}$  állapot ( $5 \cdot 10^{-6}$  sec). E két állapot energiája majdnem teljesen megegyezik a Ne-atomok  $2p^5 4s$  (hagyományos, ún. Paschen-jelöléssel: 2s), illetőleg a  $2p^5 5s$  (Paschen-jelöléssel: 3s) gerjesztett állapotainak energiájával. Amikor tehát egy gerjesztett állapotú He Ne-nal ütközik, nagy valószínűséggel átadja gerjesztési energiáját a Ne atomnak,

melynél ennek eredményeként e két szinten kialakulhat populációinverzió. A 632,8 nm-es lézérátmenet a Ne 3s szintjéről a 2p<sup>5</sup>3p (Paschen: 2p) szintjére történik. Ennek élettartama relatíve rövid, 10<sup>-8</sup> sec, és ezután legerjesztődik a 2p<sup>5</sup>3s ( Paschen: 1s) állapotba. Végül, a Ne-atomoknak alapállapotba történő visszajutásában fontos szerephez jut az a folyamat, melynek során a gerjesztett állapotban (1s) visszamaradt Ne-atomok a cső falához ütközve veszítik el gerjesztési energiájukat. Elsősorban hűtési problémák miatt folytonos sugárzású He-Ne lézerek 0,1...50 mW teljesítménnyel sugároznak.



C.6. ábra. Az Ar<sup>+</sup>-ion lézerező átmenetei (nem méretarányosan)

A folytonos üzemű, gáztöltésű lézerek egyik csoportját alkotják az ún. ion-lézerek, melyek általában a He-Ne lézernél nagyobb teljesítményű sugárzást bocsátanak ki (0,1...10 W). Mind a Kr-ion lézer, mind az Ar-ion lézer több hullámhosszon képes sugározni, a lehetőségek közül (ha monokromatikus sugárzásra van szükség, azaz egymódusú üzemet kívánunk), a lézer rezonátorába épített diszperziós elem segítségével kiválaszthatjuk azt a hullámhosszat, melyen a rezonátor vesztesége kellően kicsi lesz ahhoz, hogy lézerhatás lépjen fel.

Az Ar-ion lézernél a gerjesztő gázkisülés ionizálja az Ar 3p<sup>6</sup> alapállapotát és 3p<sup>5</sup> ionizált állapot képződik. Az így képződött ionokat a kisülés nagyenergiájú elektronjaival történő további ütközések magasabb gerjesztett állapotba viszik, melyekből a 4p szint lehetséges állapotaiba jutnak vissza sugárzás nélküli átmenetek során – ez a szint lesz a populációinverziós szint a 4s állapothoz, mint alsó szinthez képest. Mind a két említett szint tulajdonképpen több energiaszintre felhasadó multipliett állapot, melyek között ilymódon néhány sugárzásos kombináció is kialakulhat. Az Ar-ion lézer esetében a lézerező átmenetektől származó sugárzások a 457,9...514,5 nm hullámhossz-tartományba esnek. (Kr-ion lézer esetében 647,1...676,4 nm.) A legnagyobb intenzitást kibocsátó, egyvonalas módus hullámhossza: 514,5 nm.

Bár a laboratóriumban ilyennel nem találkozhatunk, megemlíjtük még a CO<sub>2</sub>-lézert, mely szintén gáztöltésű és gerjesztése a gázon keresztüli áram segítségével történik. E lézernél a lézerelő átmenetek a molekuláris gerjesztési szintek között jönnek létre, melyeket a gázba kevert N<sub>2</sub> molekulák gerjesztett állapotaiból az ütközések során átadott energia gerjeszt. A CO<sub>2</sub>-lézerek 10,6 és 9,6 nm-es hullámhosszú, infravörös sugárzásukkal, valamint nagy teljesítményükkel (0,1... 5 kW) elsősorban ipari alkalmazásokban játszanak fontos szerepet.

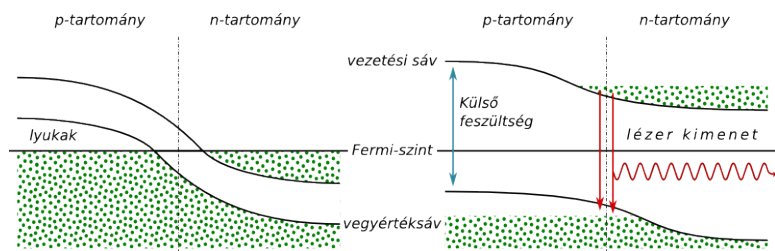
Az utóbbi években a félvezetőgyártás technológiája olymértékben fejlődött, hogy lehetőség nyílt a látható fény hullámhossz-tartományában sugárzó félvezető lézerek előállítására. A félvezető lézerek a gyártási technika miatt más optikai jellegzetességekkel rendelkeznek, mint az eddig tárgyalt lézertípusok: kevésbé monokromatikusak, jellegzetesen divergens nyalábot adnak, mindezek miatt általában koherenciájuk kisebb. Miután a bennük kialakított rezonátor négyzetes keresztmetszetű és viszonylag rövid, a ki lépő lézernyaláb erősen divergens (a divergencia szöge általában 20... 40 fok) és a két, egymásra merőleges irányban is különböző. A belőlük kiinduló két Gauss-nyaláb konfokális paramétere különböző, így a lézer asztigmatizmussal rendelkezik (a kiinduló nyaláb nem fókuszálható ugyanabba a pontba). Ugyanakkor a félvezető lézerek nagy előnye, hogy csekély térfogatúak, térfogatukhoz képest jelentős teljesítmény leadására képesek, és nem igényelnek nagyfeszültségű tápforrást a gerjesztéshez.

A nagy fényteljesítmény egyik következménye, hogy túlvezérlés esetén a lézer saját anyaga túlmelegedhet és tartós károsodást szenvedhet. Ennek elkerülése érdekében a félvezető lézerbe integráltan beépítésre kerül egy monitor-fotodióda, melynek árama adja a vezérlés referenciajelét.

A félvezető lézerek általában folytonos üzeműek. A lézer anyaga határozza meg a lézer hullámhosszát, ez a jelenleg nagy sorozatban készítettéknél min. 600 nm.

A félvezető lézerek működése azon alapszik, hogy ha egy p- és egy n-típusú anyag egymással érintkezik (diódát képez), akkor nyitóirányú előfeszítéssel a két anyag között áram indul meg, mely lehetővé teszi a két töltéshordozó rekombinációját, és eközben a felszabaduló energia fénné alakul (lásd a [C.7. ábrát](#)). A lézer rezonátorát e határfelület köré alakítják ki, a félvezető alap olyan szennyezésével, hogy a kialakuló törésmutató-változás tükröként funkcionáljon. (A rezonátorréteg vastagsága néhány mikron, szélessége néhányszor tíz mikron.) A félvezető lézerek anyaga általában GaAs vagy InP, ötvözőként Al, Sn, Te, illetőleg Ge a szokásos.

Az eddigiek alapján úgy tűnhet, hogy a különböző hullámhosszúságú fényforrást igénylő alkalmazásokhoz különböző lézerekre van szükség. Ez általában igaz, azonban mód van arra is, hogy a lézer által emittált fény hullámhosszát közel tetszőlegesen változtassuk. Erre a célra szolgálnak az ún. festéklézerek. A festéklézerek lézerelő anyaga általában olyan, oldatban lévő szerves vegyület, melynél a lézerelés feltétele széles frekvenciatartományban fennáll és így a rezonátorba épített diszperziós elem szabja meg a rezonátor jósági tényezőjét a kívánt frekvencián. A festéklézer gerjesztése valamilyen nagyteljesítményű fényforrással történhet, például egy másik lézerrel.



C.7. ábra. A félvezető lézer: a külső, nyitóirányú feszültség eredményeként előáll egy olyan réteg, melyben a kétféle töltéshordozó rekombinálódhat.

A lézer által emittált fény frekvenciájának megváltoztatására szolgál az ún. frekvencia-többszörözés. Ennek során a primer lézernyalábot egy – az adott energiasűrűség mellett – nemlineáris optikai viselkedést mutató kristályra ejtik be, a kilépő fényből pedig kiszűrjük az alapharmonikust. A frekvenciasokszorozást általában négyszerezésig szokás használni, ennek során az egymás utáni lépésekben a kiindulási energia általában 30...50%-kal csökken.

## C.5. Ajánlott irodalom

- [1] M. Born, E. Wolf: Principles of Optics, Pergamon, 1968
- [2] H. Haken: Light, vol. 2, Laser Light Dynamics, North Holland, 1985
- [3] R.D. Guenther: Modern Optics, Wiley, 1990
- [4] H. Haken, H.C. Wolf: The Physics of Atoms and Quanta, 7th ed., Springer Berlin Heidelberg New York, 2005
- [5] Erostyák J. - Kürti J. - Raics P. - Sükösd Cs., Fizika III, Szerk.: Erostyák János és Litz József, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2006