Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

HATÁROZOTTSÁG A HATÁROZATLANSÁGBAN

MIÉRT TANULJUNK KVANTUMMECHANIKÁT FIZIKATANÁR-SZAKOS HALLGATÓKÉNT?

Készítette:

Tóth Kristóf

Fizika-matematika osztatlan tanárszak

V. évfolyam

Témavezetők:

Tél Tamás

Egyetemi tanár

Elméleti Fizikai Tanszék

Vincze Miklós

Tudományos főmunkatárs

MTA-ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

Budapest, 2018.

KIVONAT

A fizika és fizikaoktatás célja a minket körülvevő természeti jelenségek megértése, melyhez az egyik legfontosabb „kellékünk” az emberi léptékű jelenségeken edződött intuíciónk. A kvantummechanika azonban egyike azon területeknek, melyek kapcsán nem rendelkezhetünk közvetlen tapasztalatokkal. A dolgozat személyes beszámoló, mely rávilágít, hogy egyetemistaként, illetve kezdő tanárjelöltként milyen hatást gyakorolt a szerzőre a kvantummechanika megismerése.

Az atomi méretek alapvető folyamatai érzékszerveink számára nem hozzáférhetők, így például a makroszkopikus testek soha nem mutatnak hullám-részecske kettősséget. Hasonlóan rejtve marad előttünk a természeti törvények valódi, valószínűségi természete is: azonos körülmények között elvégzett kísérletek különböző eredményeket adhatnak, melyek eloszlása azonban megjósolható. A közoktatásban ez a témakör leginkább a határozatlansági reláció érintőleges említésekor jelenik meg, melynek – és az egész területnek – helyes, szemléletes tanításához egyetemen tanult ismereteink jelentősen hozzásegíthetnek.

A dolgozatban különböző példákon mutatom be, hogy a Schrödinger-egyenlet megoldásának alapszabályai bárki számára érthetően, kvalitatív módon elsajátíthatóak. Fontos és reményt keltő személyes tapasztalatom, hogy mégoly szokatlan természeti törvények megértését is nagyban segíti az ellentmondásmentes, jól követhető matematikai leírás.

A kvantumos alapjelenségekben való elmélyülés segít világunk jobb megértésében és a matematikai és fizikai gondolkozás közötti különbségek felismerésében is. Mégis, a kvantummechanika-tanulás talán legfontosabb pedagógiai hatása, hogy egyedülálló módon demonstrálja a természettudományos megközelítés erejét, hiszen olyan jelenségekre ad helyes magyarázatot, melyek (akár felületes) megértése a hétköznapi „józan ész” számára teljességgel lehetetlen volna.

„Részecske vagyok, vagy hullám,
Élek-e vagy ez a hullám?
Megmondanám, hogyha tudnám,
De mindent én sem tudhatok."[1]

TARTALOMJEGYZÉK

[1] Fizikus induló (Dávid Gyula): Diákdal az ELTE Természettudományi Karáról

1. BEVEZETÉS

Dolgozatom témája, hogy miért érdemes kvantummechanikát tanulni, illetve hogyan tehetjük érdekessé tanulását fizika tanárszakos hallgatóknak. A téma megírását az ösztönözte, hogy népszerűtlen a képzés ideje alatt az elméleti fizika, kiemelkedően a kvantummechanika.

Az érv a fenti gondolat mögött az, hogy leendő tanárként ilyen mély fizikai ismeretek átadására nem lesz szükség, és egy nehéz, sok időt felölelő tárgyba munkát befektetni pazarlás, hiszen rengeteg más, hasznos ismerettel gyarapíthatnánk tudásunkat. Ezzel, a hallgatóság körében túlságosan népszerű gondolattal nem értek egyet, dolgozatomban különböző szempontokat és példákat gyűjtök össze a saját tanulmányaimból, amelyek ösztönöztek engem és reményeim szerint a leendő tanárokat is a kisméretű objektumok fizikájának magasabb szintű művelésére. Átfogó képet adok arról, hogy miként kedveltem meg a kvantummechanikát, és milyen ok folytán keltette fel az érdeklődésemet.

A fizika tudománya iránt bőven átlag feletti érdeklődést mutató fizikatanár hallgatók egy részének körében a kvantumfizika tehát népszerűtlen, így témaválasztásomat ezen oknak a megértése indokolta, ezzel is segítve a középiskolás tanári munkánkat. Ötletet meríthetünk, hogy egyes középiskolás diáktípusoknak miként tehetjük izgalmassá e szempontok alapján tanulmányaikat, hiszen köztudott, hogy a kémia után a legnépszerűtlenebb tantárgyról van szó a diákok körében.

Az ember azt gondolná, hogy a klasszikus fizika „unalmas” fejezetei után a kvantummechanika tanulása a kíváncsiság és tudniakarás fellegvára. Hiszen rengeteg titok és eredmény fellelhető a modern fizika különböző fejezeteiből ismeretterjesztő szinten, melyek bárki számára elérhetőek magazinokból, hírlapokból, dokumentumfilmekből. Ilyen körülmények között pedig azt várnánk, hogy az embereket nem a klasszikus fizika köti le, hanem éppen a modern fizika tárgykörébe tartozó kvantummechanika. Arra, hogy nem ez a helyzet az az indok, hogy a „poénok” a mai tudományos ismeretterjesztő média megértés illúzióját keltő elnagyolt módján már „le vannak lőve”. Túl sok sokkoló, új információval nem fog szolgálni a tárgy, és így sokkal nehezebb elsajátítani. Érdemes azonban elfogadnunk, hogy igazi megértés csak tudományos szakirodalmak által lehetséges. Jóval nagyobb absztrakciót, matematikai készséget és fizikai tudást igényel egy ilyen tárgy elvégzése, mint ahogy az ismeretterjesztés sugallja[2].[3]

[2] (Károlyházi 2007)

Akkor mégis, hogyan lehetne erőt meríteni heteken, hónapokon át, hogy becsületes munkával elvégezzük a tárgyat? Mert, ha csak azt tartjuk szem előtt, hogy ez a diplománk egy szükséges feltétele, akkor tényleg keveset fog érni, hiszen a lényegi tudás akkor marad meg, ha minket egyéb célok is vezérelnek, nem csak az elégséges jegy megszerzése.

Gondoljunk csak Ottlik Gézára, aki matematika-fizika szakos tanárként a regényírásban és fordításban találta meg a jövőjét, mégis olyan komoly fizikai utalásokat tartalmaznak művei, amelyeknél nyíltan feltételezhetjük, hogy Ottlik érdeklődését maximálisan felkeltette, és tanulmányai során nem a diploma, hanem a tudásvágy és kíváncsiság hajtotta. Olyan, tanulmányi ideje alatt felfedezett jelenségeket említ meg műveiben, melynek idejében azok még nem voltak a tananyag részei. Így levonhatjuk a következtetést, hogy érdeklődésük nem csupán a kötelező kurzusok kínálatával, hanem a jelenükben megjelenő szaklapok olvasásával is bővült.[4]

Úgy gondolom, ahhoz, hogy az író szintjére emelkedjünk érdeklődés terén, hogy majd a diploma megszerzése után több évvel is kvantummechanika témájából kapcsolódóan beszéljünk örömtelien, a kezdeti lelkesedés jócskán nem elég. Viszont mi más lehetne a cél tanárként, mint egy életen át tartó önképzés, érdeklődés az új és korábban számunkra nem ismert jelenségek kutatásával, tanulmányozásával?

Simonyi Károlynak *A fizika kultúrtörténete* című kulcsfontosságú könyvében a következőket olvashatjuk:

„a fizika egy lélektelen, hideg, objektív világot ad az esetleg vigaszt keresőknek. Válasz: ez igaz. De a fizika világa egyúttal csodálatos szépségeket és harmóniákat is rejt magában.”[5]

De akkor mi teheti ezt széppé? Mik ezek a csodálatos szépségek és harmóniák, melyeket említ a fizikus?

Válaszom: a Grand Canyon-t mi teszi széppé? Miért vágyunk arra, hogy saját szemeinkkel is meggyőződjünk egy természeti csoda látványáról? Hiszen az internet segítségével,

---

[3] Károlyházi Frigyes – Az öcskös felesége című cikkében levő gondolataival hasonlóságot véltem felfedezni. Károlyházi Frigyes ezeket az érveket arra hozza, hogy milyen nehéz feladat fizikatanárként a modern fizikai csodák mellett a klasszikus fizika „unalmas” fejezeteit izgalmasan tanítani középiskolás diákjainknak. Úgy gondolom, a modern fizika fejezeteinek oktatása is nehéz egyetemi hallgatóknak, hiszen ezek a csodák legtöbbünk számára már ismertek és mély elsajátításuk sok energiát igényel.

[4] (Borszuk 2018)

[5] (Simonyi 2011:567)

bármelyik képkereső honlapon találhatunk több száz és ezer fényképet a tájról, a jelenségekről, megkérdezhetjük barátainkat, hogy mégis milyen volt. Ugyanígy izgalmas felfedezés lehet egy elmélet helyességét igazolni deduktív úton egy alapegyenletből, vagy feladatmegoldásunk határeseteként visszakapni a klasszikus fizika már jól ismert tényeit.

Válaszolhatnánk erre azt, hogy jó, de a kvantummechanika az nehezebb és több erőfeszítést igényel. Na de a Grand Canyon? Hisz azért is hónapokat dolgozunk napi 8-12 órában, hogy előteremtsük a meglátogatásához szükséges anyagiakat. Nem is szólva arról, hogy mennyi időt utazunk egy kényelmetlen repülőgép ülésében, majd mikor leszállunk a gépről, derekunkat fájlaljuk csak azért, hogy szembesüljünk a ténnyel: lenyűgöző a természet.

A 20. században lezajlott fejlődés az atomfogalomról lenyűgöző. Tudománytörténeti elemzés nélkül látható, miért is olyan izgalmas az, hogy a kezdeti Thomson-féle atommodell gondolatának, miszerint egy pozitív háttértöltésben vannak a negatív töltések, eljutunk oda, hogy egy negatív háttértöltésben vannak pozitív töltések[6]. Hiszen szavak szintjén nincs nagy különbség, szinte csak az előjelek változtak meg, de rengeteg ember kemény munkájának szépsége és filozófiai, illetve tudományreformáló gondolat rejlik mögötte. Továbbá érdemes kiemelni, hogy a végső kép az atomról, melyet itt tanulunk, az már nem csupán modell, hanem természeti törvény.

Miért ne éppen a kvantummechanika tárgyalásánál tennénk fel bizonyos kérdéseket, mikor annyi minden oly bizonytalan és felfoghatatlan, hogy már abban sem leszünk biztosak, amit eddig értettünk a világról. Korábbi fogalmaink, melyeket a klasszikus fizikában használtunk, e területen értelmüket vesztik. Nem véletlen volt fontos időszak ez a tudomány történetében, hiszen nem csak új fizikai jelenségeket ismertünk meg, hanem a tudományos gondolkozás is megreformálódott.

Dolgozatom következő, *2. fejezetében* a klasszikus fizikai szemléletünket elsőként megkérdőjelező, újszerű hozzáállást igénylő hullám-részecske kettőségről írok. Ezen jelenségkör megértése után a *3. fejezetben* a kvantummechanika alapegyenletének mély jelentését, és keletkezésének izgalmas történetét veszem szemügyre, melyek megismerése megmutatja a természeti törvények felfedezésének izgalmait. Az így megszerzett ismereteinkkel a *4. fejezetben* megmutatom, hogyan lehet a mégoly nehéz kvantummechanikában is egyszerű számításokkal komoly fizikai tényeket megfogalmazni. Ezen kvalitatív elemzést folytatva az *5. fejezetben* a természet egyik különös csodájáról, az alagúteffektusról értekezem, mely a min-

[6] Orosz László egyetemi docens MSc villamosmérnököknek szánt, Kvantummechanika előadássorozatában elhangzó humoros példa, miszerint milyen hosszú utat jártunk be egy ilyen „pici" változtatásért.

ket körülvevő modern, technikai világ egyik alapját képezi. Ezeket felhasználva a *6. fejezetben* tárgyalom, hogyan alkalmazhatjuk tudásunkat a kémia megértéséhez, melynek leírásához kizárólag kvantummechanikai ismereteink adnak lehetőséget. Az ezt követő *7. fejezetben* a kvantummechanikai kurzusok alapvető feladatát, a potenciáldobozban mozgó részecske kérdését oldom meg, melynek megoldása során olyan a fizikatanárok számára fontos gondolatokat rögzítek, melyek kiemelése segítheti leendő fizikatanári munkánkat. A *8. fejezet* a határozatlansági reláció helyes értelmezését írja le, s megemlít egy olyan – az előző fejezettel konzisztens – KöMaL versenyfeladatot, melynek hivatalos megoldásának megértéséhez a kvantummechanika során felszedett szaktudás elengedhetetlen. Végül, dolgozatomat a *9. fejezetben* személyes, tanulmányaim során ért élményeimmel zárom. Azonban, sarkallom az olvasót arra, hogy vegye szemügyre a függelék (*11. fejezet*) tartalmát is, melyben elsőként leírom, hogy a kvantummechanikának milyen fontos üzenetei vannak a közoktatásban, majd egy tanulságos, egyetemi gyakorlaton megismert feladatot veszek szemügyre. Zárásként a természettudományok filozófiai hátterét és a szakpáromhoz kötődő matematika és fizika kapcsolatát elemzem, mely gondolatokat a kvantummechanika ébresztett fel bennem.

„A tudományos gondolkodás végérvényesen kinőtte az idegrendszer ösztönös tudását.”[7] *(Károlyházy Frigyes)*

2. A HULLÁM-RÉSZECSKE KETTŐSÉG

Mint ismeretes, a fény interferenciajelenségei annak hullámtermészetét, míg a fotoeffektus és Compton-effektus a fény részecskejellegét hangsúlyozza, azaz a tapasztalat szerint a fény egyszerre rendelkezik e két tulajdonsággal. Ez a kvantumfizika első évtizedeivel összefonódó problémakör volt. A kérdés ellentmondását az adta, hogy időnként a részecsketulajdonság, időnként a hullámtermészet tűnik lényegesebbnek. De Broglie újdonsült ötlete erre a problémára kereste a megoldást, miszerint a részecskére vonatkozóan túlságosan egyoldalú a szemléletünk ahhoz, hogy a mikrofizikai jelenségeket megmagyarázzuk, ezért tételezzük fel az elektronokra és atomokra is a hullámtulajdonságot, s e két különböző megjelenési formát engedélyezzük egyszerre, ne egymás kizárására, a fény mintájára. A fény hullámtermészeténél fogva adott volt a hullámhossz, s az impulzus meghatározása volt a kérdéses, melyet így kaphatunk meg:

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{2.1}$$

Vajon tudunk a szabad részecskékhez hullámhosszt rendelni? Ezen minta alapján adta meg de Broglie 1924-ben a részecske $p = mv$ impulzusából a hullámhosszát:

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{2.2}$$

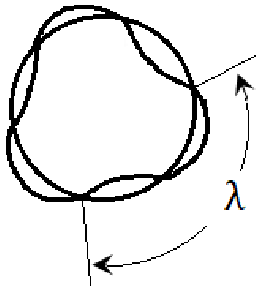
A fizika egyik legmeglepőbb állítása, hogy a tömeggel rendelkező mikrorészecskékhez hozzárendelhető egy hullámhossz is. De Broglie megállapításainak egyik eredménye a Bohr-féle pályakiválasztási szabály egyszerű értelmezése lett,[8] mely szerint a hullámhossz egész számszorosának rá kell férnie a klasszikus körpálya kerületére, vagyis $2r\pi = n\lambda$[9] (lásd *2.1 ábra*).

---

[7] (Károlyházi 2007:369)

[8] (Simonyi 2011:459)

[9] A kvantummechanika fejlődésében Bohr teóriája egy hasznos, szemléletes kép volt, azonban az igazi kvantummechanika megmutatta, hogy naiv elképzelés, az atomról alkotott képünk azóta más.

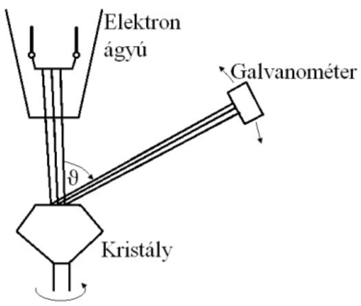


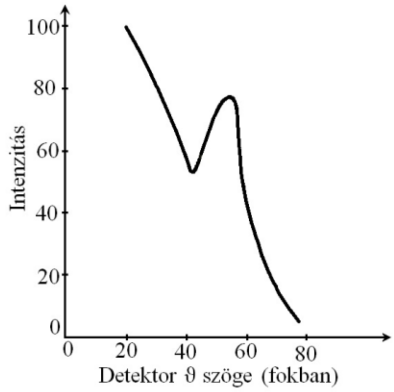
2.1 ábra: Az anyaghullámok fogalma lehetővé teszi a Bohr-féle kvantumfeltétel szemléletes jelentését: a hullámhossz egész számszorosa ráfér a körpálya kerületére.

Viszont ezek az újszerű gondolatok érzékszervi tapasztalatainknak erősen ellentmondanak. Erre a dolgozatom mottója, a fizikusinduló is rámutat. Ezért nekünk, természettudományokat művelő személyeknek le kell vetnünk a belénk ivódott hétköznapi szemléletet. De miért is ne lenne így ez a kettőség? Hajlamosak vagyunk rá, hogy csak a szilárd, anyagi dolgokat tekintsük valóságosnak. A vákuumban terjedő elektromágneses hullámok pedig nem tűnnek létező dolognak. Nem véletlenül vélték a régi gondolkodók, hogy a hullám minden esetben valamiféle közegben terjed, jelen példában az éterben. De a valóságos anyag csak azért megnyugtató számunkra, mert érzékszervi tapasztalataink ezt sugallják, evolúciós szempontból ez jelenti az emberiség fennmaradásához szükséges agyi működést, ahol az anyag fogalma hasznosnak bizonyult. Azonban egy örvény éppen annyira valóságos, mint egy kő. A Kiskunsági Nemzeti Parkban, Fülöpházán van egy sivatagi vidéket megidéző Homokhátság. Az itt található homokdűnék alakjukat megőrizve évente pár métert vándorolnak. A szél a homokszemcséket úgy hordja ugyanis, hogy a domb alakját megőrzi, így azt láthatjuk, hogy az egész objektum együttesen vándorol, szép lassan. A mi szervezetünk is ehhez hasonló. Ha valamely kulcsfontosságú szervünk működése leáll, akkor számunkra az az élet végét jelenti. Megannyi apró dolog pontos működése teszi lehetővé számunkra a létezést. Hasonlóan a vándorló homokhoz, melynek sok homokszemcséje együttesen képes valamit létrehozni. Ilyen értelemben minket is lehet hullámcsomagnak tekinteni. A részecskék esetén is ismételt méréseket végzünk, hogy ez a hullámtulajdonság érzékelhető legyen (*2.4 ábra*) a homokhoz hasonlóan, ahol egyetlen homokszemet vizsgálva nem szűrhetünk le minden tapasztalatot.

De Broglie hipotetikus gondolatait már 1926-ban Davisson és Germer kísérletileg is igazolták az elektron hullámhosszának mérésével. A kísérletben elektronokkal bombáztak egy nikkelkristály felületet. Az ötlet nem volt újszerű, hasonló ahhoz, ahogy a röntgensugarak hullámtulajdonságának megállapításánál Bragg eljárt.

A kísérletben elektronágyúból származó felgyorsított elektronnyalábot bocsájtottak merőlegesen egy kristályfelületre, s a különböző szög alatt visszaszóródó elektronoktól származó áramot galvanométerrel vizsgálták. Azt kapták, hogy a szórt nyalábok egymást erősíthetik, interferálnak, bizonyos U feszültség és ϑ szög értéknél az áramnak maximuma van, melyet a *2.2 ábra* szemléltet.





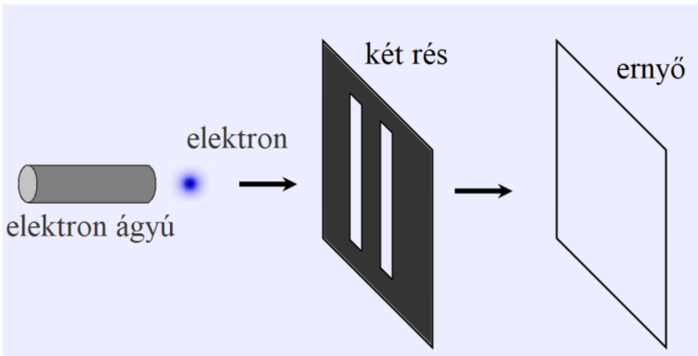
2.2 ábra: De Broglie hipotézisének kísérleti igazolása a Davisson-Germer-kísérletben, ahol az ismert sebességű elektronok a nikkelkristály felületi síkjairól visszaverődve áthaladva diffrakciót szenvednek, mivel a hipotézis által feltételezett hullámhosszuk összemérhető a rácssíkok közötti távolsággal. A galvanométert úgy helyezték el, hogy a ϑ szög változtatható legyen. A jobboldali képen látható, hogy az intenzitás görbe bizonyos szögnél maximumot mutat. (Saját készítésű ábra.)

A kísérleti eredmény és elméleti jóslat összevetéséből ez a két hullámhossz érték adódott:

$$\lambda_{\text{mért}} = 1{,}65\ \text{Å} \qquad \lambda_{\text{várt}} = 1{,}67\text{Å} \tag{2.3}$$

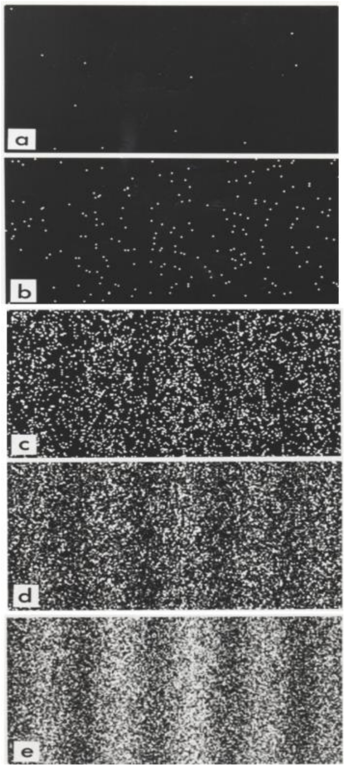
Tehát elég jó pontossággal (1%-os hiba) igazolta a kísérlet az elméleti jóslatot az elektron hullámhosszáról.

A 60-as években még meggyőzőbb bizonyítékot találtak a hullámfüggvény létezésére, mely az ún. kétréses-kísérlet névre hallgat. Egyetlen elektront egy két rést tartalmazó akadályon lőttek át (*2.3 ábra*), amelyet sokszor megismételtek.



2.3 ábra: A kétréses-kísérlet vázlatos rajza. (Saját készítésű ábra.)

A réseken áthaladó elektronok az akadály mögött elhelyezett ernyőn felvillanásokat okoztak. A *2.4 ábra* az ernyőn megjelenő képeket mutatja. Kis számú kísérlet elvégzésénél véletlenszerűen elhelyezkedő fehér pontokat látunk. Azonban, ahogy nő az események száma, úgy jelenik meg a megtalálási valószínűségben a hullámok interferenciájára jellemző csíkos szerkezet. Ez a kísérlet világosan mutatja, hogy a valószínűségeloszlás nem egyedi részecskék jellemzője, hanem nagyszámú, azonos körülmények között elvégzett kísérlet lehetséges kimenetelét írja le.



2.4 ábra: A kétréses-kísérlet eredménye. Az elektronok száma a különböző képeken:

a	11
b	200
c	6000
d	40000
e	140000

Megfigyelhető, hogy a hullámtulajdonság csak nagy számú kísérlet után észlelhető, kevés elektron esetében a kísérlet részecske-tulajdonságot mutat. A felvételek egy a 80-as években fejlett elektronikával elvégzett kísérlet eredményét mutatják. [10]

Ezeket a meglepő tényeket középiskolás diákjainknak is elmodhatjuk, hiszen a tananyag részét képezi de Broglie gondolata.

Úgy vélem, a kísérletek megismerése fontos szempont, ugyanis egy nehezen elképzelhető fizikai tulajdonságot a kísérlet tisztán és érthetően mutat be. Ha csak a kvantummechanika tényeit közöljük egy érdeklődő személynek, az sokszor kétségeket ébreszthet érthetőségének nehézkes mivolta miatt. Viszont megannyi ilyen állításhoz egyszerű és egyértelmű kísérleti bizonyítékok társulnak, melyek tisztán rávilágítanak az állítás tényszerűségére. Így, habár a hullám-részecske kettőség fogalmi megértése nehéz, ki az, aki ilyen letisztult kísérleti eredményeknek ellent merne mondani? Nem véletlenül kapott de Broglie ezért az újszerű gondo-

[10] (A. Tonomura 1989)

latért Nobel-díjat. Véleményem szerint nem csak a természettudományos, hanem a fizika módszertani állítások kizárólagos kritériuma is a kísérlet, ezek nélkül minden csak egy meseszerű elvont gondolati hálónak tűnhet.

S habár Feynman jól ismert gondolata szerint a kvantummechanikát senki sem érti, de én úgy gondolom, hogy a kísérleti eredmények bárki számára világosan rámutatnak annak érvényességére. De mit is jelent a megértés? Feynman gondolata megtévesztő lehet, ugyanis a kvantummechanika meg nem értése nem azt jelenti, hogy egyenleteinket, matematikai számításainkat ne tudnánk elvégezni. A kvantummechanika leírásmódja helyes, számítások érvényességéről a megannyi kísérleti eredmény és technológiai vívmány tanúskodik. Csupán arról szól ez a gondolat, hogy a klasszikus fizikára „huzalozott” agyunk ezeket a jelenségeket nem tudja ösztönszerűen értelmezni, ahogy a fejezet elején levő idézetben Károlyházy Frigyes is megfogalmazta. Ezért is fontos, hogy a kísérletekkel és matematikai számításokkal is megismerkedjünk.

3. A KVANTUMMECHANIKA ALAPEGYENLETE

További szépségeket rejt a kvantummechanika alapegyenlete, a Schrödinger-egyenletet. De mi minden juthat eszünkbe erről, a nem szemléletes természeti törvényről? Az egyenlet alakja egy dimenzióban a következő:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.1}$$

ahol $\hbar$ a Planck-állandó, m a részecske tömege, ψ a hullámfüggvény, E a részecske energiája, V(x) pedig a kölcsönhatást jellemző potenciál. A mikrovilágban nincs súrlódás, minden erő konzervatív, de itt nem az erő jelenik meg, hanem a vele kapcsolatos helyzeti energia. Az erő fogalmára a kvantummechanikában nincsen szükség.

Az egyenlet további érdekessége, hogy több ismeretlent is tartalmaz: a hullámfüggvényt és az energiát. S habár elsőre azt gondolhatjuk, hogy ez ennek következtében nem megoldható, az egyenlet fizikai mivolta miatt szükségképpen rendelkezik olyan matematikai tulajdonságokkal, melyek segítségével egyértelmű megoldásokat találhatunk. Ilyen a folytonosság, a végesség és egyértékűség.

Később, a 4. *fejezetben* arra is rájövünk, hogy ennek az ún. sajátértékegyenletnek kvalitatív, nagyon egyszerű meggondolásokkal vett tárgyalásából kiderül, hogy csak bizonyos hullámfüggvény és energia párok lehetnek helyesek.

Az egyenlet megalkotásának módja is különös. Ezt, mint minden alaptörvényt, az emberiség nem megalkotja, hanem felismeri. A valóság egyféle, a matematikával ellentétben, ahol én választom meg az axiómákat, azonban itt nincs szabadságunk.

Fontos felismerni, hogy milyen kivételes tehetségnek kellett lennie Schrödingernek, hogy e matematikát a világ mögé tegye. De hogyan is fogalmazódott meg az akkori fiatalemberben a kvantummechanika egyenlettel történő leírásnak az ötlete? Schrödinger ekkoriban a Zürichi Egyetemen volt tanár. Ebben az időben sok kiváló kutató mellett itt dolgozott Peter Debye is, kiváló fizikus. A történet szerint Schrödingert felkereste egyik nap kollegája, Victor Henri belga fizikokémikus, hogy átadja de Broglie doktori disszertációját azzal a céllal, hogy magyarázza el neki, mert nem érti, miről van benne szó, melynek témája a *2. fejezetben* is tárgyalt hullám-részecske kettőség. Schrödinger azzal a felkiáltással, hogy majd átnézi, magához vette a dolgozatot, de nem olvasta el Victor Henri többszöri kérésére sem. Majd Debye is hozzáfordult, hogy tartson szemináriumot valamiről, ezért döntött úgy Schrödinger, hogy de Broglie disszertációjáról fog előadni, így legalább elolvassa.[11] S habár Schrödinger egy gyönyörűen tiszta képet adott a témakörről, mégis azt a megjegyzést kapta Debye-tól, hogy gyerekes volt az előadása, ugyanis *„Ha van hullám, akkor hullámegyenletnek is lennie kell!”* Ez a provokáció vezetett ahhoz, hogy pár hét múlva megalkotta Scrödinger a hullámegyenletet, melyet később Nobel-díjjal jutalmaztak.[12] Több évtizedes kísérleti tapasztalat bizonyította be, hogy ez az anyagi világ alapvető törvénye, mely pontosan leírja a részecskék állapotát, és magában hordozza határesetként a Newton-egyenleteket is. Innentől számítjuk a kvantummechanika születését is.

Egy ilyen törvény felismerése nem logikai levezetések következménye, hanem heurisztikus gondolat. Mintha csak vakként bolyonganánk a gondolat útvesztőin, miközben kézenfogva vezetnek minket megannyi zsákutcán keresztül a kísérleti eredményeink. Sok improvizált lépés előzi meg az ilyen egyenlet megalkotását. Emellett pedig egy inspiráló környezet és irtózatosan nagy szerencse is kell hozzá, melyet Schrödinger története szépen bemutat. Nem hiába mondhatta Yang, aki a paritássértésért kapott Nobel-díjat azt, hogy a Nobel-díj 80 százalékban azon múlik, hogy jó időben jó helyen vagyunk-e.[13]

Vajon egy differenciálegyenlet megoldásánál számunkra, hallgatók számára hasznosabb és természettudományhoz illőbb-e a matematikai megoldási receptek helyett az intuitív feladatmegoldás? Úgy gondolom igen, a későbbi fejezetekben is ezt mutatom be.

Viszont elmélyedve kell gondolnunk a következőre: a Schrödinger egyenlet önmagában különös, ugyanis közvetlenül nem hordoz fizikai tartalmat a ψ hullámfüggvény. Born[14] 1954-ben így számolt be Nobel-díjának átvételekor tartott beszédében:

„Úgy tűnt számomra, hogy nem lehet a ψ-nek világos értelmezést adni, ha kötött elektronokat vizsgálunk…

Einstein egy gondolata adta meg a lökést a helyes irányba. Ő ugyanis úgy kísérelte meg a részecske – fénykvantum vagy foton – és a hullám dualizmust összebékíteni, hogy az

---

[11] (Staar 1991)

[12] (French, Taylor 1978)

[13] (Staar 1991:139)

[14] Max Born nevéhez fűződik a hullámfüggvény fizikai jelentésének megadása 1926-ban. A korábbi tapasztalatokkal ellentétben, egy komplex kifejezésnek nem a valós része hordozza a valósághoz köthető információt, hanem annak abszolútértékének négyzete. Nobel-díját ezért kapta, viszont azt csak 72. életévében kapta meg, az elmélet megalkotásától számítva 28 évvel később, mert sok fizikus nem volt képes ezt a valószínűségi interpretációt elfogadni korábbi szemléletük alapján.

optikai hullám amplitúdójának négyzetét, mint a foton előfordulási valószínűségének sűrűség-függvényét értelmezte. Ezt az elképzelést azonnal átvihetjük a ψ függvényre: reprezentálja a $|\psi|^2$ *az elektronok (vagy más részecskék) számára a valószínűség sűrűséget…”*[15]

Ennek a gondolatnak a szellemében a mérési eredmények, mint pl. a *2.4 c ábra*, a $|\psi|^2$ valószínűségét adják. A valószínűségi értelmezés következménye, hogy a ψ hullámfüggvény-nek folytonosnak, végesnek és egyértékűnek kell lennie. Ezenfelül az említett valószínűségsű-rűség szükségképpen normálható, azaz

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \mathrm{dx} = 1. \tag{3.2}$$

Így a fizikai jelentéssel bíró ψ függvénynek a távolban mindenképpen el kell tünnie. Ezek a gondolatok fognak hozzásegíteni minket a későbbiekben ahhoz, hogy a két ismeretlent tartal-mazó Schrödinger-egyenletet megoldhassuk.

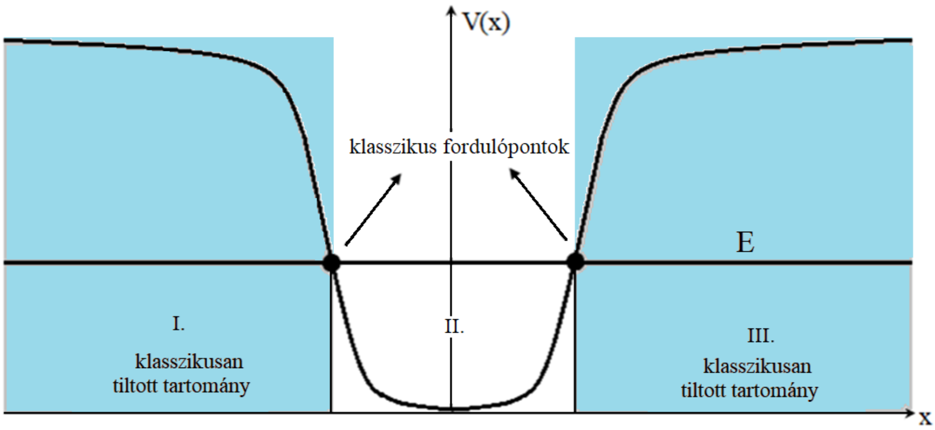
[15] (Simonyi 2011:464)

4. A HULLÁMFÜGGVÉNY MEGADÁSA KVALITATÍV MÓDSZEREKKEL

A *3. fejezetben* tárgyaltak szerint a valós fizikai függvényeknek speciális matematikai tulajdonságokat kell teljesíteniük. Ezeket felhasználva elemi módszerekkel is megoldhatjuk a Schrödinger-egyenletet a valóság túlzott leegyszerűsítése nélkül, melyből lényeges információkhoz juthatunk. Azaz a Schrödinger-egyenletből következik kvalitatív módon, hogy milyen alakú hullámfüggvények lehetnek a megoldások. Mindez egyszerű rajzokkal szemléltethető. A feladatokat egydimenzióban oldjuk meg.

Ahogy említettük, a függvény valószínűségi értelmezését leíró (3.2) egyenletből következik, hogy a hullámfüggvénynek a távolban el kell tűnnie. Ugyanis, ha bármely nem nulla értékhez tartana a hullámfüggvény, akkor annak egész számegyenesre vett integrálja végtelen lenne.

4.1 POTENCIÁLGÖDÖRBEN MOZGÓ RÉSZECSKE



4.1 ábra: Az egydimenziós V(x) potenciálgödör alakja. A részecske energiájának nagyságát az E szintvonal jelzi. Látható, hogy egyes helyzetekben a részecske energiája kevesebb, mint a potenciális energia, ezek klasszikusan tiltott tartományok. Azt a helyzetet pedig, ahol a potenciális energia éppen a részecske összes energiája, klasszikus fordulópontnak nevezzük. (Saját készítésű ábra.)

Tegyük fel, hogy a környezettel való kölcsönhatás következtében a részecskét valamely V(x) potenciálgödör a külső erőtér belsejében igyekszik tartani, és legyen a részecske E energiája az *4.1 ábra* illusztrációján jelölt nagyságú. A részecske klasszikusan csak abban a tartományban mozoghatna, ahol a részecske energiája legalább akkora, mint a potenciális energia: $E \geq V$. Az energia megadható ugyanis $E = \frac{p^2}{2m} + V$ alakban, ahol a $\frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2}$ mozgási energia klasszikusan értelmezve biztosan nem negatív, tehát az E energia nem lehet kisebb a V(x) potenciális energiánál. Ekkor a részecske periodikus mozgást végezne a fordulópontok között. A kísérleti tapasztalat atomi méretskálán viszont ennek ellentmond. Kvantummechanikai gondolkozásunk nem véletlen követelte meg az alapvető fizika mennyiségek újragondolását.

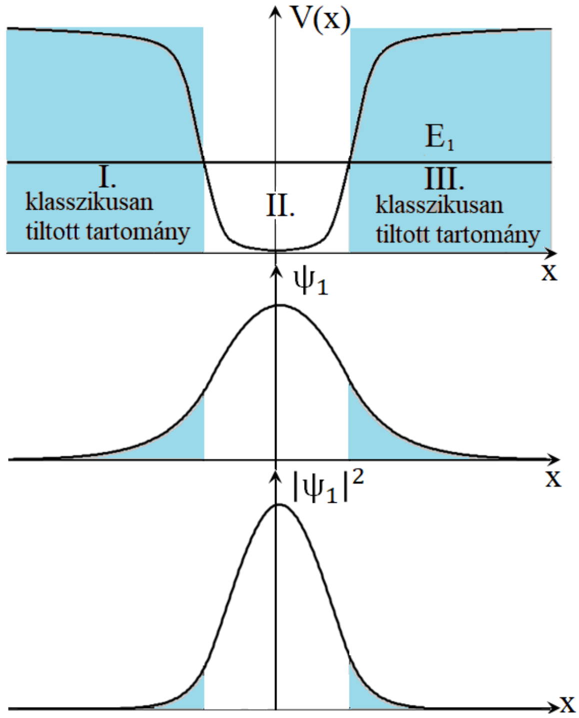
Megoldásunkhoz rendezzük át a (3.1) összefüggéssel leírt Schrödinger-egyenletet olyan alakra, melyből könnyen tudunk következtetéseket levonni a hullámfüggvény második deriváltjára:

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}\,(\mathrm{V}-\mathrm{E})\psi. \tag{4.1}$$

Az (4.1) egyenletből következik, hogy az *4.1 ábrán* jelölt I. és III. tartományban, ahol $\mathrm{E} < \mathrm{V}$ ennek megfelelően, ha ψ pozitív, akkor az konvex ($\psi'' > 0$), ha pedig ψ negatív, az konkáv ($\psi'' < 0$) lesz. A II. tartományban, ahol pedig $\mathrm{V} < \mathrm{E}$, ott a pozitív függvényértékhez konkáv hullámfüggvény, a negatívokhoz pedig fordítva. Inflexiós ponthoz ($\psi'' = 0$) a $\mathrm{V} = \mathrm{E}$ esetben juthatunk, vagyis a klasszikus fordulópontokban. Azzal, hogy a klasszikusan tiltott tartományban a függvénynek a végtelenben el kell tűnnie, miközben görbülete állandó előjelű, a hullámfüggvény alakja elképzelhető: monoton lecsengést mutat. A klasszikus fordulópontok közötti részen a függvény viszont hullámozhat. S mivel a hullámfüggvény kétszer deriválható, annak simának és folytonosnak kell lennie.

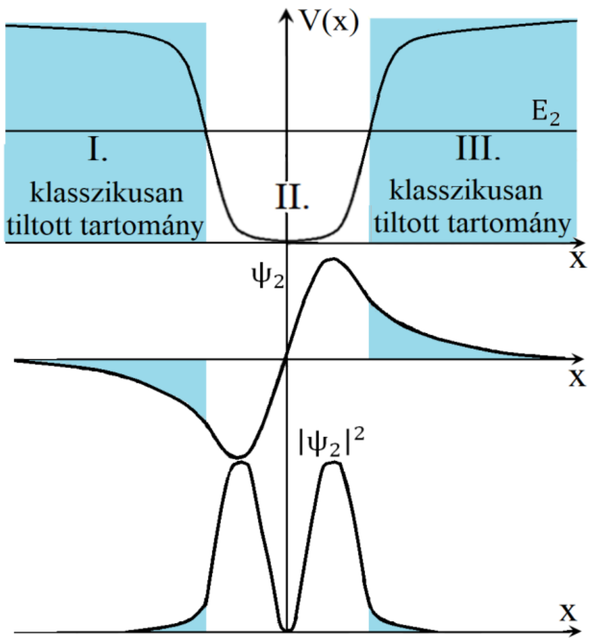
Azt vizsgálva, hogy milyen energia érték mellett lehet a hullámfüggvénynek fizikai jelentése, további megállapításokat tehetünk. Ha az energia alacsony, akkor a $|\mathrm{V}-\mathrm{E}|$ mennyiség is kicsi. Ebből az következik, hogy a ψ″, azaz a hullámfüggvény görbülete enyhe. Ha viszont nagyobb az energia, akkor a függvény meredekségének változása is nagyobb, a ψ függvénynek előjelet kell váltania, azaz a $|\psi|^2$-nek két vagy több „púpja” lesz. Ezen logikai következtetések alapján a legalacsonyabb, ún. alapállapoti energiához tartozó ψ_1 hullámfüggvény lehetséges alakját és annak valószínűségi (azaz abszolútértékének négyzete) értelmezését az *4.2 ábra* szemléleti.

A potenciálfüggvény tükrözési szimmetriája miatt a mérhető $|\psi|^2$ valószínűségeloszlásnak is szimmetrikusnak kell lennie. Ez a ψ hullámfüggvényre azt a megkötést jelenti, hogy páros (szimmetrikus hullámfüggvény), illetve páratlan (aszimmetrikus hullámfüggvény) lehet.

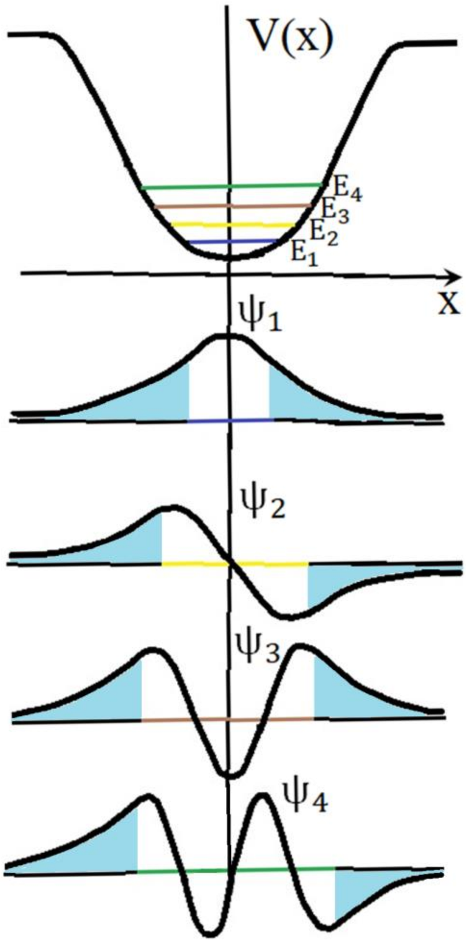


4.2 ábra: A potenciálgödörhöz tartozó alapállapoti $\psi_1(x)$ hullámfüggvény, illetve a fizikai jelentést hordozó $|\psi_1|^2$ valószínűségsűrűség, melyeket egyszerű, kvalitatív meggondolásból rajzoltunk meg. Klasszikus szemléletünknek ellentmondó tapasztalati tény, hogy a részecske a klasszikusan tiltott tartományokon (besatírozott rész) is tartózkodhat. Látható, hogy az alapállapoti energia sem zérus, azaz a rendszer alapállapotban is rendelkezik valamennyi kinetikus energiával.
(Saját készítésű ábra.)

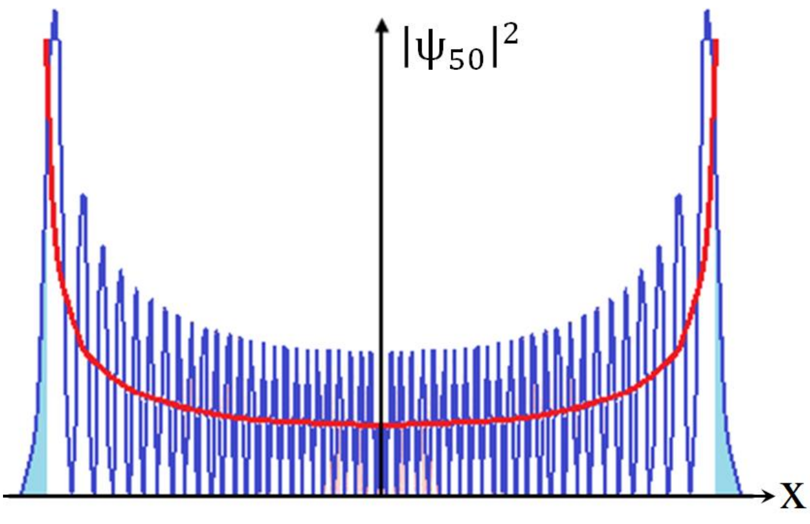
A gondolatmenetet folytatva, elkészíthető a második (4.*3 ábra*), majd összegezve a tanultakat az első kettő mellett a magasabb energiaszintű hullámfüggvények rajzai is *(4.4 ábra)*. E gondolatok következményeképpen megfogalmazhatjuk, hogy csak bizonyos energiákhoz rendelhető hullámfüggvény, azaz csak diszkrét energiaszintek vannak, továbbá a hullámfüggvény zéruspontjainak száma eggyel kevesebb, mint ahányadik energiaállapotban található meg a részecske.



4.3 ábra: Hasonló meggondolásokból elkészíthető a második energiaszinthez tartozó ψ_2 hullámfüggvény alakja és annak valószínűségi értelmezése is. Szükségszerűen az energiaértéknek annyival nagyobbnak kell lennie, hogy a hullámfüggvény negatív értékeket is felvegyen, annak érdekében, hogy a valószínűségi értelmezés ne sérüljön.
(A rajz saját készítésű.)



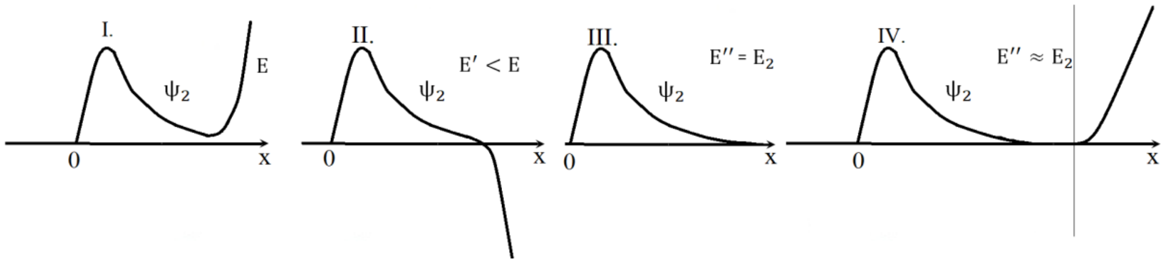
4.4 ábra: A különböző energiasajátértékekhez tartozó sajátfüggvények. Látható, hogy ahány „púpja" van a hullámfüggvénynek, annyiadik energiaállapotban van a részecske, melyet a ψ alsó indexe jelöl. A rajzokat a Schrödinger-egyenlet alakjából, illetve a *3. fejezetben* tárgyalt valószínűségi értelmezésből nyert tulajdonság felhasználásával készítettük el. Vegyük észre, hogy a részecske a csomópontokban, ahol ψ eltűnik, 0 valószínűséggel tartózkodik. A *7. fejezetben* kifejtésre kerül a differenciál-egyenlet megoldása során, hogy a szélső, klasszikusan tiltott tartományokban a függvény exponenciálisan cseng le, a köztes részeken pedig szinuszos jelleggel oszcillál a hullámfüggvény.
(Saját készítésű ábra.)



4.5 ábra: Egy 50. energiaszinthez tartozó hullámfüggvény (kék vonal) megoldása az adott potenciálgödörben. Jól látható, hogy magas energiákon a valószínűségsűrűség átlaga a klasszikusan gödörben mozgó test helyzetének valószínűségfüggvényéhez (piros vonal) tart, azaz visszakapjuk a klasszikus megoldást: oszcilláló mozgást végez a klasszikusan tiltott tartományok között, melyet a satírozott rész jelöl. (Saját készítésű ábra.)

A pontosabb megoldások esetén precíz függvényábrázolásra van szükségünk, melyhez a hullámfüggvény matematikai megoldása szükséges. Ezért a hullámfüggvény megoldása általában számítógépes eszközökkel történik, mert a potenciál bonyolultabb alakja miatt ez analitikusan igen nehézkesen, gyakran egyáltalán nem végezhető el. A korábbi tárgyalásból kiderült, hogy csak meghatározott $\psi - E$ párok jöhetnek szóba. A számítógépes eljárás lényege, hogy minden energiához rajzol folytonos és kellően sima függvényt, olyanokhoz is, melyek a valóságban nem fordulnak elő. S mi ebből választjuk ki a megfelelőt, mely teljesíti a hullámfüggvényre megszorított speciális tulajdonságokat, jelen esetben azt, hogy a függvény a végtelenben eltűnik.

Ha választunk egy véletlenszerű energiaértéket, arra kaphatunk például az *4.6 ábrán* I. jelzéssel szereplő $\psi(x)$ hullámfüggvényt. Jól látható, hogy a választott E energiaértékünk nem bír fizikai jelentéssel, hiszen ψ a végtelenbe növekszik, ezért nyilvánvalóan a következő $E' < E$ választott energiaértéknél $\psi'(x)$ eleinte valamelyest kisebb lesz. Ezáltal eljuthatunk a II. rajzzal jelölt függvényhez, mely azonban már a másik irányba szalad el. A skatulyaelvet követve az E' és E között lesz olyan E_2 érték, ahol ψ az x tengelybe simul, melyet a III. ábra jelöl. Ezt az E_2 értéket tekinthetjük fizikai, azaz lehetséges energiának, s az ott megrajzolt ψ függvényt a hozzá tartozó $\psi_2(x)$ hullámfüggvénynek (a 2-es index arra utal, hogy így a *4.1 ábra* szerinti potenciálban a 2. energiaszintet találtuk meg). A példa megmutatja, hogy a fizikai energiaérték egy instabil helyzet, ezért a gyakorlatban ezt csak véges pontossággal adhatjuk meg. Ezt mutatja a IV. rajz, melyben a függőleges egyenes azt az x értéket jelenti, ameddig a numerikusan kapott függvény jól közelíti az egzakt ψ_2 hullámfüggvényt. A gyakorlati alkalmazásban kiemelt szerepe van annak, hogy ne akarjunk végtelenül pontosak lenni, mert ez a „kíváncsiság minket hamar öreggé” tesz… Ezeknek a gondolatoknak az átadása kötelező fizikatanári szempont, hiszen diákjaink egyébként minden esetben törekednének a fizikai feladatok megoldásánál a matematikaórán beléjük rögzült végtelen pontosságra.



4.6 ábra: A második energiaszinthez tartozó hullámfüggvény numerikus úton történő meghatározása a gyakorlatban, ha a ψ-t az $x > 0$ tartományban keressük. A megfelelő energiaérték meghatározása numerikusan csak egy adott pontossággal történhet, az ehhez tartozó x-tartomány végét a IV. rajzon függőleges egyenes jelöli. (Saját készítésű ábra)

A megfelelő matematikai és fizikai képzettség lehetőséget nyújt arra is, hogy különböző problémákat szemléletesen tudjunk elmagyarázni. Erre kiváló példa Gnädig Péter tanár úr atom- és magfizika egyetemi kurzusán elhangzott szemléletes példája, mellyel a Schrödinger-egyenletből következő diszkrét energiaszinteket magyarázza el.

A megállapításokat a (4.1) egyenlet átrendezéséből nyerhetjük:

$$\frac{\psi''}{\psi} = \mathrm{const} \cdot (\mathrm{V} - \mathrm{E}). \tag{4.2}$$

Legyünk a klasszikusan tiltott tartományban, azaz legyen $\mathrm{V} > \mathrm{E}$. Egy sivatagi autóversenyben elindul egy autó a Nílus[16] mellett[17], az autó balról jobbra halad[18], és behunyt szemű vezetőnek segédje azt mondja, hogy ha a Nílus bal oldalán[19] van, akkor tekerje a kormányt balra[20], mégpedig úgy, hogy ha nagyobb a távolság a Nílustól, akkor arányosan jobban tekerje el a kormányt. Hogyan kerülhető el, hogy a vezetők ne haljanak szomjan? Ha az autó már távolodni kezdett a Nílustól, akkor a távolodás üteme egyre nagyobb, azaz belefut a sivatagba[21]. (Hasonlóan elmagyarázható a Nílus jobb oldalán vezetett autó esete is.) Természetesen, ha a vezető önkényesen állítja be a kormány elfordítását, nagy valószínűséggel belefutnak a sivatagba. Csak ha az autó kezdetben is a Nílus felé haladt, és akkor is csak egy speciális kormánybeállításnál[22] fordulhat az elő, hogy a vezető annyira fordítja el a kormányt, hogy a pálya eléri a folyó vonalát. Az utóbbi gondolatmenetek arra világítanak rá, hogy az összes elképzelhető energiaérték között mennyire „ritkák” a fizikai jelentéssel bíróak, azaz a távolban lecsengő hullámfüggvényekhez tartozó energiák. Ez a mikrovilágra jellemző energiakvantáltság háttere.

[16] A Nílus jelen példában az x tengelynek feleltethető meg.

[17] A Nílustól vett távolságot numerikus számolásnál a ψ_0 kezdeti érték adja meg.

[18] Jelenesetben ez az x tengely pozitív irányítását jelenti.

[19] A Nílus baloldala $\psi > 0$ feltétel jelenti.

[20] Hiszen, ha $\psi > 0$, akkor $\psi'' > 0$.

[21] Ez a példa jól illusztrálja a függvény erre az esetre jellemző exponenciális növekedését. Mivel az e^x függvény deriváltja önmaga, ezért ahogyan nő a függvényérték, ugyanolyan mértékben nő a függvény meredeksége is, melyet jelen példában a kormány elfordulása jellemez.

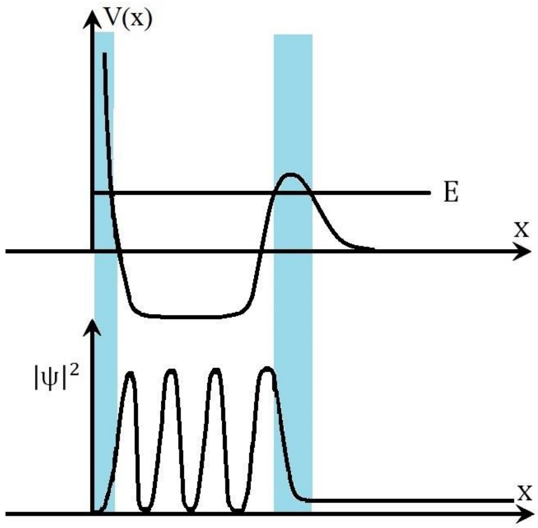
[22] A kormánybeállítást a példában a ψ''/ψ arány adja meg, vagyis a (V-E) érték, melyben az E energia a megfelelően beállítandó paraméter.

5. AZ ALAGÚTEFFEKTUS

Ez a megdöbbentő és klasszikusan értelmezhetetlen jelenség írja le, hogyan képesek az elektronok áthaladni bizonyos akadályokon. Jó leírást ad az α-bomlásra, amely a középiskolás matematikai és fizikai tanulmányok során középszinten is előkerül.

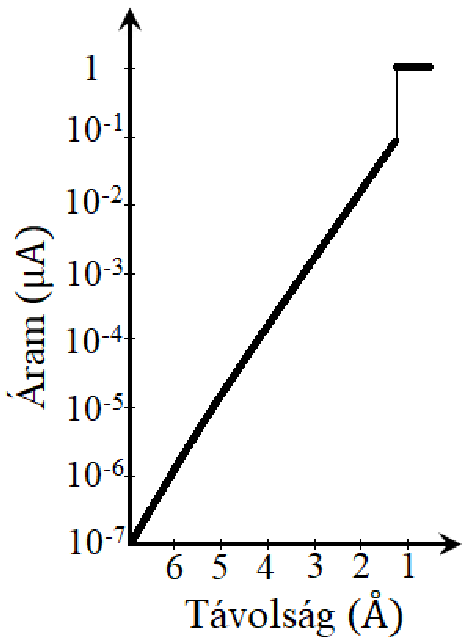
Az előzőekhez hasonlóan, a hullámfüggvényt meg tudjuk jellegzetesen rajzolni más típusú potenciálban mozgó részecske esetében is. Az egyik fontos és klasszikus szemléletünknek teljesen ellentmondó eset az alagúteffektus, mely során a részecske kvantummechanikai okokból képes áthaladni olyan potenciálakadályon, melyhez energiája klasszikusan nem elegendő.

A Schrödinger-egyenlet (4.1) alakján jól látszik, hogyha a részecske tömege nagy, akkor olyan gyorsan változik a függvény meredeksége (azaz a ψ'' nagy), hogy nem várunk jelentős alagúthatást. Ahhoz tehát, hogy a radioaktív atommagból részecskék léphessenek ki, szükséges, hogy a kilépő részeknek kicsi tömege legyen. Ezt a feltételt jól teljesíti a 2 protonból és 2 neutronból álló hélium atommag, mely kiléphet a részecskéket a magban tartó, és az *5.1 ábrán* sematikusan bemutatott potenciálfal által nyújtott akadályon: ez az α-bomlás.



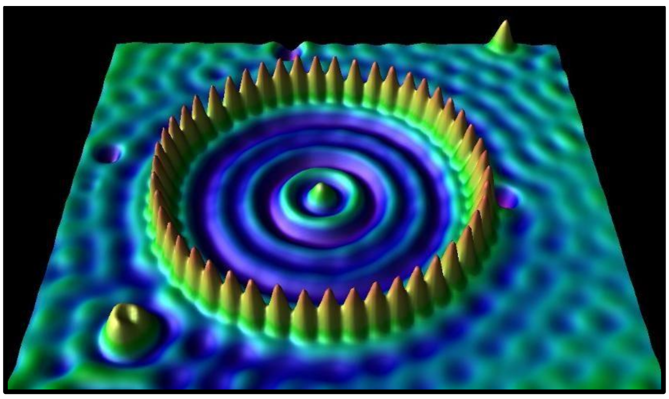
5.1 ábra: Az α-bomlás során lévő potenciálakadály elmélete alagúteffektussal magyarázható. Jól látható a Coulomb-potenciál $1/r$-es lecsengése a potenciál görbe végén. A satírozott rész a klasszikusan tiltott tartományt, a hélium atommag energiáját pedig a szintvonal jelzi, mely klasszikusan nem lenne elegendő a radioaktív atommagból való kilépéshez. (Saját készítésű ábra.)

Az alagúteffektus alapján értelmezhető, hogy az elektronok képesek áthaladni a fémek érintkezési felületén lévő oxid- és szennyeződésrétegen, amely szigetelőként viselkedik, azaz tapasztalatainkkal összhangban áram folyik át az érintkezési ponton akár forrasztás nélkül is. Sőt képes áram folyni két, egymással nem érintkező fémfelület között is. Az így áthaladó áramot adja meg a két fémfelület távolságának függvényében az *5.2 ábra*.



5.2 ábra: Az elektron a fémben bárhol egyforma valószínűséggel található meg, sőt ez a valószínűség a fémen kívül sem lesz ugrásszerűen 0, hanem a fémtől távolodva exponenciálisan cseng le. A grafikonon ez az exponenciális lecsengés egy erős áramerősség csökkenésben mutatkozik meg (7 nagyságrenddel csökken az áramerősség néhány Å távolságra). Így képes áram folyni két fém között úgy, hogy ténylegesen nem is érnek össze.
(Saját készítésű ábra.)

Az alagúteffektus adott lehetőséget arra, hogy korunk egyik legpontosabb mikroszkópját elkészítse az emberiség: a pásztázó alagútmikroszkópot. Egy ezzel készített képet az *5.3 ábra* mutat be. Az *5.2 ábra* jól mutatja, hogy nagyon erős áramerősség változás történik kicsiny távolságváltoztatás esetén, így alkalmas az egyes atomok helyének feltérképezésére. A pásztázó alagútmikroszkóp arra is képes, hogy atomokat kissé elmozdítson, így kialakítva a képen látható rendezett struktúrát.[23] Megfigyelhető a részecskék hullámtulajdonsága is, a kör közepén található erős kiemelkedés nem egy atom helyét jelzi, hanem az őt körbevevő atomok hulllámfüggvényeinek interferenciáját



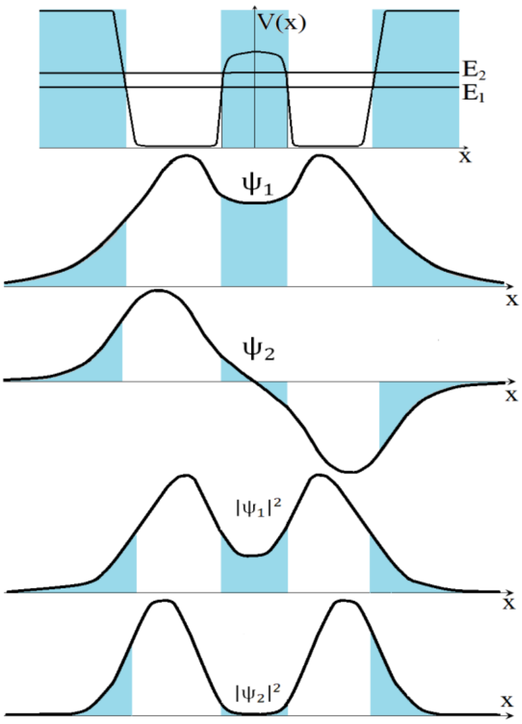
5.3 ábra: A képen az alagúteffektusra épülő alagútmikroszkóp képe látható. A mikroszkóp egyenként azonosítja az atomokat ennek a kvantumfizikai jelenségnek a segítségével [1].

[23] (Mihály 2006)

6. KÉMIAI KÖTÉS

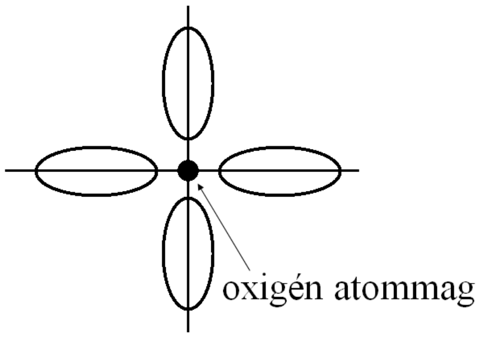
További különlegessége a kvantummechanikának, hogy úgy teremti meg a különböző középiskolás tantárgyak kapcsolódását, hogy leírja a kémiát is. Fizikatanárként ezért olyan ismeretekkel gyarapodhatunk, amellyel jobban össze tudjuk hozni ezt a két területet.

Ha két proton által létrehozott Coulomb-szerű vonzásának megfelelő potenciál lényegi vonásait szemlélteti a *6.1 ábra* felső képe. Ebben a hidrogén iont értelmezhetjük kémiai kötés szempontjából. A korábban tárgyalt megoldási recepteket végigjátszva az egyetlen elektron hullámfüggvényének alakja megrajzolható. Most is megkülönböztethetjük a szimmetrikus (páros) és aszimmetrikus (páratlan) hullámfüggvényt. Az alapállapoti ψ_1 hullámfüggvényén látjuk, hogy az elektron tartózkodhat olyan tartományokban is, amelyekben klasszikusan nem (alagúteffektus). Így a két proton által egymásra kifejtett taszító erőhatást képes az elektron leküzdeni azáltal, hogy valamilyen valószínűséggel a két proton között tartózkodhat, így fejt-ve ki rájuk egy vonzó hatást. Azonban a második energiaszinthez tartozó ψ_2 hullámfüggvény a két proton között nem tartozkodhat, ezért a molekula a Coulomb-erő hatására szétesik.



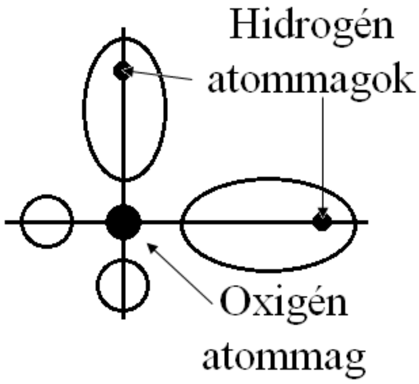
6.1 ábra: Az elektron hullámfüggvényének és megtalálási valószínűségének sematikus alakja egy olyan potenciálgödörben, amely két proton vonzását modellezi. A ψ_1 az alapállapoti hullámfüggvény, mely szimmetrikus, illetve ψ_2 a második energiaszinthez tartozó aszimmetrikus hullámfüggvény. ψ_1 értelmezést nyújt a kémiai kötések mibenlétére. (Saját készítésű ábra.)

Eddigi példáink megmutatták, hogy az elektronok adott állapotban csak bizonyos helyeken találhatóak meg nagy valószínűséggel. Ez így van háromdimenziós problémákban is, például az atomok külső kötési elektronjai esetén. Az oxigén atom két kötési elektronja például a *6.2 ábrán* látható tartományokban tartózkodhat nagy valószínűséggel.



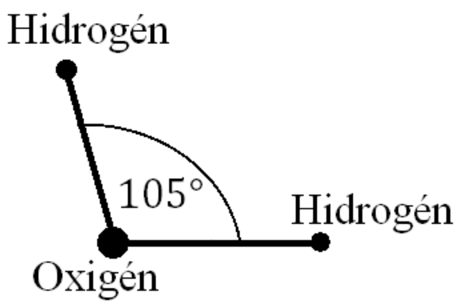
6.2 ábra: Az ábra az oxigén atom a 2 külső elektronjának nagy megtalálási valószínűségű helyeit mutatja bekarikázott tartományokként. (Saját készítésű ábra.)

Ez az irányítottság magyarázza a kémiai kötések térbeli struktúráját. Ha ugyanis két hidrogén atomot közelítünk az oxigén atomhoz, akkor azok atommagjai az oxigén nagy elektronsűrűségű tartományaihoz kapcsolódik, miközben saját elektronjaik révén is deformálják az eredeti elektronfelhőket. Ezt sematikusan a *6.3 ábra* illusztrálja.



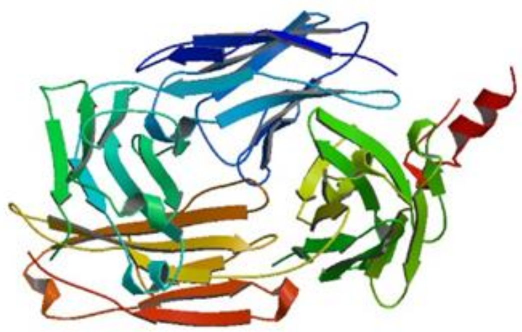
6.3 ábra: Az elektronok hullámfüggvényeinek átfedése a H_2O-molekula képződése során. (Saját készítésű ábra.)

A két merőleges elektronfelhő taszításának következtében a kötési irány kissé eltávolodik, s kialakul víz esetén az ismert 105°-os szerkezet (*6.4 ábra*).



6.4 ábra: Az illusztráció a vízmolekula 105°-os kötési szögét mutatja. (Saját készítésű ábra.)

A klasszikus fizika a kémiai kötés megmagyarázására nem képes, a problémákat klasszikusan szimulálva az atommagok mindig eltávolodnak. Fontos tehát hangsúlyozni, hogy a kvantummechanika teljes egészében meghatározza a molekulák szerkezetét, sőt a lényegesen bonyolultabb, akár több ezer atomból álló makromolekulák – így az élet építőköveit alkotó fehérjék vagy éppen a DNS – felépítését, térbeli alakját is. Vagyis a különböző funkciójú molekulák térbeli összeillesztésén alapuló modern gyógyszeripar ma már elképzelhetetlen volna a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásán alapuló szimulációk nélkül. Nem véletlen tanulnak a gyógyszerészhallgatók kvantummechanikai ismereteket, köztük a Schrödinger-egyenlet megoldását.

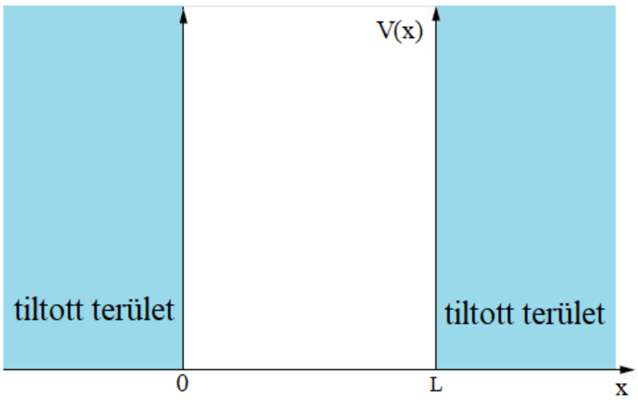


6.5 ábra: A képen egy makromolekula (rituximab) látható. Ez a fehérje több ezer atomból áll, s mára a modern gyógyszeripar alapjait a kvantummechanikai számítások jelentik. [2]

7. POTENCIÁLDOBOZBAN MOZGÓ RÉSZECSKE

A fejezetben a potenciáldobozban levő részecskék hullámfüggvényének megoldását láthatjuk. Ennek leírása során nem a feladat megoldását tűztem ki egyedüli célnak. Filozófiai tartalmát és a feladat megoldásához szükséges, rejtett és izgalmas gondolatokat vettem szemügyre. A bevezetőben tárgyaltakhoz hasonlóan itt is jól láthatóvá válik, mennyivel több rejlik egy feladat puszta megoldása mögött, mint amit elsőre gondolnánk, ezáltal érdekfeszítővé és számunkra szakmailag elengedhetetlenné téve azt.

Elsőként egy L szélességű végtelen mély potenciáldobozban levő részecske hullámfüggvényét keressük. Ha tekintünk egy mindkét oldalán lezárt vízszintes csőben súrlódásmentesen mozgó részecskét, például elektront egy vezetékben, akkor a részecske potenciális energiája a fémdarabban konstans nullának választható, és mivel a falak áthatolhatatlanok, ezért képzelhetünk egy végtelen potenciálú falat. Egy ilyen idealizált rendszer számára jó modell a potenciáldoboz (mellyel az *5. fejezetben* említett alagúteffektust a vezeték végén elhanyagoljuk).



7.1 ábra: Az ábra a L szélességű potenciáldobozt mutatja, ahol a függőleges felfelé mutató nyíl jelentése, hogy a potenciál értéke végtelen.

$$V(x) = \begin{cases} 0, \text{ ha } 0 < x < L \\ \infty, \text{ különben.} \end{cases}$$

A részecske a tiltott tartományokban nem tartózkodhat, mert ott a potenciál értéke végtelen, azaz $\psi(x) = 0$. Persze éppen ezért vettük végtelenre a potenciál értékét a dobozon kívül, hogy matematikailag egyszerűen leírható legyen az a jelenség.

Megoldásunkhoz szükséges további feltételek rögzítése is, ugyanis egyenleteink száma kevesebb, mint a bennük szereplő ismeretleneké. Ezeket a plusz egyenleteket függvényünk jelentéséből nyerhetjük, melyekről általánosságban a *3. fejezetben* volt szó.

A részecske csak a $0 < x < L$ tartományon tartózkodhat, ahol $V(x) = 0$. Így a (3.1) egyenlet által leírt Schrödinger-egyenlet alakja:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 0\psi(x) = E\psi(x). \tag{7.1}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\psi. \tag{7.2}$$

Látható, hogy a hullámfüggvény kétszeres deriváltja arányos önmaga ellentettjével, tehát intuitívan láthatjuk, hogy szinusz vagy koszinusz típusú függvény a megoldás. Matematikusként át kellene gondolnunk, hogy létezik-e megoldás és az egyértelmű-e. De mivel mi a természetet írjuk le, egy fizikai tényt fogalmazunk meg matematikai formába öntve, ezért ebből következik, hogy a megoldásunk egyértelmű és létezik.

Úgy vélem, e gondolatok kiválóan érzékeltetik a matematika szerepét a természettudományokban. Feladatunk nem más, mint a fizikai valóságot az ember alkotta matematikával leírni, de ne felejtsük el, hogy számunkra ez a nyelv nem más, mint egy segédeszköz. Nem az a cél, hogy a pusztán gondolati úton alkotott matematikát ráerőltessük az általunk megismert és tőlünk független világra, ahol a természeti törvények létünket nem veszik figyelembe.

Folytatva a feladat megoldását, vezessük be a következő jelölést:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{vagyis} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{7.3}$$

Így a ψ hullámfüggvény alakja:

$$\psi = A\sin(kx) + B\cos(kx). \tag{7.4}$$

A következő lépés a folytonosság figyelembevétele a peremeken: $\psi(x = 0) = \psi(x = L) = 0$, azaz a függvényünk folytonos, hiszen a dobozon kívül az azonosan 0 függvény a megoldás. Ezt és a (7.4) állítást figyelembe véve következnek, hogy

$$\psi(0) = B = 0; \tag{7.5}$$

$$\psi(L) = A\sin(kL) = 0. \tag{7.6}$$

Mivel a szinusz függvény a 0 értéket minden $n\pi$ helyen veszi fel, ezért a (7.6) egyenletből következik, hogy

$$kL = n\pi \qquad \text{ahol n egész szám, vagyis} \tag{7.7}$$

$$k_n = \frac{n\pi}{L}; \tag{7.8}$$

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{7.9}$$

Jól látható, hogy megoldásunkban az A a hullám amplitúdóját jelenti, ennek meghatározásához az $\int_0^L |\psi|^2 dx = 1$ valószínűségi értelmezésből juthatunk. Én ezt a lépést elhagyom, ugyanis nem hordoz releváns információt a hullámfüggvény alakjára vonatkozóan.

A (7.9) egyenletnél ismét előjön fizikusi mivoltunk, mely a matematikai megoldásokat átértelmezi. Ha az $n = 0$ esetet vizsgálnánk, azt kapnánk, hogy a hullámfüggvény azonosan nulla. Tehát kapunk egy olyan megoldást, hogy nincs elektron a potenciáldobozban. Természetesen ez minket nem érdekel, nincs fizikai relevanciája leírni a semmit. A következő, amit észrevehetünk, hogy nincs különbség a +1 illetve -1 között. A szinusz függvény páratlan, ezért a negatív előjel kivihető a szinusz elé, ám mint tudjuk a hullámfüggvénynek önmagában nincs fizikai jelentése, csak annak abszolútérték négyzetének, azaz a valószínűségsűrűség függvénynek. Ebből következik, hogy a +1 illetve -1 ugyanazt a megoldást írja le, ezért kedvünk szerint a negatív n megoldások is kizárhatóak, azok nem hordoznak új információt.

Feladatunk iménti tanulsága is a fizika és matematika kapcsolatáról alkotott elképzelésünket bővítette. A pusztán matematikai probléma fizikai tartalom nélkül más megoldást ad. Fizikusként mi csak az $n = 1, 2, 3, \dots$ megoldásokkal foglalkozunk, tehát

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad \text{ahol } n = 1, 2, 3, \dots \tag{7.10}$$

Ha a (7.3) egyenletbe behelyettesítjük a (7.8)-ban kapott k értéket akkor:

$$\frac{n^2\pi^2}{L^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{7.11}$$

Ezt átalakítva az energia lehetséges értékei:

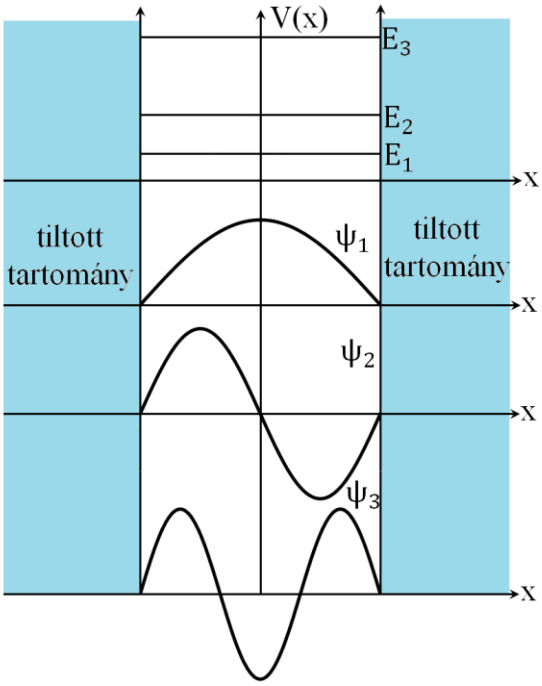
$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 = E_1 n^2. \tag{7.12}$$

Fizikai tartalma pedig megmondja, hogy tényleg diszkrét energiaszintek vannak, melyeket a fenti eredmény ad meg és az n-et kvantumszámnak nevezzük, ugyanis a diszkrét energiaszintek ennek az egészszámnak a függvényeként adhatóak meg.

A (7.11) összefüggés átrendezéséből megkapható, hogy

$$L = \frac{n\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{n\pi\hbar}{\sqrt{\frac{2mp^2}{2m}}} = \frac{nh}{2p} = n\frac{\lambda}{2}, \tag{7.13}$$

azaz a részecske számára rendelkezésre álló intervallum a de Broglie-félhullámhosszának egészszámú többszöröse.



7.2 ábra: A lehetséges energiasajátértékhez tartozó hullámfüggvények. Látszik, hogy az energia négyzetesen függ a kvantumszámtól. (Saját készítésű ábra.)

A hullámfüggvény megoldásából látszik, hogy ezek állóhullámok, s megfeleltethetők a mindkét végén befogott húron kialakuló állóhullámoknak. Tudjuk klasszikus fizikai tanulmányainkból, hogy a csomópontok létrejöttéhez szükséges, hogy az L hosszúságú húrra a hullámhossz felének egészszámú többszöröse férjen rá, melyet éppen a (7.13) egyenlet ír le. A hasonlóságot lenyűgözőnek gondolom, ugyanis pusztán a matematikai leírás hasonlóságából tudunk analógiát vonni a felfoghatatlan kvantummechanika és mindenki számára elképzelhető (és hallható) klasszikus fizika között. Ezek a hasonlóságok adnak lehetőséget a jelenségek elképzelésére, megkönnyítik tájékozódásunkat a témakörben, s milyen érdekes, hogy egy új, ismeretlen világ felfedezésénél ezek a matematikai egyezések nyújtanak segítséget. Feltárul, mennyire elengedhetetlen a klasszikus fizika jó megértése. A két eset között lényeges fogalmi különbség is van: a húr esetén a frekvencia $\omega_n = ck_n$ (c a hangsebesség) kvantált, az energia, ami A^2-tel arányos folytonos (és persze $\int|\psi|^2 \neq 1$), míg a kvantummechanikai problémában az $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ mennyiség kvantált. Ez utóbbi mennyiségben megjelenik a $\hbar$ Planck-állandó, vagyis az összefüggés klasszikusan nem ismerhető fel.

„Ebből a valamiből nekünk az kell, ami biztosan van: az érzés. Minél biztosabban van, annál pontatlanabb. Minél jobban pontosítjuk, annál kevésbé mondhatjuk rá, hogy van."[24] [25]*(Ottlik Géza)*

8. HATÁROZATLANSÁGI RELÁCIÓ

Werner Heisenberg 1927-ben publikált cikkében beszél a határozatlansági relációról, melyet gondolatkísérletekből származtatott[26], később azonban pontos levezetése is megszületett. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció középiskolában tanult megfogalmazása, hogy egy részecske helyének és impulzusának egyidejű mérésekor igaz a következő összefüggés:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{8.1}$$

ahol Δx a részecske helymérésének bizonytalanságát, Δp pedig a részecske impulzusmérésének bizonytalanságát jelenti.

Azonban ez a középiskolás megfogalmazás kételyeket és illúziókat kelthet diákjainkban, ezért elengedhetetlen nekünk, fizikatanároknak a megfelelő kvantummechanikai ismeret. Az iskolai megfogalmazás azt az érzetet keltheti, hogy mérőműszereink pontatlanságának oka az összefüggés, azonban ez téves. A határozatlansági relációban történő mérést egy ideális mérőműszerre mondjuk ki, amely a mérnöki megvalósításból adódó pontatlanságokat nem tartalmazza. Azaz a határozatlansági reláció igazságtartalma nem függ a mérőműszertől, hanem a kvantummechanikai állapotok valószínűségi tulajdonságainak következménye. Nagyon fontosnak tartom, hogy a határozatlansági relációból nem következik, hogy a világ megismerhetetlen, hiszen jelenségeinket törvényekbe foglaljuk, s ezáltal jóslatokat tudunk tenni. Érdemes inkább lehetőségként felfogni ezeket a fizikai törvényeket, mintsem korlátnak.

A középiskolás fizikatanároknak azért is szükséges a jó szakképzettség, mert rengeteg olyan feladattal találkozhat különböző könyvekben, melyek pontatlanok, félrevezetőek esetleg tévesek is lehetnek. Ezeket fizikatanárként észre kell vennünk, s erre a pontatlanságra egy példa lehet a 2017. márciusi KöMaL számban megjelent *P.4925. feladat*[27].[28]

„A határozatlansági reláció felhasználásával becsüljük meg, hogy legalább mekkora lenne egy 10^{-11} m átmérőjű gömbbe zárt elektron energiája.

---

[24] (Ottlik 1993:6)

[25] Ottlik az érzést a határozatlansági relációval hozta párhuzamba.

[26] (Jánossy 1971)

[27] Az alábbi példára Szeibert Janka, matematika-fizika tanárszakos hallgató hívta fel a figyelmem.

[28] (KöMaL 2017/03:189)

A hivatalos megoldás a következő:

A „gömbbe zárt" elektron a gömb belsejében szabadon mozoghat, de a gömb falán nem képes áthatolni, emiatt a helyének bizonytalansága (határozatlansága) a gömb d átmérőjénél nem lehet nagyobb. Ez érvényes mindhárom térbeli koordinátára, tehát:

$$\Delta x \leq d \qquad \Delta y \leq d \qquad \Delta z \leq d \tag{8.2}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció szerint az elektron sebességének komponenseire érvényes:

$$v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \geq \frac{\hbar}{2md} \qquad v_y \geq \frac{\hbar}{2m\Delta y} \geq \frac{\hbar}{2md} \qquad v_z \geq \frac{\hbar}{2m\Delta z} \geq \frac{\hbar}{2md}. \tag{8.3}$$

ahol $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1 \cdot 10^{-34}\, J, m_e = 9 \cdot 10^{-31}\, kg$ *az elektron tömege és* $d = 10^{-11}\, m$.

A gömbbe zárt elektron energiája ezek szerint

$$E = \frac{1}{2}m\left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2\right) \geq \frac{3h^2}{32\pi^2 d^2 m} \approx 4{,}6 \cdot 10^{-17} J \approx 0{,}3\, keV. \tag{8.4}$$

Megjegyzések:

1. A kiszámított energia alsó határa sokkal kisebb, mint az elektron $mc^2 = 510\, keV$ *nyugalmi energiája, ezért jogos volt a mozgási energia nemrelativisztikus képletének alkalmazása.*

2. Az alkalmazott becslés nagyságrendileg helyesen adja meg a bezárt elektron energiáját, de az energia számszerű értéke – az alkalmazott közelítéstől függően – más is lehet. (A határozatlansági relációt gyakran $\Delta(mv) \cdot \Delta x \geq h$ *alakban írják fel; ebből az energiára kb. 50 keV adódik.) Ez a becslés éppúgy elfogadható, mint a fentebb megadott érték.*

3. A „dobozba" vagy gömb alakú „üregbe" zárt elektron csak egy leegyszerűsített modell, ilyen helyzet ténylegesen nem valósítható meg. (Feltehető a kérdés: miből kellene készíteni egy ilyen üreg falát.) A kocka vagy gömb alakú üreg csak modellezi pl. a hidrogénatomot, ahol az elektront az atommag Coulomb-erőtere „zárja be" egy kb. 10^{-10} *m átmérőjű térrészbe."* [3]

A gondolatmenetünk rávilágít arra, hogy a diákok számára jobban érthetővé tehető a feladat megoldása, ha a kvantummechanika eszköztárán alapul. Továbbá bemutatja, hogy éppen a határozatlansági reláció miatt az alapállapoti energia mindig véges, annak ellenére, hogy klasszikusan nullát kapnánk.

A (8.3) számmal ellátott egyenlőtlenségekkel kapcsolatban az a kérdés merül fel, hogy miért v_x szerepel a bal oldalon Δv_x helyett, ahogy az a határozatlansági relációból következne. Éppen az egyetemi tanulmányokból tudjuk, hogy $(\Delta v_x)^2$ a sebesség szórásnégyzete, vagyis v_x^2 átlagának és v_x ψ-vel képzett átlaga négyzetének különbsége: mivel x irányú elmozdulás nincs, v_x átlaga eltűnik, azaz $(\Delta v_x)^2$ éppen a v_x^2 átlagával lesz egyenlő. Azaz a

$$\sqrt{(\Delta v_x)^2} = \sqrt{v_x^2} \geq \frac{\hbar}{2md}$$

alak használható, melyet hasonlóan a másik két komponensre is felírhatunk. Ezért alkalmazhatjuk tehát a (8.4) állítást, és nem kell használni a $\Delta v_x = v_x$ érthetetlen közelítést. A tanuló így megérti azt is, hogy a mikrovilágban a legalacsonyabb energiájú kötött állapot sohasem felel meg a nyugalomnak (klasszikusan nulla energiájú állapotnak), hiszen abban a sebesség zérus, pontosan ismert, de emiatt a hely teljesen bizonytalan lenne, a hullámfüggvény nem tarthatna nullához nagy távolságokra.

Azért is tartom fontosnak az alábbiakat, mert ezzel a témakörrel nem foglalkoznak behatóan a középiskolás tanulmányaik alatt a diákok. Ezért véleményem szerint sok tanuló gondolna a 0 J megoldásra, de egy versenyfeladathoz mérten túlzottan könnyű megoldási eredmény összezavarhatja a versenyzőt, aki hamar felfüggesztené a feladat megoldását. A megoldások számát megnézve jól látszódik, hogy a népszerűtlenebb fizika feladatok közé tartozott a 2017. márciusi számban, s az eredménylistán az is megfigyelhető, hogy ezen az apró értelmezésen helyezések is múlhattak.

Természetesen a klasszikus fizika visszakapható a kvantummechanika határeseteként, melyet korrespondencia-elvnek hívunk. Jelen példában ez a $\hbar \to 0$ feltételt jelenti. Jól látható, hogy ekkor a határozatlansági reláció a $\Delta p \cdot \Delta x \geq 0$ alakra módosul, mely nem ad semmilyen megszorítást, s így érthetővé válik, hogy a minimális energiaérték 0 is lehet, ahogy a klasszikus fizikában várjuk.

9. Személyes élményeim, összegzés

Kvantummechanikai tanulmányaim során vetődött fel a rengeteg kérdés, melyet a dolgozat tárgyal. Természetesen a gondolat csírái már megindultak bennem korábbi tanulmányoknál, de a lényegi megértése a dolgoknak ekkor következett be, hiszen mint a bevezetőben írtam, a kvantummechanikában annyi minden újszerű, hogy sokkal könnyebben vetjük le magunkról az érzékszerveink által nyert világképet. E gondolatok amellett, hogy nagyon hasznos tudást adtak a tudományos szemlélethez, az érdeklődésemet is jobban felkeltette a fizika iránt. A feladatsorokon szereplő kitűzött példák megoldására sok esetben nem a gyakorlat elvégzése, hanem a kíváncsiság vezérelt. Úgy gondolom, a fizikatanár-képzésben szükséges, hogy ne csak pedagógiai ismereteink legyenek megfelelőek, hanem tudományos látásmódunk egy fizikuséval hasonló szintre emelkedjen a megfelelő tudományos hozzáállás és szemlélet érdekében. Ezt a kvantummechanikai (és erre épülő) tárgyak elvégzése nélkül sosem értem volna el.

Korunkban az áltudományok térnyerésének az egyik legerősebb táptalaja a bonyolult, modern fizikai jelenségeknek valóságot mellőző meseszerű tárgyalása. Az ilyen gondolatok „hitelességét” azonban az is erősíti, hogy a természettudományok is sokszor „abszurdnak” tűnő állításokat tesznek. Így egy nem megfelelő képesítésű ember nehezen képes a kettő közötti különbségtételre.

Személyes élményeimhez tartozik, hogy elsőként találkoztam olyan tételekkel vizsgára való felkészülés során, melyeknek megtanulása nem igényelt időt és erőfeszítést. Az élvezet és kíváncsiság miatt első olvasásra megértettem és megtanultam „az átlagértékek időbeli változása, a klasszikus mechanikával való kapcsolat” című tételt, melyben például az Ehrenfest-tétel került tárgyalásra. Mi sem volt izgalmasabb, mint elsőként tanulmányozni életem során tisztán matematikai eszközökkel, hogy a kvantummechanika határeseteként visszakapható a klasszikus fizika. Meglepő volt, mikor a korábban nem értett fizikakönyv bracket írásmódját kvantummechanikai ismeretek olvashatóvá tették számomra. Egy olyan kapu nyílt ki az új ismeretek által, melynek segítségével behatóan lehet tanulmányozni szinte bármely fizikával kapcsolatos szakirodalmat.

Ugyanígy hasonló örömet okozott nekem, mikor különböző baráti beszélgetések kapcsán kvantummechanikai állításokat és hasonlóságokat említettem meg a hétköznapi életünkkel kapcsolatban, így elnyerve barátaim figyelmét egy számukra ismeretlen nézőpontról. Világlátásomra és életemre is komoly hatást gyakorolt a tárgy elvégzése, és azóta is rendületlenül tart érdeklődésem a fizika tudománya iránt. Ha tanárként különböző tudománytörténeti anyagokat, például a természettudományok nagyjainak életük végén írt visszaemlékezéseit és esszéit olvassuk, elengedhetetlen számunkra a megfelelő kvantummechanikai ismeret. Hiszen, hogy is érthetnénk meg igazán egy egyszerű gondolat mondanivalóját, ha számításokkal nem győződünk meg az állítás helyességéről. Miért is ne szeretnénk saját példáinkon keresztül meggyőződni a deduktív úton nyert igazság bizonyosságáról? Hogyan élhetné át olyan mélyen egy fizikát nem értő ember Ottlik szavait, mint mi? Vajon akkor is ennyire élveztem volna a mű olvasását, mikor még csak elsőéves hallgató voltam? Ezen írásokból nyert mély bölcsességeket tanításunkhoz is becsempészhetünk leegyszerűsített formába. Fizikatanárként elengedhetetlen számunkra, hogy diákjainknak átadjuk a természettudományok működési elvét, megadni azt a szemléletet, melynek segítségével önmagukban képesek lesznek eldönteni egy interneten talált cikk hitelességét.

A dolgozat alcímébe feltett kérdésre a következő gondolatok szolgálhatnak válaszként, melyeket ajánlok hallgatótársaim figyelmébe a tárgy tanulása során:

- A kvantummechanika egyike azon területeknek, melynek kapcsán nincsenek hétköznapi tapasztalataink. A fizika ezen területének művelése újszerű hozzáállást igényel.
- Ennek a tudományterületnek a megismerésénél közvetett műszeres tapasztalatokra kell hagyatkoznunk, s ezáltal érthetjük meg igazán, miért is fontosak kísérleteink. Emellet a természettudományok működésének lényegi megértése is igazán itt következhet be, miközben az ember átérzi a matematikai és fizikai gondolkozás különbségét is.
- A hullám-részecske kettőség és ezzel együttjáró valószínűségi értelmezés fontos szemléletváltoztatást eredményez. El kell fogadnunk, hogy az egyedi kísérletek kimenetele véletlenszerű, de számos kísérlet megismétlésével valószínűségeloszlást kapunk, mely egyértelmű és jósolható matematikai leírás segítségével. Megértjük, hogy a valószínűségi törvény is törvény.
- Elsajátítható a Schrödinger-egyenlet megoldása során egy olyan fizikafeladatokat alapvetően jellemző aspektus, miszerint lépéseinket a valóság folyamatos egyeztetésével tesszük meg. Emellett a numerikus feladatmegoldással is megismerkedhetünk, mely alapvető fontosságú a természettudományos gondolkozás kifejlődéséhez, s ennek ismerete kiemelten fontos, ha olyan diákokat tanítunk, akik fizikusi vagy mérnöki pályára készülnek.
- A mai mérnöki tudomány alapját képezi a kvantumjelenségek kihasználása. Ilyen bármilyen modern technikai eszköz, vagy a jövőben nagy lehetőségekkel kecsegtető

kvantumszámítógépek fejlesztése. Ezen területekhez való minimális ismeretek elvárhatók egy fizikatanártól.

- Az alsó energiaszintek éles elválása alapján megérthetjük, hogy bizonyos hőmérséklet alatt egyes szabadsági fokok befagynak. A kvantummechanika következménye ugyanis, hogy minden jelenség beindulásához véges energia kell, addig amíg a T hőmérsékletű környezetet jellemző kT (k a Boltzmann-állandó) termikus energia kisebb ennél, olyan mintha a mozgásforma nem is létezne. Így lehetséges, hogy szobahőmérsékleten nem érezzük az atomok, atommagok, kvarkok létezését, tehát nem kell mindent ismernünk.
- A kvantummechanika eredményei olyan, kevesek által ismert kulturális kincsei a világnak, amelyeket tanári kötelességünk megismerni. Úgy gondolom, hogy ezek az ismeretek a természetet tisztelő, 21. századi gondolkodás alapvető elemei, melyeket kifejezetten alkalmazhatunk az aktuális világ súlyos tévhiteivel szemben, ezzel megerősítve felelős gondolkozásunkat. Ezeknek köszönhetően az ember még a newtoni mechanika tárgyalását is alázatosabban és szellemesebben adja elő.

10. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönettel tartozom témavezetőimnek: Tél Tamásnak és Vincze Miklósnak, akik fontos szerepet játszanak a fizikatanár-képzés színvonalának emelésében, s sokat segítettek a dolgozat megírásában is. Továbbá

- Dósa Eszter fizika-kémia tanárszakos hallgatótársamnak
- édesanyámnak, Kiss Gyöngyi magyar-orosz-német szakos tanárnak,
- Szabó Róbert fizika-történelem tanárszakos hallgatótársamnak,
- nővéremnek, Tóth Bernadett informatikusnak,
- nagybátyámnak, Tóth István Konstantin OSB matematika-fizika-filozófia tanárnak,
- édesapámnak, Tóth Tamás matematika-fizika-számítástechnika tanárnak,

akik gondosan átolvasták az írást, és hasznos tanácsokkal láttak el.

Hálával tartozom Gnädig Péter egyetemi docensnek, hogy kérésemre elmondta újból a *4.1 fejezet* autós szemléletes példáját, és Szeibert Janka matematika-fizika tanárszakos hallgató-társamnak, hogy rendelkezésemre juttatta előadásának anyagát, amelyben a *8. fejezet* KöMal példáját diszkutálta.

11. FÜGGELÉK

11.1 MIT ÜZENHET A KVANTUMMECHANIKA A KÖZÉPISKOLÁSOKNAK?

Dolgozatom elsődleges célja nem a közoktatással kapcsolatos, személyes tapasztalataim alapján mégis megfogalmazható néhány olyan gondolat, amely a modern fizika iskolaival tanításával kapcsolatosan napjainkban hasznos lehet.

Bár a nyolcvanas évek végén a magyar közoktatás megkísérelte a kvantummechanika részletes tanítását[29], erről ma szó sem lehet. A kísérlet nem váltotta be a hozzáfűzött reményeket, mert jelentősen meghaladta az átlagos gimnazista absztrakciós szintjét, illetve a szaktanárok többségének szaktudását. Másrészt az azóta folyamatosan csökkenő fizika-óraszám miatt erre idő sem áll rendelkezésre, s a 2018-as NAT-tervezet sem fektet különösebb hangsúlyt erre a területre. Ezért véleményem szerint ma a közoktatásban a *fogalmi háttér pontos megfogalmazására* lenne érdemes koncentrálni, hiszen a dolgozat személyes megközelítése is azt mutatja, hogy a fogalmi háttér megértése elengedhetetlen a téma igazi megértéséhez. Itt csak röviden felsorolok néhány ilyen jellegű gondolatot:

A diákokkal meg kell értetnünk, hogy a mikrovilág jelenségei kapcsán *meglepetésekre* kell számítaniuk, hiszen nem támaszkodhatunk hétköznapi tapasztalatainkra, melyek mind a makrovilággal kapcsolatosak. E jelenségek értelmezése – a természettudományos megközelítés általános szabályai szerint – a kísérleti tapasztalatokkal összhangban levő, óhatatlanul újszerűnek tűnő fogalmak alapján történik.

Ezek közül az egyik legfontosabb, hogy a mikrorészecskékkel kapcsolatos egyedi kísérletek kimenetele mindig véletlenszerű, sok azonos kísérlet megismétlése alapján azonban a lehetséges eredmények bekövetkezési *valószínűségét* pontosan meg lehet határozni. (A Schrödinger-egyenlet végső soron ilyen valószínűséget ad meg a ψ hullámfüggvény, ill. annak abszolút négyzete révén).

A *hullám-részecske kettőség* ennek az általános szabálynak a megnyilvánulása, miszerint az egyedi kíséreltek részecsketulajdonságot mutatnak, a hullámtulajdonság ezek sokaságában mutatkozik meg.

A *kétréses kísérlet* külön figyelmet érdemel, mert ma már minden osztályban levetíthető az egyik eredeti kísérlet eredményeit bemutató videó [4], melyben eleinte véletlennek tűnő egyedi részecske-becsapódásokat látunk, de az idő múlásával, az események számának

[29] Tóth 1996.

növekedésével észrevesszük a beütések sávokban történő sűrűsödését, a hullámokra jellemző interferenciát.

Fontos hangsúlyozni, hogy a *de Broglie-hullámhossz* a sok azonos mikrorészecske összességére jellemző hullámfüggvény térbeli periodicitását adja meg, de csak a környezetükkel kölcsön nem ható esetben. (Ezért egy ember vagy autó hullámhossza bár a képlet szerint kiszámítható, nem értelmezhető, hiszen a makroszkopikus testek mindig erősen kölcsönhatnak környezetükkel.) Amikor egy mikrorészecske olyan erőtérrel hat kölcsön, amely azt egy véges térrészben igyekszik tartani, akkor a hullámfüggvény csak ebben a tartományban hullámzik jelentősen.

A *dobozba zárt részecske* példáján megmutathatjuk, hogy az hasonló a megpendített húron kialakuló alaphang ill. felhangjai esetéhez, csak míg ebben az esetben a frekvenciák vehetnek fel adott diszkrét értékeket, addig a részecske esetében az energia: ezért mondjuk, hogy az energia kvantált. Minél nagyobb az összenergia, annál sűrűbben hullámzik a hullámfüggvény, hiszen annál nagyobb az impulzus abszolútértéke is.

A hullámfüggvény hullámzásából következően *a megtalálási valószínűség bizonyos helyeken sűrűsödik*. Térben kiterjedt problémákban, pl. atomok lehetséges energiájú állapotaiban az elektronok megtalálási sűrűsége is csak bizonyos tartományokban jelentős, melyek térbeli szerkezetet mutatnak. Ezzel magyarázható a *kémiai kötés és annak irányítottsága* (pl. a vegyiértékszög). Fontos tanítványainkban tudatosítani, hogy a klasszikus fizika, de még a Bohr-elmélet sem képes a kémiai kötést és a molekulák szerkezetét magyarázni.

Ha az erőtér összetartó ugyan, de nagy távolságban gyengül, akkor az összetartásra kijelölt tartományból a részecske kiszökhet, és messzire eltávolodhat. Ez az *alagúteffektus*, mely klasszikusan nem létezik, de sok kísérleti tapasztalattal összhangban van, magyarázza pl. a radioaktív bomlást.

A *határozatlansági reláció* kizárja, hogy a mikrovilágban a hely és az impulzus egyszerre pontosan meghatározható lenne. Ez is a valószínűségi tulajdonság egyik következménye. A reláció nem a mérőműszereink mérnöki pontatlanságból adódó hibájára vonatkozik, hiszen egy méréstől független állítás. Emellett rávilágít arra is, hogy ez nem korlátja világunk megismerhetőségének, hanem a mikrovilágra jellemző új tulajdonság.

Ebből következik, hogy a legalacsonyabb energiájú állapot, *az alapállap energiája sohasem 0*, hiszen nyugalmi állapot, melyben az impulzus pontosan nulla lenne véges kiterjedésű rendszerben, a határozatlansági reláció miatt nem lehetséges, szemben a klasszikus esetekkel.

Az energia kvantáltsága megmagyarázza a fizika és az egész természettudomány egyik fontos sajátságát, miszerint a tudományterületek jól szétválnak. Egyes mozgásformák ugyanis adott hőmérsékletű környezetben nem valósulnak meg egészen addig, amíg a környezetből származó tipikus kT termikus energia nem elegendő az első gerjesztett állapot eléréséhez. Ezért van az pl., hogy a kémia megértéséhez nincs szükség az atommag ismeretére, a kvarkokról nem is beszélve.

Fontos hangsúlyoznunk azt is, hogy a kvantummechanika lényegében *lezárt területe* a fizikának, mely határesetben visszaadja az egész klasszikus fizikát. Tapasztalataim szerint a kvantummechanikával egyáltalán nem foglalkozó hallgatók körében gyakori az a gondolat, miszerint ezen területe a fizikának még egy nyílt probléma, ezért a klasszikus fizikával sincs összhangban.

A fenti gondolatokat az elolvasott középiskolás tankönyvekben[30] [31] tiszta megfogalmazásban nem találtam meg, pedig fontos alapokat jelentenek a kvantummechanikai szemlélethez és ezekhez kapcsolódó feladatok megoldásához.

[30] (Dégen, Elblinger, Simon 2015)

[31] (Halász, Jurisits, Szűcs 2012)

11.2. EGY HASZNOS KVANTUMMECHANIKAI FELADAT

11.2.1. DIMENZIÓTLANÍTÁS

A feladat megoldása előtt végezzük el a Schrödinger-egyenlet dimenziótlanítását. Azonkívül, hogy ez a lépés megkönnyíti számolásunkat, ezt a későbbiekben sem kerülhetjük el, ugyanis a számítógépes modellezés nem teszi lehetővé a különböző mértékegységekkel való szimulálást, számolást. A numerikus megoldásról már az *4. fejezetben* is beszéltem, megismerését pedig azért tartom hasznosnak, mert fontos szerepet tölt be a matematika természettudományokban való alkalmazásának módjáról. A megoldások során olyan számítógépes eszközöket is használok, mint a WolframAlpha, illetve GeoGebra. Ezek használatának elsajátításával látványos dolgokat vihetünk be középiskolai oktatásunkba.

Ha deriválunk egy mennyiséget hely szerint, akkor a mennyiség egy hosszúság dimenzióval elosztódik, ami legyen a potenciálgödör jellegzetes L mérete. Ezért a kétszeres hely szerinti deriválásból L^2 kiemelhető, ha x-en az L egységekben mért dimenziótlan hosszúságot értjük. A (3.1) Schrödinger egyenlet dimenziótlan alakja így:

$$\frac{-\hbar^2}{2mL^2}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V)\psi, \tag{11.1}$$

ahol $\hbar^2/2mL^2$ mértékegysége J. Átrendezve az egyenletet:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{V}{\frac{\hbar^2}{2mL^2}} - \frac{E}{\frac{\hbar^2}{2mL^2}}\right)\psi. \tag{11.2}$$

Legyen a dimenziótlan potenciál, illetve energia:

$$v := \frac{V}{\frac{\hbar^2}{2mL^2}}\ ; \tag{11.3}$$

$$\varepsilon := \frac{E}{\frac{\hbar^2}{2mL^2}}. \tag{11.4}$$

Így a Schrödinger egyenlet dimenziótlan alakja a következő:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (v(x) - \epsilon)\psi. \tag{11.5}$$

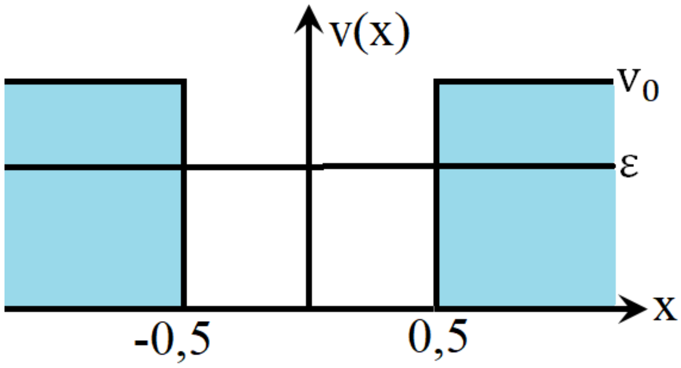
Megjegyzés: a $\frac{\hbar^2}{2mL^2}$ energiaegység nagyságrendje $L = 1$ Å-mel és az elektron tömegével számolva $6 \cdot 10^{-19}$ J, mely az atomi világ tipikus eV energiájának nagyságrendje.

11.2.2. VÉGES, SZIMMETRIKUS POTENCIÁLGÖDÖRBEN MOZGÓ RÉSZECSKE

Legyen a dimenziótlan potenciál

$$v(x) = \begin{cases} 0, \text{ha} -0{,}5 \le x \le 0{,}5 \\ v_0 \text{ különben} \end{cases}$$

ami véges, v_0 magasságú gödörnek felel meg, ahogy a *11.1 ábra* mutatja.



11.1 ábra: A véges, szimmetrikus potenciálgödör alakja.

A (11.5) egyenletben keressük a ε energia lehetséges értékeit és a hozzájuk tartozó ψ hullámfüggvényeket. Vezessük be a következő jelöléseket:

$$k^2 := \varepsilon\,; \tag{11.6}$$

$$\alpha^2 := v_0 - \varepsilon = v_0 - k^2. \tag{11.7}$$

A (11.5) egyenlet alakját figyelembe véve az $x = 0$ helyeken a hullámfüggvény szinuszos vagy koszinuszos lehet, hiszen a második derivált arányos önmaga ellentettjével. A szinuszos alakú hullámfüggvény az aszimmetrikus megoldás, a koszinuszost pedig szimmetrikus megoldás.

Itt fontosnak tartom megjegyezni, hogy a pongyolának tűnő megoldás során erősen kihasználtuk, hogy a kvantummechanikai leírásmód helyesen írja le a jelenségeket. Felhasználtuk, hogy ha van megoldás, annak milyennek kell lennie, ugyanis, ha ez nem teljesülne, gond lenne a törvényeinkkel. A legtöbb szakirodalom ezeket a megoldásokat hosszú differenciálegyenletek megoldása során egyenletrendezésekkel és folytonossági feltételekkel nyeri, tisztán matematikai úton. Úgy gondolom, fizikatanárként el kell sajátítani ezt a megoldási szemléletet is. Lev Davidovics Landautól származik egy idézet, miszerint egy problémának addig nem is érdemes nekiállni, amíg nem tudjuk a megoldást. Ezt úgy értette, hogy fizikai megérzéssel, egyszerű elméleti megfontolásokkal vagy modellekkel próbálunk egy képet kapni arról, mi is történik.

A szimmetrikus megoldás

A (11.5) differenciálegyenlet szimmetrikus megoldása a következő lehet:

$$\psi = A \cdot \cos(kx), \qquad \text{ha} - 0{,}5 \leq x \leq + 0{,}5, \tag{11.8}$$

$$\psi = B \cdot e^{-\alpha x}, \qquad x > 0{,}5, \tag{11.9}$$

és $x < 0{,}5$-re szimmetrikusan. A (11.8) megoldást az előbb már részleteztük, a (11.9) pedig a $v_0 > \varepsilon$ feltételnek köszönhető, mely szerint (11.5)-ben a hullámfüggvény második deriváltja arányos önmagával, ezt pedig az exponenciális függvény teljesíti, melynek lecsengőnek kell lennie.

Most vegyük a különböző tartományokon vett hullámfüggvények deriváltját:

$$\psi' = -Ak \cdot \sin(kx), \qquad \text{ha} - 0{,}5 \leq x \leq + 0{,}5, \tag{11.10}$$

$$\psi' = -B\alpha \cdot e^{-\alpha x}, \qquad \text{ha } x > 0{,}5. \tag{11.11}$$

Mivel a hullámfüggvénynek teljesítenie kell a folytonosságot, a (11.8) és (11.9) egyenleteknek az $x = \pm 0{,}5$ helyeken egyenlőnek kell lenniük. Ezt felírva a következő összefüggést kaphatjuk:

$$A \cdot \cos\left(\frac{k}{2}\right) = B \cdot e^{-\frac{\alpha}{2}}. \tag{11.12}$$

Ezek szerint az A és B amplitúdok arányát az energia k értéke meghatározza majd. A hullámfüggvénynek simának kell lennie, azaz a deriváltfüggvényeknek is folytonosságot kell teljesíteniük az $x = \pm 0{,}5$ helyeken, ezért a (11.10) illetve (11.11) egyenletek $x = 0{,}5$ helyen vett egyenlősége miatt teljesül az alábbi összefüggés:

$$-Ak \cdot \sin\left(\frac{k}{2}\right) = -B\alpha e^{-\frac{\alpha}{2}}. \tag{11.13}$$

A (11.13) és (11.12) hányadosát képezve:

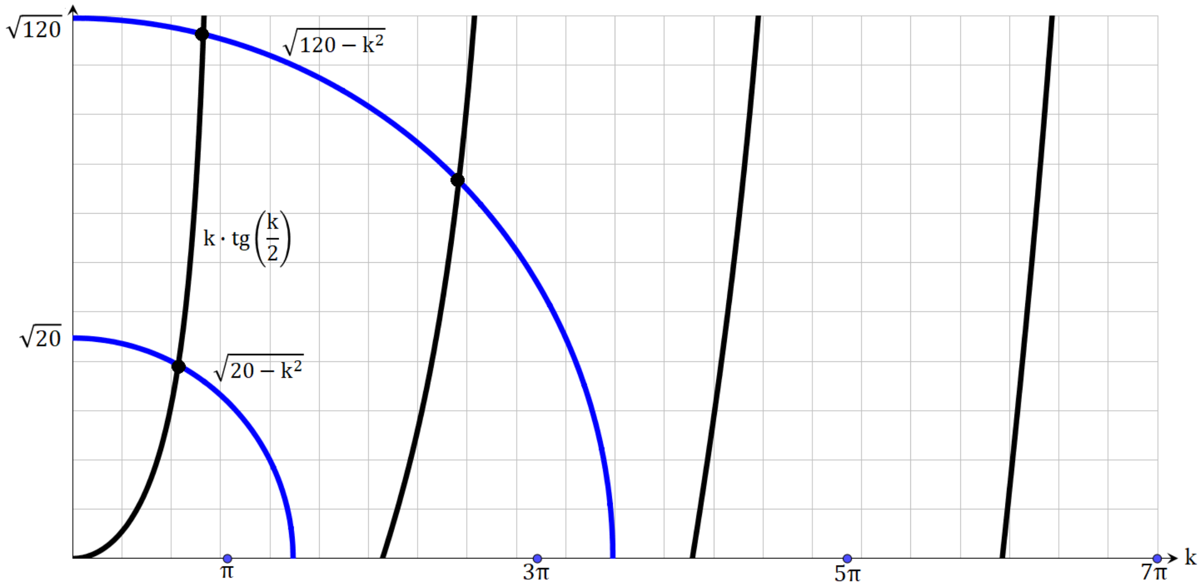
$$k \cdot \mathrm{tg}\left(\frac{k}{2}\right) = \alpha. \tag{11.14}$$

Majd a (11.7) által definiált α-ra vonatkozó összefüggés felhasználásával a következő összefüggésre jutunk:

$$k \cdot \mathrm{tg}\left(\frac{k}{2}\right) = \sqrt{v_0 - k^2.} \tag{11.15}$$

Jól látszik, hogy sikeresen felírtunk egy egyenletet, melyben már csak az energiát meghatározó $k = \sqrt{\varepsilon}$ ismeretlen szerepel.

Megoldása a bonyolultsága miatt grafikusan vagy numerikusan történhet, olyan k jöhet szóba, mely kielégíti az egyenletet, melyből a lehetséges energia értékek meghatározhatóak. A tangenses kifejezés (bal oldal) és $\sqrt{v_0}$ sugarú kört jelentő gyökfüggvény (jobb oldal) ábrázolásakor (*11.2 ábra*) észrevehetjük, hogy a két grafikonnak minden v_0 feltétel esetén lesz metszése. Tehát bármilyen kicsi is a potenciálgödör mérete, egy szimmetrikus hullámfüggvény mindig létezni fog, nagyobb gödrök esetében pedig új megoldások is szóba jönnek. Az ábra jól illusztrálja, hogy adott gödör (v_0 érték) esetén csak néhány metszéspont (fekete pontok) létezik, azaz csak véges számú, és élesen elváló energiaérték lehetséges.



11.2 ábra: A véges potenciálgödörben mozgó részecske ε energiájára $k = \sqrt{\varepsilon}$ felírt (11.15) egyenlet grafikus ábrázolása. Szépen látszódik, hogy akármilyen v_0 kezdőfeltétel megadásánál lesz metszete a két grafikonnak, azaz minden gödörhöz tartozik egy k^2 energiasajátérték. A rajzot a GeoGebra nevezetű számítógépes program segítségével készítettem, melynek ismerete nagyban hozzájárul a fizika- és matematika-tanárok színvonalas oktatásához, ismeretét mindenkinek nagyon ajánlom.

Ezt a megállapítást ellenőrizhetjük a WolframAlpha internetes programmal is. Ha a gödör dimenziótlan magasságának v_0 kezdőfeltételének 20-at adunk meg, akkor a program segítségével numerikusan szerzett k értékre 2,14 adódik, azaz $\varepsilon_1 = 4{,}59$. Azonban, ha 120-at, akkor két megoldás is lesz: $k = 2{,}65$, illetve $k = 7{,}83$, amivel $\varepsilon_1 = 7{,}03$ és $\varepsilon_3 = 61{,}3$. Természetesen, ha a v_0 értékét növelem, akkor a *11.2 ábrán* található negyedkör sugara nő, tehát több helyen is elmetszi a tangens függvényt. Ha a $v_0 \gg 1$ de k véges esetet vizsgáljuk, akkor a (11.15) egyenletben a $k \cdot \mathrm{tg}\left(\frac{k}{2}\right)$ érték közel végtelen lesz, vagyis $\frac{k}{2} = n \cdot \left(\frac{\pi}{2}\right)$, amiből a $k^2 = \varepsilon_n = \pi^2 n^2$, ahol n páratlan. Így visszakapjuk a végtelen mély potenciál doboz páratlan megoldásait (mely eredményt (7.12) egyenletben fejeztünk ki) $\frac{\hbar^2}{2mL^2}$ energiaegységekben.

Végtelen sok energiaérték csak a végtelen mély potenciálgödörben lehetséges. A konvergencia folyamatát, egyre nagyobb v_0 értékeket véve, a 11.1 táblázat érzékelteti.

v_0	ε_1	ε_3	ε_5	ε_7
20	4,59			
120	7,03	61,3		
200	7,56	67,1	176	
500	8,31	74,5	205	393
∞	9,87	88,8	247	484

11.1 táblázat: Különböző v_0 gödör-magasságok mellett a lehetséges energiasajátértékek $\frac{\hbar^2}{2mL^2}$ energiaegységekben. Megfigyelhető, hogy az egyre magasabb (nagyobb v_0) gödrök esetén a megoldások közelítenek a végtelen mély gödör megoldásaihoz. A numerikus számításokat a WolframAlpha segítségével végeztem el.

Hasonló meggondolásokkal megkaphatóak az aszimmetrikus megoldások is. Ezt a dolgozatom már nem tartalmazza.

„Tudományos módszer az, ahogy az alkotó tudósok dolgoznak, nem pedig az, amit mások vagy esetleg éppen ők maguk mondanak erre vonatkozóan."[32] *(Percy W. Bridgman)*

11.3 Hogyan működik a természettudomány?

11.3.1 Az induktív módszer

„A (természet)tudományos „igazság" kizárólagos kritériuma a kísérlet."[33] *(R.P. Feynman)*

A tudomány működésének megértése feltétlen szükséges fizikatanári szempont. Az internet térnyerésével az áltudományok híveinek írásait jövendő diákjaink is megismerhetik, és háttérismereteik hiányából következően téves képet kaphatnak a világról. Ilyen téveszmék következménye például ha már a kvantummechanikát tárgyaljuk: a nullponti energia kivonása a vákuumból. A fizikatanárok természettudományos ismereteik segíthetik ezek cáfolatát.

A természettudományos törvények megalkotásának magától értetődő módja az induktív módszer. Ha a törvényeinket felismertük, akkor elvileg tisztán elméleti úton, deduktívan levezethetjük összes jelenségünket. A kísérleti fizika által használt induktív módszer lényege, hogy a tapasztalataink és kísérleteink által nyert információhalmazból ismerünk fel fizika törvényt, azaz *„a közös vonások kiemelésével keressük meg az általánosat, a törvényszerűséget. […] Könnyen beláthatjuk azonban, hogy az induktív úton nyert törvények sohasem adnak teljes bizonyosságot jövőbeni érvényességükre. A törvény – éppen általánosságánál fogva – végtelen sok egyedi esetet tartalmaz"*.[34] Ahhoz, hogy matematikai értelemben a törvény igazságát bizonyítsuk, a világ összes eseményén ellenőrizni kellene azt. Ám ez abszurd és lehetetlen feladat. Hiszen, ha azt akarnánk bizonyítani, hogy egy pár méter magasra feldobott kő leesik, azt végtelenszer kellene elvégeznünk, minden időpillanatban, tehát most is csak köveket dobálhatnánk. Így a természettudományok nem a bizonyításra helyezik a hangsúlyt, hanem a cáfolásra. *„Úgy szokás kifejezni, hogy egy természettörvény nem verifikálható, viszont falzifikálható"*.[35] Azaz nem bizonyítható, de magában hordozza a cáfolás lehetőségét. Pontosan ennek a bizonyításnak a hiánya miatt van akkora szerepe annak, hogy egy törvényből deduktív úton levezetett jelenséget *kísérletileg* is igazolnunk kell.

Szembeötlő, mennyire máshogy működik egy természettudományos igazság a matematikához képest. Egy esetleges elmélet megdöntése sem feltétlen annak érvénytelenségét,

[32] (Simonyi 2011:31)

[33] (Feynman 1968:13-14)

[34] (Simonyi 2011:29-30)

[35] (Simonyi 2011:30)

hanem inkább érvényességi körének határait jelöli ki[36], melyre kiváló példa a newtoni mechanika. Mégis csodálatra méltó, hogy a törvények működnek, eddig sikeresen helytálltak és leírták a valóságot deduktív úton is, melyről mi, hallgatók, az elméleti fizikai tanulmányaink során nyerhetünk bizonyosságot. Egyenleteink felírásánál mindig áhítattal csodálkozom el a természet ezen tulajdonságán.

A *2. fejezet* elején található Károlyházy Frigyes idézet ezek megértése után értelmezhető. A kvantummechanikával az ember egy olyan tudományterületre tévedhet, melyhez klasszikus fizikai szemléletünk kevés. A természet elképesztő, ugyanis a mikrovilág működése hétköznapi tapasztalatainktól teljesen eltérő módon zajlik, de ettől még ez az igazság. A „józan ész" az az előítélet-gyűjtemény, amit az ember 18 éves koráig magára szed[37], s emellé társulnak az evolúció által belénk égett biológiai képességeink. Ám a természet mégis ilyen. Így kijelenthető, hogy a fizikai világ matematikai eszközökkel írható le, túllépve az idegrendszer ösztönös tudásán.

11.3.2 A MATEMATIKA ÉS FIZIKA KÜLÖNBSÉGÉRŐL

Evolúciós alapon olyan világ megismeréséhez és megértéséhez alakultak ki az érzékszerveink és agyunk, mely emberi méretskálán és sebességtartományban működőképes. Egy kőről az a tapasztalatunk, hogy egy tömör, kemény anyag, melyen nem tudunk áthatolni. Ám az atomokról alkotott ismeretünk azt mondja, hogy a kő nagy része tulajdonképpen légüres tér. Hiszen ismerjük a hasonlatot: ha egy stadion az atom, akkor a közepén szálló légy az atommag mérete. Ez a kép azt sugallja nekünk: a kő tulajdonképpen inkább semmi, mintsem anyag. Egy neutrínó a követ inkább látná légüres térnek, mintsem tömör anyagnak?

Természetesen a kő a belső kölcsönhatásai révén számunkra kemény anyagnak tűnik. Viszont ami számunkra nagy sűrűséget jelent, az a neutrínók világában mit is érhetne? Ez egyben megmagyarázza, miért nincs értelme a sűrűség fogalmának atomi méretskálán. Ebben a mérettartományban értelmét veszti, hiszen itt sűrűségként vagy nullát (légüres teret), vagy „végtelent" (atommagot) mérünk. Ez a fogalom matematikai értelembe vett „pontatlanságát" tükrözi, és rámutat a matematika és fizika közötti különbségekre. A sűrűség általános fogal-

[36] (Simonyi 2011:30)

[37] Albert Einstein gondolata, mely a modern fizika teljesen más működésére utal, mint amit az ember a hétköznapjaiban megszokott.

mát jól ismerjük: $\rho = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{\Delta m}{\Delta V} = \frac{dm}{dV}$[38], melynek jelentése, hogy mennyi tömeg jut egy infinitezimálisán kis térfogatra. De egzaktul nem tehetem fel, hogy $dV \to 0$ a korábbi példa alapján. Mi mégis így használjuk és tanítjuk, pedig a klasszikus fizika fogalmai nem feltétlenül használhatóak a mikrovilágban. Fizikusként számunkra az emberi skálán az atomi méretek ténylegesen nullának vehetőek, mérőberendezéseink úgysem mutatnának ki semmit A $|\psi|^2$ valószínűségsűrűséget viszont az emberi skálán nehéz alkalmazni. Természetesen a végtelen fogalmát is, a nullához hasonlóan, másképpen használtam előbbi állításomban, ugyanis fizikusként ennek a fogalomnak is új értelmet tulajdoníthatunk: a nagyon nagy, illetve kicsi számokat. S ezen elhanyagolások után talán még jobban átélhetjük Pascalnak azt az emberről tett fontos megállapítását, mely így hangzik:

„Mert mi az ember a természetben? Semmi a végtelenhez képest, minden a semmihez képes. Valami a semmi és minden közt, a középen…”[39]

Láthattuk, mennyire más a fizikus szemlélete a világ megismeréséről. Nem véletlen mondhatta T. Sós Vera, kiváló matematikusnő a következőt, mely jól jelzi, mennyire más a matematikai szemlélet:

„A megismerés, a megértés, az alkotás öröme a tudományokban közös. Az igazság megtalálásának módja különböző. A matematikában szigorú logikai következtetés során lesz egy sejtés igazolásából vagy annak cáfolatából tétel. Itt a szobában ülve, a külvilágtól függetlenül eldönthetem, igaz vagy sem Ez önmagában is vonzó, hiszen a világban annyi minden bizonytalan.”[40]

Vessük össze a fenti idézeteket Feynman gondolatával, aki igazi fizikusként ezt az elvet vallotta:

„Együtt tudok élni a kétellyel, bizonytalansággal és nemtudással. Sokkal érdekesebb a nemtudással együtt élni, mint rossz válaszokkal.”[41]

De más különös is van benne, mellyel eddig nem találkoztunk. A hullámfüggvény a komplex függvények halmazán van értelmezve. Korábbiakban a komplex számok használata csak segédeszközként jelent meg a fizikában. Gondoljunk csak a rezgésekre, ahol bonyolult

[38] A sűrűség azon alakját, hogy $\rho = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{\Delta m}{\Delta V}$, kevésbé tartom szemléletesnek, ugyanis ez éppen azt sugallja, hogy a térfogattal bármennyire megközelíthetem a zérus méretet. Ezért én előnyben részesítem a $\frac{dm}{dV}$ alakot.

[39] (Simonyi 2011:560)

[40] (Staar 2002:42)

[41] Szabadfordítás a Richard Feynman: The Pleasure of Finding Things Out című filmből.

addíciós képletek helyett a komplex számokkal való műveletvégzés jóval egyszerűbb. Mily érdekes, hogy ez a szellemi párbaj nyomán született számkör, melynek célja a harmadfokú egyenletek megoldása volt, természeti törvény szintjén jelenik meg több száz évvel később a természettudományokban. Nem csoda, hogy Wigner szavaival *„mennyire „meghökkentő" a matematika hatékonysága a fizikában és általában a természettudományokban."* Ugyanígy Feynman: *„teljesen elképesztő, hogy a matematikával előre meg lehet mondani, mi fog történni a világban, pedig a matematika olyan szabályokat követ, amelyeknek semmi közük ahhoz, ami a valóságban végbemegy".*[42] Heisenberg pedig így szólt erről:

„Emlékszem, hogy volt egy beszélgetés Niels Bohrral, amikor ő kétségbe vonta, hogy egyáltalán fog-e találni a jelenségek számára adekvált matematikai leírást. Úgy érezte, hogy a természet esetleg annyira irracionális, hogy egyszerűen semmiféle matematikai leírás kereteibe nem szorítható bele. Így teljesen meg volt lepve, mikor az derült ki, hogy igenis van matematikai leírás..." [43]

Egy ilyen rejtélyes világ kutatásának elengedhetetlen feltétele az alapok újratárgyalása és azok mélyebb megértése. Láthatjuk, hogy aki a kvantummechanikában jártas, az mélyebben érti a klasszikus fizika alaptéziseit is. Talán érezzük, mennyire elengedhetetlenek az alábbi gondolatok egy jó fizikatanár fejében. Úgy gondolom, mikor egy egyszerű Newton-egyenletet felírunk, ezeknek a gondolatoknak végig kell futniuk a fejünkben, és így nem pusztán matematikai jeleket írunk fel, hanem többezer éves tudást és tapasztalatot. Mondhatni „lelket" adunk még az egyszerű feladatnak is.

Nem véletlen fordul elő, hogy egy egyetemi előadás után hazafelé a villamoson ülve az ember csak meredten néz előre, próbálja befogadni ezt a tömény információt, mely ellen minden sejtünk első hallásra tiltakozhat.

[42] (Solt 2017:230)

[43] (Simonyi 2011:36)

12. IRODALOMJEGYZÉK

Könyv:

A. P. French & E. F. Taylor 1978. *An introduction to Quantum Physics*. M.I.T. Introductory physics series.

Budó Ágoston 1985. *Kísérleti fizika III. kötet (optika és atomfizika)*. Tankönyvkiadó. Budapest.

Dégen Csaba, Elblinger Ferenc, Simon Péter 2015. *Fizika 11*. OFI. Budapest.

Halász Tibor, Jurisits József, Szűcs József 2012. *Fizika 11*. Mozaik Kiadó. Szeged.

Jánossy Lajos (szerk.) 1971. *Kvantummechanika.* Akadémiai Kiadó. Budapest.

Marx György 1964. *Kvantummechanika*. Műszaki Könyvkiadó. Budapest.

Mihály György 2006. *Mire jó a kvantumfizika?* Mindentudás Egyeteme 2. Kossuth Kiadó Zrt. 241.

M. H. Karapetjanc Sz.I. Drakin 1977. *Az anyag szerkezete*. Tankönyvkiadó. Budapest.

Nagy Károly: *Kvantummechanika.* Nemzeti Tankönyvkiadó. Budapest.

Ottlik Géza 1993. *Buda*. Európa Kiadó. Budapest. 6.

Ottlik Géza 1989. *Valencia rejtély*. Magvető Kiadó. Budapest.

R. P. Feynman 1988. *QED A megszilárdult fény*. Scolar Kiadó.

R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands 1968. *Mai fizika 1*. Műszaki Könyvkiadó. Budapest. 13-14.

Simonyi Károly 2011. *A fizika kultúrtörténete*. Akadémiai Kiadó. 29-31. 36. 464. 459. 560. 567.

Staar Gyula 2002. *Matematikusok és teremtett világuk – beszélgetések*. Vincze Kiadó. Budapest. 42.

Staar Gyula 1991. *Megszállottak – öt magyar fizikus*. Typotex Kiadó. Budapest. 139.

Tasnádi Péter, Skrapits Lajos, Bérces György 2004. *Mechanika I.* Dialóg Campus Kiadó. Budapest.

Tél Tamás, Gruiz Márton 2002. *Kaotikus Dinamika*. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest.

Tóth Eszter 1996. *Fizika IV*. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest.

Folyóiratcikk:

A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki, H. Ezawa 1989. Demonstrataion of single-electron buildup of an interference pattern. *American Journal of Physics*. 57, 117.

Borszuk Adrienn 2018. *Mit üzen Ottlik Géza a fizikatanároknak A Valencia-rejtély című művében? Tantárgyközi integráció a mű kapcsán.* Tudományos Diákköri Dolgozat.

Károlyházi Frigyes 2007/11. Az öcskös felesége. *Fizikai Szemle*. 369.

Középiskolai Matematikai és Fizikai Lapok. 2017/03, 189.

Solt György 2017/05. Miért tudják az elektronok a matematikát? *A Természet Világa*. 230.

Tél Tamás 2012/12. Milyen tudomány a fizika? *A Természet Világa*. 143.

Film:

Richard Feynman 1981. *The Pleasure of Finding Things Out*.

Elektronikus és internetes forrás:

https://www.wolframalpha.com

[1] https://www.quora.com/If-we-could-see-atoms-with-our-naked-eyes-what-would-happen (2019.01.01.)

[2] https://www.drugbank.ca/drugs/DB00073 (2019.01.05.)

[3] https://www.komal.hu/ (2018.12.01.)

[4] https://www.youtube.com/watch?v=_oWRI-LwyC4 (2018.12.29.)