

# Fizikai Szemle

## MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A Matematikai és Természettudományi Értesítőt az Akadémia 1882-ben indította  
A Matematikai és Physikali Lapokat Eötvös Loránd 1891-ben alapította

LVIII. évfolyam

6. szám

2008. június

## A KVANTUMELMÉLET KIALAKULÁSA PLANCKTÓL DIRACIG

Nagy Károly

ELTE, Elméleti Fizika Tanszék

*Max Planck*ra emlékező előadásomban a fizika huszadik századi fejlődésének azt a csodálatos szakaszát szeretném néhány jellemző példával bemutatni, amely a század első három évtizedére esett. Vagyis, amely a kvantumhipotézistől kezdve a relativisztikus kvantummechanika dinamikai egyenletének felfedezéséig, tehát Plancktól *Dirac*ig tartott. A huszadik század fizikáját ez az első három évtized alapvetően meghatározta. Ekkor született a század két nagyszerű elmélete, a relativitás- és a kvantumelmélet, amelyek az egész század természettudományos fejlődésének tartóoszlopaiként tekinthetők. Az új fizikát kialakító nagyszerű felismerések sora – a huszadik század fizikájának diadalmenete – a Plancktól származó kvantumhipotézissel kezdődött és máig tart. Azon túlmenően, hogy az anyagi világról alkotott tudományos képünket igen nagy mértékben megváltoztatta, a társ-tudományokra kifejtett megtermékenyítő hatásával, valamint a műszaki és orvosi alkalmazásokkal jelentős mértékben hozzájárult az emberek munkájának a megkönnyítéséhez, szórakozásuk megváltozásához, és nem utolsósorban az emberi élet meghosszabbodásához.

Ahhoz, hogy világgépformáló hatásáról, és a korábbi fizika fogalomrendszerének radikális megváltoztatásáról képet alkothassunk, röviden fel kell idéznünk a fizika 19. század végi állapotát. A newtoni klasszikus mechanika kétszáz éves egyeduralma mellé már felsorakozott a Maxwell-féle elektrodinamika,

amely a korábban különálló elektromosságtant, mágnességtant és optikát egységes keretbe foglalva, térelméleti alapon tárgyalja, a tapasztalattal jó egyezésben. Ismert volt az energia megmaradását kifejező energiatétel, a hőtan első két főtétele, és az anyag atomisztikus felépítését – ugyan ekkor még feltevésként – alapul vevő kinetikus gázelmélet. A newtoni klasszikus mechanikának és a Maxwell-elméletnek lenyűgöző hatása volt a kortársakra. Ugyanis a fizikai rendszerek állapotának mérhető mennyiségekkel történő jellemzése, valamint ezek tér- és időbeli változását meghatározó mozgástörvények lehetővé tették a rendszer fizikai állapotának elméleti meghatározását bármely későbbi időben, ha a kezdeti állapotot ismerjük. Az így kiszámított állapot fizikai jellemzői mérésel ellenőrizhetővé váltak, és ezzel az elmélet jóslatai igazolást nyertek. Ez olyan szellemi teljesítmény, amihez hasonló nem volt ezt megelőzően az emberiség kultúrtörténetében. Ezzel magyarázható, hogy a kor legtekintélyesebb matematikusai is mechanikai problémákkal kezdtek foglalkozni. Így keletkeztek a mechanikai mozgástörvényeknek a newtonival egyenértékű, de attól eltérő, sok esetben általánosabb megfogalmazásai, a *mechanika elvei*.

A mechanikához és az elektrodinamikához hozzávéve a fenomenológiai termodinamikát is, elfogultság nélkül mondhatjuk, hogy ezek olyan csodálatos elméletek, és olyan széles jelenséggört foglalnak magukba, hogy a fizika épülete a befejezettség érzetét keltette a kor fizikusaiiban. Ennek jellemzésére szoktuk idézni a német fizikaprofesszort, *Philipp von Jolly*t, aki a hozzá tanácsért forduló fiatal Plancknak azt mondta, hogy fizikával nem érdemes már foglalkozni, mert ott lényegében minden fontosabb kérdés meg van oldva. Ugyanígy nyilatkozott az angol *Lord*

A Magyar Tudományos Akadémia Fizikai Tudományok Osztálya és az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Max Planck születésének 150. évfordulója alkalmából rendezett emlékülésen 2008. május 14-én elhangzott előadás szerkesztett változata. A *Természet Világa* folyóirat 2005. februári számában azonos címmel megjelent cikkem szövegével – kis változtatástól eltekintve – megegyezik.

*Kelvin* is, amikor 1900-ban, egy előadásában azt mondta, hogy csak néhány felhőcske zavarja meg a fizika tiszta kék eget. Ilyen beárnyékoló felhőcskének számított a gázok vonalas színképe, a fényelektromos jelenség, a szilárd anyagok fajhőjének függése a hőmérséklettől, és a hőmérsékleti sugárzás intenzitásának spektrális eloszlása.

## A kvantumhipotézis.

### A sugárzás kvantumos tulajdonságai

A hőmérsékleti sugárzás tanulmányozása során olyan általános sajátságok kiderítését tűzték ki célul, amelyek nem függnek a sugárzást kibocsátó test anyagi minőségétől. Leginkább az izzó testek által kibocsátott sugárzás intenzitásának a rezgésszámtól való függése volt az a probléma, ami a vezető fizikusok egy részét már évek óta foglalkoztatta. Csak a legnagyobbakat említve, *Kirchhoff*, *Wien* és *Rubens* idevonatkozó munkássága jelentős kiinduló pont volt a problémakör megoldatlan kérdéseinek megmagyarázásához. A sugárzás intenzitásának a rezgésszámtól való függését adott hőmérsékleten ki lehetett számolni az elmélet alapján és kísérleti úton is meg lehetett határozni. A kísérleti vizsgálatok azt mutatták, hogy a hőmérsékleti sugárzás intenzitása a termikus egyensúlyi állapotban független a kibocsátó test anyagi minőségétől, csak a hőmérséklettől és a rezgésszámtól függ. A termikus egyensúlyi állapot alatt azt értjük, hogy a sugárzó test időegység alatt átlagosan annyi energiát sugároz ki, mint amennyit elnyel. A problémát az okozta, hogy az intenzitás elméleti úton meghatározott függése a rezgésszámtól nem egyezett a kísérleti eredményekkel.

Ebbe a kutatásba kapcsolódott be Planck (1. ábra). Ő korábban termodinamikai kérdésekkel foglalkozott, ezért erről az oldalról próbálkozott a kérdés megoldásával. A tükröző falakkal bezárt üregben kialakult egyensúlyi sugárzás entrópiáját határozta meg. A tapasztalattal jól egyező eredményt azzal a feltevésel kapott, hogy a sugárzást kibocsátó testnek gondolt oszcillátor (harmonikus rezgést végző tömegpont) energiáját  $h\nu$  kvantumok egész számú többszörösének tekintette. A  $h$  betű itt egy hatás dimenziójú univerzális állandót jelent. Planck *hatáskvantumnak* nevezte. Ma a szakirodalom Planck tiszteletére *Planck-állandónak* nevezi.<sup>1</sup> Következésképpen ezek az oszcillátorok a sugárzást  $h\nu$  kvantumok formájában bocsátják ki és nyelik el.

A klasszikus fizika fogalomvilágához szokott fizikusok körében ez a feltevés igen merésznek tűnt. Annyira, hogy Planck is hosszú ideig csak munkahipotézisnek tekintette, és úgy gondolta, hogy a valóságos folyamatokban az energia természetesen folytonosan

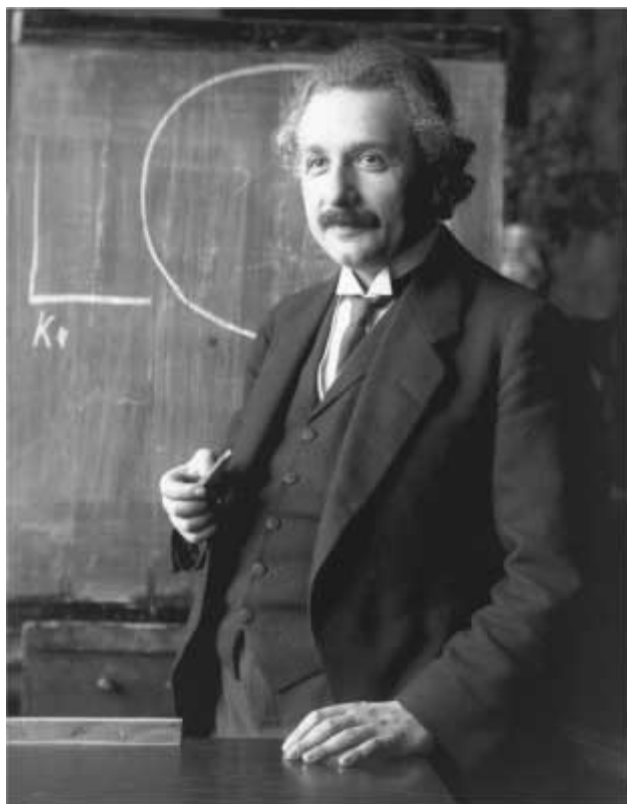


1. ábra. Max Planck 1894-ben

változik, ahogy azt a klasszikus fizika tanítja. A Maxwell-féle elektrodinamika olyan nagy hatással volt rá, hogy nem tudott annak igaz voltától elszakadni. Nagyobb jelentőséget tulajdonított magának a  $h$  hatáskvantumnak. Tudományos életrajzában erre így emlékezik vissza. „Amikor a hatáskvantum jelentését entrópia és valószínűség kapcsolatára végérvényesen megállapítottam, még teljesen megmagyarázatlan maradt az a kérdés, hogy milyen szerepet játszik a  $h$  állandó a fizikai folyamatok törvényszerű lefolyásánál. Ezért rövidesen próbálkozni kezdtem azzal, hogy a hatáskvantumot valamiképpen beilleszsem a klasszikus elmélet kereteibe, de a hatáskvantum minden ilyen kísérletnek makacsul ellenszegült... Miután minden kísérlet meghiúsult, nem volt többé kétség az iránt, hogy a hatáskvantum alapvető szerepet játszik az atomfizikában, és fellépésével új korszak kezdődik a fizikában. A hatáskvantumban ugyanis valami eddig soha nem hallott jelentkezik, amely arra van hivatva, hogy alapjában átalakítsa egész fizikai gondolkodásunkat, amely azóta, hogy *Leibnitz* és *Newton* megalapozta az infinitezimális számítást, minden kauzális összefüggés folytonosságának feltételezésén alapult. ... Most tehát pontosan tudtam, hogy a hatáskvantum a fizikában jelentősebb, mint ahogy kezdetben hajlamos voltam feltételezni, és teljesen átérttettem, mennyire szükséges, hogy teljesen új szemléletet és számítási módszert vezessünk be atomisztikus problémák tárgyalásánál.”

A kvantumhipotézis fizikai jelentőségét, vagyis, hogy az energia kvantumos szerkezetű, *Albert Einstein* ismerte fel. Ennek alapján adott elméleti magya-

<sup>1</sup> Kirchhofftól tudjuk, hogy az intenzitás független az anyagi minőségtől, ezért Planck – zsenialitását mutatva – olyan modelltesttel, sugárzást kibocsátó anyaggal – az oszcillátorral – dolgozott, amire a számítás könnyen elvégezhető.



2. ábra. Albert Einstein 1921-ben, Bécsben

rázatot 1905-ben a fényelektromos jelenségre, amelyet a fény hullámelmélete alapján nem lehetett megérteni. A jelenség abban áll, hogy ha fémlémezt – különösen alkáli fémet – ultraviolet fényvel megvilágítunk, elektronok lépnek ki a fém felületéről. A kísérleti tanulmányozás azt mutatja, hogy a kilépő elektronok sebessége nem függ a megvilágító fény intenzitásától, hanem csak a rezgésszámától. A rezgésszám növelésével nő az elektronok sebessége. Másrészt, a fény intenzitásával a kirepülő elektronok száma változik. Nevezetesen, vele arányosan nő. Einstein magyarázata szerint a fém felületén levő atom a ráeső fényből elnyel egy energiakvantumot, ami által egy elektronja akkora energiát vesz fel, hogy kiszakad az atom kötelékéből. A fémre eső fénykvantum  $h\nu$  energiája fedezi a kilépéshez szükséges munkát és az elektron  $\frac{1}{2}mv^2$  mozgási energiáját. A kilépési munka az az energia, amivel az elektron kötve van az atomban. A jelenségnek a fényenergia kvantumos természetén alapuló magyarázatáért kapta meg Einstein (2. ábra) 1921-ben a fizikai Nobel-díjat.

Einstein az energia kvantumos szerkezetének a feltevésénél még tovább is ment, mert a fény impulzusát is kvantumos természetűnek tekintette, vagyis impulzuskvantumok összegeként fogta fel. Eszerint az elektromágneses sugárzás (tehát a fény is) felfogható úgy, mintha  $h\nu$  energiájú, és  $h\nu/c$  impulzusú kvázi-részecskék összessége lenne. Ez a kép hasonló ahhoz, amit az ideális gázzal elgondolunk. A kvázi előtag arra utal, hogy ezek a fénykvantumok mégsem tekinthetők a szó eredeti értelmében részecskéknek, mert mint a kvantumelmélet későbbi alakulása meg-

mutatta, ezekhez a pálya fogalma nem rendelhető hozzá. Az energiával és impulzussal rendelkező fénykvantumot nevezzük *foton*nak. Érdekes felfigyelni rá, hogy a foton impulzusának a fenti kifejezése ugyanolyan alakba írható, mint a közönséges részecskéké; nevezetesen *tömeg*  $\times$  *sebesség* alakba. Tömegére a  $h\nu/c^2$  adódik. Ez a foton tehetetlen tömege. Nyugalmi tömege, összhangban a relativitás elméletével, zérus.

Ez az iménti gondolatsor ellentétben van az elektromágneses tér Maxwell-féle elméletével, a klasszikus elektrodinamikával. Ez ugyanis a fényt hullámként írja le, és a tapasztalattal jó egyezésben magyarázza meg a fény törését, visszaverődését, elhajlását és interferenciáját. Tulajdonképpen már a hőmérsékleti sugárzás problémájánál a fény kvantumos szerkezetével találkozunk, mert ha a fényforrásként tekintett oszcillátor a sugárzást  $h\nu$  adagokban bocsátja ki és nyeli el, akkor ebből természetes módon adódna a következtetés, hogy a fényenergia kvantumos szerkezetű. Planck azonban oly mértékben meg volt győződve a Maxwell-elmélet igazáról, hogy ettől a lépéstől visszariadt. Nem így Einstein, aki mentesen minden előítéllettől bátran kijelentette, hogy a hőmérsékleti sugárzás Planck-féle magyarázatában valójában a sugárzás energiájának kvantumos volta nyilvánul meg. Einstein elgondolását a fényelektromos jelenség magyarázata teljesen igazolta.

A sugárzás részecsketulajdonságának még ennél is meggyőzőbb kísérleti bizonyítéka a *Compton* által 1923-ban elvégzett szórás-kísérlet, amit a szakirodalom egyszerűen Compton-szórás-ként ismer. Itt arról van szó, hogy elektromágneses sugárzás, például röntgensugár szóródik könnyű elemekből álló anyagon, és közben megváltozik a szórt sugárzás rezgésszáma a beesőéhez képest. Ugyanakkor a könnyű elemből elektronok repülnek ki. A jelenség egyszerűen és szemléletesen magyarázható a fény részecskéjellege alapján. A beeső foton (mint részecske) az atom elektronjával ütközik, és közben energiájának egy részét átadja az elektronnak. Nagy rezgésszámú fény esetén az elektron kötési energiája elhanyagolható a foton energiája mellett, és ezért a jelenség úgy fogható fel, mintha a foton szabad elektronon szóródna. Az energia- és impulzustételből kiszámítható a fény rezgésszámának megváltozása, ami jól megegyezik a kísérleti eredményekkel. Az Einstein-féle fotonhipotézis az 1920-as évek végén kidolgozott kvantum-elektrodinamikának már elméleti következménye, amit azóta számtalan kísérleti eredmény bámulatos pontossággal igazolt.

A kvantumhipotézis századik évfordulóján megjelent méltató cikkek és előadások során kapott nyilvánosságot az az írásos dokumentum, amellyel tekintélyes német fizikusok: Max Planck, *Walter Nernst*, Heinrich Rubens és *Emil Warburg* 1913-ban Einsteint a Porosz Tudományos Akadémia tagjának javasolták. Az ajánlásban a munkásságát nagyra értékelő sorok mellett az is szerepelt, hogy „spekulációiban néha szeret túllőni a célon, mint például a fénykvantum

hipotézisében, ezt azonban nem szabad terhére felelni”. Ez mutatja, hogy a kvantumhipotézist még a vezető fizikusok is milyen nehezen fogadták el. A tudományos életrajzából vett fenti Planck-idézet is ezt erősíti meg.

Az elektromágneses sugárzás kvantumozott természetét a huszadik század első két évtizedében igen élénk viták tárgya volt. Tulajdonképpen az okozta a problémát, hogy nem tudták összeegyeztetni a fény hullám- és részecskejellegét. Külön érdekesség, hogy a részecskejellegesség megtestesítő foton energiájának és impulzusának kifejezésében a Planck-állandó mellett a hullámok jellemző hullámhossz vagy a rezgésszám is megjelenik. Tehát a részecskejelleg is használja a hullámfelfogást jellemző paramétereket. A sugárzásnak ez a kettős természete volt a fő témája az 1911-ben Brüsszelben rendezett első Solvay-konferenciának (3. ábra). E konferencia sorozatot *Ernest Solvay* belga fiziko-kémikus indította útjára azzal a céllal, hogy a fizika aktuális kérdéseit a fizikusok megbeszélhessék. A fizika huszadik századi történetében ezek a konferenciák fontos szerepet játszottak. Tematikájuk tükrözi a kor fizikájának legizgalmasabb kérdéseit, és a hozzájuk kapcsolódó vitákat, az új fogalmak térhódítását, és a kialakulóban levő kvantumelmélet értelmezésének letisztulását. Meg kell említeni, hogy a kezdeti időszakban ezeknek a vitáknak elsősorban Albert Einstein és *Niels Bohr* voltak a főszereplői, de később már ugyanolyan heves résztvevői voltak az akkor még egészen fiatal *Werner Heisenberg* és *Wolfgang Pauli* is, akik a fizika fogalomrendszerének radikális megváltoztatását kezdeményezték.

Heisenberg határozottan képviselte azt a nézetet, hogy az atomok fizikájának megfogalmazásában csak megfigyelhető mennyiségekhez kapcsolódó fogalmak szerepelhetnek. Például az elektron pályája az atomban nem figyelhető meg, ezért az elméleti leírásból is ki kell hagyni. Ez nem megy könnyen, mert a megszokott, eddig jól bevált régi fogalmaktól nehéz megszabadulni. Ez még inkább igaz, ha az atomfizikai jelenségekhez a makroszkopikus képeket társítjuk.

Visszatérve az elektromágneses sugárzás kvantumozott természetéhez, megemlítem, hogy azzal Einstein később is behatóan foglalkozott. A Planck-törvénnyel kapcsolatban az izgatott, hogy milyen a sugárzás valódi mechanizmusa. Ennek eredményeként a törvénynek olyan levezetését adta meg, amely a sugárzás kibocsátó oszcillátor kvantumállapotai közötti átme-



3. ábra. Az első Solvay-konferencia résztvevői 1911-ben. Ülnek (balról jobbra): W. Nernst, M. Brillouin, E. Solvay (ő nem volt ott a fénykép készítésekor, később ragasztották rá a képre), H. Lorentz, E. Warburg, J. B. Perrin, W. Wien, M. Curie és H. Poincaré. Állnak (balról jobbra): R. Goldschmidt, M. Planck, H. Rubens, A. Sommerfeld, F. Lindemann, M. de Broglie, M. Knudsen, F. Hasenöhr, G. Hostelet, E. Herzen, J. Hopwood Jeans, E. Rutherford, H. Kamerlingh Onnes, A. Einstein és P. Langevin. A képet B. Couprie készítette.

netek valószínűségének fogalmára épül. Az oszcillátor a magasabb energiájú gerjesztett állapotból alacsonyabb energiájúba kétféleképpen mehet. Egyrészt a ráeső sugárzás hatására, másrészt spontán módon magától is. Előbbit indukált, az utóbbit spontán emisszióknak nevezzük. Adott idő alatt a gerjesztett állapotból alacsonyabb energiájúba – elvileg – minden oszcillátor átmehetne, de a valóságban csak egy részük megy át. Ennek értelmezésére Einstein bevezette az átmeneti valószínűség fogalmát, amely megadja azon oszcillátorok hányadát, amelyek időegység alatt az alacsonyabb energiájú állapotba mennek. A spontán emisszió esetén az átmenetben résztvevő oszcillátorok száma a gerjesztett állapotban levők számának és az átmeneti valószínűségnek a szorzatával lesz egyenlő. Az indukált emisszióknál és abszorpcióknál ezt még a sugárzás intenzitásával is szorozni kell. A termikus egyensúly feltétele az, hogy e két fajta emisszióban időegység alatt átlagosan résztvevő oszcillátorok száma egyezzen meg az abszorpcióban résztvevők mennyiségével. Ez a gondolatmenet egyszerűen vezet a Planck-törvényhez, ha feltesszük, hogy az indukált emisszió és az indukált abszorpció átmeneti valószínűségei megegyeznek.

Az átmeneti valószínűség fogalmának a bevetésével Einstein a sugárzás mechanizmusának a leglényegesebb kvantumfizikai törvényszerűségét ismerte fel. A később kidolgozott kvantummechanika és a kvantumtérelmélet ma is ennek a fogalomnak a felhasználásával írja le a kvantumállapotok közötti átmeneteket. A kvantummechanika állapotfüggvényének *Max Born*tól származó statisztikus értelmezése is a valószínűség fogalmán alapszik. A fizikatörténet megoldatlan rejtélye, hogy Einstein, aki elsőként vezette be a valószínűség fogalmát a kvantumelméletbe, an-



monokromatikus oszcillátorokkal helyettesítette, hanem figyelembe vette a kristályrács, mint egész kollektív rezgéseit. Ezáltal különböző sajátrezgéseket kapunk, szemben az eredeti Einstein-féle modellel, amelynél minden oszcillátor ugyanazzal a frekvenciával rezeg. Így a tapasztalattal jól egyező hőmérsékletfüggés adódik. A fajhő  $T^3$  függvény szerint tart a zérushoz, midőn a hőmérséklettel az abszolút zérusponthoz közeledünk.

## Atomfizika. Bohr-elmélet

A sugárzásokkal kapcsolatos kvantumos természetű problémák megbeszélése után ráterek a vizsgált kor fizikai fejlődésének másik, máig ható,

4. ábra. Az 1961-es Solvay-konferencia résztvevői. Hátsó sor (balról jobbra): S. Mandelstam, G. Chew, M. L. Goldberger, G. C. Wick, M. Gell-Mann, G. Kallen, E. P. Wigner, G. Wentzel, J. Schwinger, M. Cini és A. S. Wightman, előttük (balról jobbra): I. Prigogine, A. Pais, A. Salam, W. Heisenberg, F. J. Dyson, R. P. Feynman, L. Rosenfeld, P. A. M. Dirac, L. Van Hove és O. Klein, ülnek (balról jobbra): S. Tomonaga, W. Heitler, Y. Nambu, N. Bohr, F. Perrin, J. R. Oppenheimer, W. L. Bragg, C. Möller, C. J. Gorter, H. Yukawa, R. E. Peierls és H. A. Bethe. Fotó: G. Coopmans.

nak statisztikus értelmezésével élete végéig nem tudott egyet érteni. Fizikus körökben elterjedt a neki tulajdonított mondás, miszerint nem hiszi, hogy az Úristen kockajátékos lett volna, amikor a világot teremtette. Egy Max Bornnak írott levelében olvasható ezzel kapcsolatban a következő: „[a kvantummechanika nagyszerű eredményeinek elismerése után írja] egy belső hang azt súgja nekem, hogy még nem jutottunk elég közel az Öreg titkaihoz. Nem hiszem, hogy kockajátékos lenne.”

Ugyancsak az oszcillátor energiájára vonatkozó Planck-féle kvantumhipotézis alapján sikerült megoldást találni a tizenkilencedik század végének egy másik megoldatlan problémájára, a szilárd anyagok fajhőjének hőmérséklettől való függésére, amely a Boltzmann-statisztika szerint a hőmérséklettől független állandónak adódik. A termodinamika – Nernst által 1906-ban felfedezett – harmadik főtétele szerint viszont zérushoz kell tartania, amint a hőmérsékletet az abszolút zérusponthoz közelítjük. Az ellentmondás feloldásához is Einstein adott útmutatást. A szilárd anyag atomjai szabályos elrendezésben, az egyensúlyi helyzet körül harmonikus rezgéseket végeznek. Az atomokat tehát felfoghatjuk úgy, mintha oszcillátorok lennének. A szilárd anyag energiája tehát oszcillátorenergiák összegeként írható. Az utóbbiak a kvantumhipotézis szerint a  $h\nu$  energiakvantumok egész számú többszörösei. Ezt alapul véve kiszámítható a szilárd anyag egy grammjának energiája, amiből a hőmérséklet szerint vett differenciálással adódik a fajhő. A számítás olyan fajhőkifejezésre vezet, amely tartalmazza a hőmérsékletet, és ha a hőmérséklettel a zérusponthoz közeledünk, a fajhő is zérushoz tart. Ezt a gondolatot fejlesztette tovább Debye azzal a finomítással, hogy az atomokat nem

jelentős vonulatára, nevezetesen az anyag szerkezetét érintő fontosabb kérdésekre.

A radioaktivitás és az elektron felfedezésével kísérletileg is igazoltá vált az anyag korpuszkuláris szerkezetének hipotézise, amely a tizenkilencedik században a kinetikus gázelmélet alapját képezte. Minthogy a tapasztalat szerint az anyagból elektronok és alfa-részek jönnek ki, természetes volt a gondolat a tizenkilencedik és huszadik század fordulóján, hogy az atomnak van valamilyen szerkezete. Az elektromosan semleges atomról Rutherford elképzelése az volt, hogy az atom pozitív töltése egyetlen kis központi tartományba sűrűsödik össze, és ezt veszik körül a negatív töltésű elektronok. Ő nevezte el az atom pozitív töltésű kis központi részét az atom magjának. Elgondolását 1909-től kezdve kísérletekkel is megalapozta. A rádium-C sugárforrásból származó alfa-részeket keskeny sugárban valamely anyag vékony lemezére bocsátotta, és vizsgálta azok eltérülését. A cél tárgy atomjának magja és az alfa-rész között Coulomb-kölcsönhatást feltételezve, elméleti úton kiszámítható a szórt alfa-részek eloszlása, amit a kísérletekkel ellenőrizhetünk. A kísérletek azt mutatták, hogy 90 foknál nagyobb szögben is térülnek el alfa-részek. Az elméleti képletekkel összehasonlítva azt találta, hogy az alfa-részek  $10^{-12}$  cm távolságra megközelítik az atom magját, és itt még a számításnál feltételezett Coulomb-erő hat. A magon belül más természetű erők is hatnak, de azok ilyen távolságon még nem jelentősek. Rutherford ebből arra következtetett, hogy az atom magja  $10^{-12}$  cm-nél kisebb tartományra koncentrálódik. A legegyszerűbb elképzelés szerint a pozitív töltésű mag körül körpályákon mozognak az elektronok. Ezzel a modellel az a baj, hogy az elektrodinamika törvényei szerint a körpályán mozgó elektronnak

sugározni kell. Ha sugároz, akkor veszít az energiájából, és egyre kisebb sugarú pályára kerülve, végül a teljes energiáját elveszíti, és belezuhan a magba. A Rutherford-modell tehát nem stabil. A mindennapi tapasztalat ennek ellentmond, mert a környező anyagi világ, és benne mi is léteünk, atomjaink tehát nem omlanak össze.

A Rutherford-modell nehézségeinek kiküszöbölésére Niels Bohr 1913-ban a következő feltevésekkel módosította a modellt. 1) Az elektronok körpályákon mozognak a mag körül az atomban, de a klasszikus mechanika szerint lehetséges pályák közül csak olyanokon, amelyeken az elektronnak a magra vonatkoztatott impulzusnyomatéka a Planck-állandó  $2\pi$ -ed részének egész számú többszöröse. 2) Az így kiválasztott stacionárius pályákon keringő elektronok nem sugároznak. Sugárzás akkor lép fel, amikor az elektron egy magasabb energiájú pályáról alacsonyabb energiájúra ugrik. 3) A két állapot közötti átmenet során kibocsátott sugárzás rezgésszámát a két energia különbsége határozza meg az  $E_2 - E_1 = h\nu$  képlet szerint. E három feltételre alapozott kvantumelméletet nevezzük *Bohr-elméletnek*. A hidrogénatomra egyszerű számítással meghatározhatók a stacionárius állapotok energiaértékei, a megfelelő pályák sugarai, valamint a megengedett átmenetek során kibocsátott sugárzás frekvenciái. A hidrogénatom energiájára diszkrét értékek adódnak, amelyek kifejezése a nevezőben tartalmazza az 1. feltételben szereplő egész szám (kvantumszám) négyzetét. A 3. feltétel alapján számított frekvenciák a hidrogénatom vonalas színképeinek elméleti magyarázatát adják. A korábban empirikus úton megállapított Balmer- és egyéb sorozatok egy csapásra magyarázatot nyertek. A színképvonalak káoszában a Bohr-elmélet rendet teremtett. Ez volt az elmélet első szép sikere.

A hidrogénatomra vonatkozó számítás általánosítható olyan nehezebb elemekre, amelyeknél a külső pályán egyetlen elektron kering. A többi, belső pályákon keringve, leárnyékolja a mag vonzó hatását. Ezek a számítások a nehezebb elemeknél is kvalitatív módon adnak számot az energiaszintek diszkrét sorozatáról. A számszerű adatokban mutatkoznak kisebb pontatlanságok, amelyek a leárnyékolás közelítő jellegének rovására írhatók. Az atomok energiájának diszkrét voltát igazolta az 1913-ban *James Franck* és *Gustav Hertz* által elvégzett híres kísérlet. Ritkított gázzal megtöltött üvegcsőben gyorsított elektronokat ütköztettek atomokkal. Az atomokon szóródó elektronok csak akkor tudnak energiát átadni az atomoknak, ha energiájuk megegyezik két energiaszint különbségével. Ilyenkor a rugalmatlanul ütköző elektron elveszíti mozgási energiáját, és emiatt a kísérletben mért anódáram erőssége lecsökken. Az ütközéssel magasabb energiájú, gerjesztett állapotba került atom nem szívesen van ebben az állapotban, ezért foton kisugárzásával egyidejűleg alapállapotba kerül. A megfigyelt sugárzás frekvenciája megegyezik a Bohr-elméletből az  $E_2 - E_1 = h\nu$  képlet alapján számított frekvenciával.

A spektroszkópiai megfigyelések azt mutatják, hogy a színképvonalak több vékony vonalra hasadnak fel. Ezt a színképvonalak finomszerkezetének nevezzük. A Bohr-elmélet eredeti megfogalmazása erről nem ad számot. Az elméletet *Arnold Sommerfeld* általánosította ellipszispályákra, és figyelembe vette a relativisztikus mechanika törvényeit is. A Sommerfeld-féle általánosítás a korábbi egy kvantumszám helyett három egész számot tartalmaz, amelyek mindegyike megjelenik az energia kifejezésében. Az energiaszintek emiatt felhasadnak, és a színképvonalak finomszerkezetét eredményezik.

Az első Bohr-feltétel szerint az elektron impulzusnyomatéka nem vehet fel tetszőleges értékeket, hanem csak azokat, amiket e feltétel megenged. Mivel az impulzusnyomatékhoz mágneses nyomaték társul, következésképpen az atom mágneses nyomatéka is csak diszkrét értékekkel rendelkezhet, az is kvantált. Mivel ezek a mennyiségek vektorok, amelyeknek a nagyságukon kívül irányuk is van, ez azt jelenti, hogy a mágneses nyomaték külső mágneses térhez képest csak meghatározott irányokba állhat be, és nagyága is diszkrét értékeket vehet fel. Az atom mágneses nyomatékának kvantáltságát *Otto Stern* és *Walther Gerlach* 1922-ben kísérlettel igazolták. Ugyancsak a mágneses nyomaték kvantáltságával magyarázható meg a holland fizikusról, *Pieter Zeeman*-ról elnevezett effektus is. Eszerint az atom színképvonalai mágneses térben felhasadnak. Ez az effektus az atom mágneses nyomatékának a mágneses térrel való kölcsönhatásából származó energia kvantáltságának következménye. A Zeeman-effektus tanulmányozása fontos szerepet játszott a kvantumelmélet kialakulásában. A fiatal Heisenberg is ezzel kapcsolatos feladatot kapott tanáratól, Sommerfeldtől. Egy Zeeman-effektussal összefüggő színképet kellett megmagyaráznia a Bohr-elmélet alapján. Nagy meglepetésére csak úgy tudta a színképet értelmezni, ha feles kvantumszámokat tételezett fel. Az eredményt Sommerfeld nem fogadta el, mert ekkor még ismeretlen volt az elektron saját impulzusnyomatékának, a spinnek a fogalma, amelynek feles kvantumszáma van. (Pontosabban szólva, a spin értéke a Planck-állandó  $2\pi$ -ed részének fele.) A spint *Samuel Goudsmit* és *George Uhlenbeck* 1924 végén fedezték fel.

A Bohr-Sommerfeld-féle kvantumelmélet mintegy másfél évtizeden keresztül volt a fizikusok érdeklődésének középpontjában. Sok szép eredménye, és az újszerű gondolkodásra gyakorolt hatása ellenére nem volt tökéletes. Már a héliumot sem lehetett eredményesen tárgyalni vele, Sommerfeld és fiatal tanítványai minden próbálkozása sikertelen maradt. A hidrogénatomra vonatkozóan is csak a színképvonalak frekvenciáit adta meg jól, azok intenzitásait már nem. Mégis azt kell mondanunk, hogy a Bohr-elmélet abból a szempontból sikeres volt, hogy a klasszikus fizika fogalomvilágához képest teljesen új gondolkodást hozott a fizikába. Érdemes felfigyelni arra, hogy minden eredményében megjelenik a  $h$  hatáskvantum.

## A kvantummechanika

A különféle atomfizikai problémák Bohr-elmélettel való tárgyalása szinte minden esetben azt mutatta, hogy a megoldásban van valami helyes eredmény is, de sohasem adott teljesen pontos leírást és magyarázatot. Ez már jelezte, hogy a klasszikus fizika fogalomrendszerének radikálisabb megváltoztatása kell egy új mechanika megalkotásához. Az új, merész gondolatok elsősorban Bohrnál és a koppenhágai intézetben rövidebb-hosszabb időt eltöltő fiatal fizikusok körében jelentek meg a húszas évek elején. A merészre jellemző példaként megemlítem, hogy Bohr, *Kramers* és *Slater* a diszperzió tanulmányozása közben még az energiamegmaradás tételéről is hajlandók voltak lemondani az egyes atomi folyamatokban. Elképzelhetőnek tartották, hogy ez a fontos fizikai tétel ezekben az esetekben csak statisztikusan érvényes.

A diszperzió tanulmányozásába kapcsolódott be Heisenberg is, Bohrnál tett első rövidebb tanulmányútja során. Ő volt a legmerészebb a megszokott gondolkodástól való elszakadásban. Azt a filozófiát követte, hogy csak megfigyelhető mennyiségek szerepelhetnek az új elméletben. Az elektron pályája az atomban nem ilyen. Ebből eredően jött az a gondolata, hogy e helyett az elektron helykoordinátáinak és impulzuskomponenseinek Fourier-amplitúdóit kell a számításokban használni. Kitalálta azokat az algebrai szabályokat, amelyeket ezeknek az amplitúdóknak ki kell elégíteniük ahhoz, hogy a megfigyelésekkel egyező eredményt kapjon. Max Born és *Pascal Jordan* mutatták meg, hogy ezek az amplitúdók mátrixok, és a nem-kommutatív algebra szabályai szerint kell őket összeszorozni. Heisenberg a dolgozatot 1925 júliusában közölte. Először Einstein nem hitt benne, Bohr is kételkedett, amíg Pauli e mátrixok segítségével ki nem számolta a hidrogénatom energia-sajátértékeit.

Fél évvel később *Ervin Schrödinger* osztrák elméleti fizikus a *Louis de Broglie* által 1924-ben bevezetett anyaghullám-fogalmat felhasználva, levezetett egy differenciálegyenletet, amelynek reguláris megoldásai az energia-sajátértékeket adják meg. A hidrogénatomra alkalmazva ezek megegyeznek a Bohr-elméletből kapott értékekkel, valamint a Heisenberg mátrixmechanikájából adódókkal is. A Schrödinger-egyenlet azonban nemcsak az energia-sajátértékeket adja meg, hanem az illető sajátállapotot jellemző sajátfüggvényt is, ami egyúttal az impulzusnyomaték és a mágneses nyomaték sajátfüggvénye is, tehát a Bohr-elméletnél gazdagabb információt tartalmaz. Schrödinger azt is megmutatta, hogy az ő differenciálegyenletét használó tárgyalásmód egyenértékű a Heisenberg-féle mátrixmechanikával. Majd később *Paul Dirac* angol fizikus munkásságából kiderül: a két tárgyalásmód abban különbözik egymástól, hogy a fizikai mennyiségekhez rendelt operátorokat egyik esetben mátrixokkal, a másikban a differenciálhányados-képzés műveletével jelenítjük meg. Szakmai kifejezést használva, azt mondjuk, hogy az operátorok reprezentációi mátrixok, illetve differenciáloperátorok. (Operátor alatt

műveletutasítást értünk. Például az operátor szimbóluma után álló függvényt meg kell szorozni egy számmal, vagy venni kell annak a differenciálhányadosát.) A kvantumelmélet e két változatát egyaránt használjuk, és az irodalom közös néven *kvantummechanikának* nevezi. Mivel a fizikában a differenciálszámítás Newton óta matematikai eszköze az elméletnek, ezért az atom- és molekulafizikai alkalmazásokban a Schrödinger-féle tárgyalásmód az elterjedtebb. Az oktatásban is általában ezt használjuk. A kvantumelméletnek fizikai erőterekre, mint például az elektromágneses térre történt alkalmazásaiban a Heisenberg-féle tárgyalás is ugyanúgy használatos.

A kvantummechanikában egy fizikai rendszer, például valamilyen atom vagy molekula fizikai állapotát egy függvénnyel, az *állapotfüggvénnyel* jellemezzük. E függvény változását a Schrödinger-egyenlet írja le ugyanolyan determinisztikus módon, mint például a Maxwell-egyenletek az elektromágneses tér állapotát leírják. Ha a kezdeti állapotot ismerjük – mondjuk valamilyen méréssel meghatároztuk –, akkor az egyenlet megoldásával az állapotot bármely későbbi időpontra kiszámíthatjuk. A kvantummechanikai állapotfüggvénynek azonban nincs olyan közvetlen fizikai jelentése, mint például az elektromos vagy mágneses térerősségeknek az elektromosságban. Ennek ismeretében a fizikai rendszert jellemző mennyiségek valószínűségei határozhatók csak meg, nem pedig tényleges értékük. Az állapotfüggvény valamilyen fizikai mennyiség méréssel meghatározható sajátértékeinek egy-egy állandóval súlyozott szuperpozícióját adja meg. A mérőeszköznek a mérendő tárggyal való kölcsönhatása viszi be az állapotot valamilyik sajátállapotba. Hogy melyikbe, annak csak a valószínűsége adható meg az elmélet alapján. Ezért nevezzük a kvantummechanikát statisztikus elméletnek. Az állapotfüggvény statisztikus értelmezése Max Born-tól származik.

Az elmélet egyik nagyon nevezetes eredménye az ugyancsak Heisenberg-től származó *határozatlansági összefüggések* felfedezése. Eszerint bizonyos fizikai mennyiség-párok, mint például az elektron helye és impulzusa az atomban, nem határozhatók meg egyidejűleg tetszőleges pontossággal. Ha az egyiket nagyon pontosan megmértem, akkor a pár másik tagját már nagyon pontatlanul ismerem csak. Ebből következik, hogy a kvantummechanika szerint az atomban az elektron pályája nem értelmezhető, mert az helyének és sebességének vagy impulzusának egyidejű pontos megadását követeli meg a pályafogalom newtoni meghatározása szerint. Hasonló határozatlansági összefüggés van az atom bármelyik állapotának átlagos élettartama és az ahhoz tartozó energia között is. Ennek következménye, hogy az átmenetek közben kisugárzott színeképvonalak nem tökéletesen élesek. Azt mondjuk, hogy van természetes szélességük.

Már említettem, hogy Einstein nem tudta elfogadni a kvantummechanika statisztikus értelmezését. Ugyanezt mondhatom Schrödingerről és Planckról is. Az igazsághoz hozzátartozik, hogy az elmélet értel-

mezését illetően ma is vannak olyan tudományos közlemények, amelyek vitatják az állapotfüggvény valószínűségi jelentését. Ezek a szerzők úgy vélik, hogy vannak a rendszert jellemző paraméterek, amelyek rejtve maradnak előlünk, ezért kényszerülünk a kvantummechanikában csak valószínűségi jóslatokra. Az értelmezés körüli nézetkülönbségek azonban nem rontják le a kvantummechanika nagyszerű voltát. Az atom- és molekulafizika eredményeivel, valamint a természettudományok más területein érvényesülő alkalmazásaival a kvantummechanika olyan tudományos haladást ért el, amelyre kevés más elmélet volt képes. A sok példa közül itt most csak kettőt említek meg. Az egyik legelső, igen hatásos alkalmazás a kémiai kötés elméleti magyarázata. Ezzel a kémia tulajdonképpen a kvantumfizika egy fejezetévé vált. A másik még ennél is hatásosabb példa a félvezetők tulajdonságainak felismerése, a tranzisztor felfedezése, valamint az ezzel elindult óriási elektronikai fejlődés a mikroelektronikától a számítógépeken keresztül a mobiltelefonig. Ezek a műszaki alkotások nemcsak a munkát tették könnyebbé, de az emberek életkörülményeit, szórakozási szokásait is nagy mértékben megváltoztatták. Lehetne még sorolni a példákat az orvostudomány vagy a biológia területéről is, de azt hiszem ez is elég annak érzékeltetésére, hogy a kvantummechanika milyen nagy hatást fejtett ki a tudományos haladásra.

## A Dirac-egyenlet és a pozitron

Mindezek mellett, amit az elmélet nagyszerűségéről, szinte csodálatos voltáról szoltam, azt is meg kell említeni, hogy a fizikusoknak egy igaz elmélettel szemben támasztott igényét teljesen nem elégíti ki. Ugyanis a huszadik század másik igen jelentős fizikai elmélete, a relativitáselmélet, az igaz törvényekkel szemben egy követelményt állít fel. Nevezetesen, azoknak olyan alakúaknak kell lenniük, hogy ne változzanak, amikor egyik vonatkoztatási rendszerről egy másikra térünk át. Pontosabban fogalmazva, az egymáshoz képest egyenes vonalú, egyenletesen mozgó vonatkoztatási rendszerek egyenértékűek a fizikai jelenségek leírása szempontjából. Az elméletben ez úgy jelenik meg, hogy az igaz természettörvények változatlanok azzal a transzformációval szemben, amelyik az egyik inerciarendszerről egy másikra történő áttérést írja le. (Ez a Lorentz-transzformáció.) A kvantummechanika alapegyenletei nem ilyenek. Következésképpen finomításra szorulnak. Már Schrödinger is megpróbálkozott ezzel a feladattal, de nem járt sikerrel. A kvantummechanikának a relativitáselmélettel való összhangba hozása Paul Dirac érdeme. 1928 első hónapjaiban publikálta az elektron relativisztikus hullámegyenletét, ami a kvantummechanika relativisztikus általánosítása. Ezt az egyenletet a fizikai szakirodalom megalkotója iránti tiszteletből Dirac-egyenletnek nevezi. Ez az egyenlet, azon túlmenően, hogy teljesíti az említett szimmetriakövetelményt, még az

zsal a nem várt meglepetéssel is szolgált, hogy belőle automatikusan kiadódik az elektron saját impulzusnyomatéka, a spin, és vele együtt a saját mágneses nyomatéka is. A nem-relativisztikus Schrödinger-egyenletben ezek nincsenek benne. Ezeket ott Wolfgang Pauli vette figyelembe, és ennek megfelelően általánosította a Schrödinger-egyenletet. Az atom- és molekulafizikai alkalmazásokban a relativisztikus szimmetria hiánya nem okoz problémát, mert ott az elektronok a vákuumbeli fénysebességhez képest kis sebességgel mozognak, és így a relativisztikus korrekciók nem olyan jelentősek. De a Dirac-egyenletnek a hidrogénatomra vonatkozó megoldása számot ad a színképvonalak finomszerkezetéről, ami a Schrödinger-egyenletből nem következik. A részecskefizikában, ahol általában nagy sebességű részecskék mozgásáról van szó, természetesen a Dirac-egyenletet kell használni.

Dirac nevéhez fűződik még egy nagy jelentőségű felfedezés. Tisztán matematikai megfontolással rájött arra, hogy léteznie kell az elektron egy olyan párjának, amelynek tömege megegyezik az elektronéval, a töltésének a nagysága is, de ellentétes előjelű, vagyis pozitív. Ezt antielektronnak nevezték el. Néhány évvel később (1931-ben) *Anderson* ezt a részecskét kozmikus sugárzásban kísérletileg felfedezte, és pozitronnak nevezte el. Az elméletből az is következik, hogy nemcsak az elektronnak van párja, hanem minden olyan elemi részecskének, amelyiknek a spinje a Planck-állandó  $2\pi$ -ed részének a fele. Ezeket hívjuk fermionoknak. Későbbi kísérletekben ezeket az antirészecskéket is kimutatták. Sőt, azt mondhatjuk, hogy az utóbbi egy-két évtized részecskefizikai kutatásainak az antirészecék mindennapos résztvevői.

A kvantummechanika elveinek és módszereinek fizikai erőterekre történő kiterjesztése hozta létre a kvantumtérelméletet, amely ma a részecskefizika leghatásosabb fizikai elmélete. Ez természetes folytatása a kvantumhipotézissel és a fény korpuszkuláris elméletével indult huszadik századi fizika egyik fő vonulatának. A másik fizikai elmélet, amely szintén meghatározó szerepet játszott, és ma is azt játszik a huszonegyedik század fizikájában, a relativitáselmélet. Ennek kialakulása is a múlt század első két évtizedére esik.



A huszadik század első három évtizedét tekintetem át, rámutatva azokra a nagyszerű eredményekre, amelyek a Planck-féle kvantumhipotézissel elindult újszerű fizikai gondolkodás hatására születtek. Egy korábbi, hasonló alkalomból megjelent írásomban azt írtam, hogy Planck ajtót nyitott a kvantumok világára. A vele elindult fejlődés valóságos diadalmenete lett a huszadik század fizikájának. Közben sok-sok ajtót kellett megnyitni. Ezekhez a hatáskvantum kulcsként szolgált, hisz' minden alapvető képletben szerepel. Ott van a Bohr-elméletben, a kvantummechanikai axiómákként megjelenő Heisenberg-féle felcserélési törvényekben, és az állapotfüggvény változását meghatározó dinamikai egyenletben, ami a kvantummechanika mozgástörvényének tekintendő.