

1) UVOD U PODLOGU ZA KVANTNU FIZIKU

POTREBA ZA REVIZIJOM TEMELJNIH PRETPOSTAVKI KLASIČNE FIZIKE

U dosadašnjoj izgradnji ukupne slike o materijalnom svijetu razvijali smo koncepte takozvane klasične fizike. U temeljima tog pristupa je nekoliko prešutnih pretpostavki, koje nisu istinite na nivou mikrosvijeta. S jedne strane se pretpostavljalo da se objekti i materijali mogu po volji usitnjavati, i da pri tome ti djelići zadržavaju ista kvalitativna svojstva. S druge strane smo vjerovali da se objektima mogu mjeriti takozvane konjugirane opservable (na primjer koordinata i pripadni impuls) s proizvoljnom točnošću. Prvi dio kolegija OF4 koncentrira se na eksperimentalnu prisilu koja nas tjera da odustanemo od tih pretpostavki i objašnjava način kojim je fizika izišla iz naizgled kontradiktornih eksperimentalnih činjenica kroz kvantnu teoriju.

ATOMARNOST MIKROSVIJETA I RASKID S KONTINUITETOM

1) Daltonovi zakoni stalnih omjera u kemijski reakcijama.

Još u srednjoj školi, kroz kemijske pokuse i praćenje kemijskih reakcija, studenti su stekli objektivnu informaciju da se kemijski elementi udružuju u spojeve bez količinskih ostataka jednog od njih, samo za njihove dobro definirane količinske omjere. Ova je činjenica u suglasju s idejom da pri usitnjavanju elementa postoje nedjeljive jedinice (atomi) koji onda u dobro definiranom broju ulaze u molekule. Ako broj atoma nekog elementa prije reakcije nadilazi broj molekula koje će nastati (slučaj da za jednu molekulu treba jedan atom tog elementa), preostali atomi se ne će utrošiti. Takva interpretacija eksperimentalno opaženih Daltonovih zakona utemeljila je kemiju!

2) Faraday-evi zakoni elektrolize

Kada se prolaskom struje kroz otopinu kemijskog spoja razdvaja taj spoj na elemente (elektroliza) količine izlučene tvari su proporcionalne naboju koji je otopinom prošao. Ovo se tumači znatnošću i naboja i spoja i kemijskih elemenata.

3) Brownovo gibanje

Studenti će pod mikroskopom opažati vrludanje makroskopski vidljivih objekata koje je posljedica udaranja oku nevidljivih atoma ili molekula. Na ovom mjestu moramo biti vrlo istiniti ali i oprezni. Do sada, u povijesti znanosti, ljudsko oko nije opazilo izolirani atom. S druge strane atomska hipoteza može objasniti fenomen Brownovog gibanja.

4) Kinetička teorija plinova (utemeljena na pretpostavci da su plinovi zrnaste strukture, pri čemu su konstituenti/osnovni elementi atomi ili molekule) uspješno objašnjava mnoga svojstva plinova. U nastavku ćemo pokazati kako se takozvana plinska jednadžba (jedna od temeljnih termodinamičkih jednadžbi) dobiva iz atomarnosti plinova na elementarno razumljiv način.

5) Plinska jednadžba

Polazna je želja izračunati tlak koji nastaje (unutar kvadra dimenzija L_x, L_y, L_z) radi udaranja atoma i/ili molekula plina u stijenke posude – elastični sudari. Ako masu atoma i x komponentu njegove brzine označimo s : m, v_x , tada je tijekom sudara sa stijenkom u kojem je promijenjena x komponenta brzine stijenka primila impuls:

$$\Delta p_x = 2mv_x \quad (1.1)$$

Vremenski period t , tijekom kojeg je za očekivati, da se sudar desio jest dvije duljine posude u smjeru x podijeljene s nepromijenjenom brzinom u x smjeru:

$$t = 2L_x / v_x \quad (1.2)$$

Komponenta sile u x smjeru koja je rezultat sudaranja sa stijenkom tijekom gibanja u x smjeru:

$$F_x = \frac{2mv_x}{\frac{2L_x}{v_x}} = \frac{mv_x^2}{L_x} \quad (1.3)$$

Kako je za tlak na stijenci okomitoj na x potrebno podijeliti ovu silu s duljinama ostalih dviju stranica posude slijedi:

$$pV = Nmv_x^2 \quad (1.4)$$

Gdje je N ukupni broj čestica u posudi. S druge strane je prosječna energija atoma:

$$\bar{E} = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \frac{3}{2}mv_x^2 \quad (1.5)$$

Gdje posljednja jednakost reprezentira da su brzine svih atoma za sva tri smjera iste.

Tako dobivamo da umnožak tlaka i volumena proporcionalan prosječnoj kinetičkoj energiji atoma (kombinacija dvije posljednje jednadžbe):

$$pV = N \frac{2}{3} \bar{E} \quad (1.6)$$

Prosječna kinetička energija atoma je povezana s temperaturom:

$$\bar{E} = \frac{3}{2} \frac{nR}{N} T \equiv \frac{3}{2} kT \quad (1.7)$$

Ovdje se pojavljuje više termodinamičkih oznaka. Sigurno je da je studentima prihvatljiva proporcionalnost energije atoma i temperature. U kasnijem tijeku studija prihvatit će da svakom stupnju slobode odgovara prosječnoj energiji $\frac{1}{2} kT$, što mogu prihvatiti i kao „definiciju“ mikroskopske konstante k . R je njen makroskopski analogon, (n je broj molova zarobljenog plina) pa je onda R veličina koja ima analogno značenje ali za cijeli mol molekula.

Tako (1.6) prelazi uz (1.7) u poznatu plinsku jednadžbu:

$$pV = nRT \quad (1.8)$$

Možemo jos spomenuti da je ova relacija dobra za plinove male gustoće. Povećanjem tlaka dobivaju se odstupanja. Eksperimentalnim studijem dolazi se do srednjeg slobodnog puta atoma u plinu, a odatle (preko udarnog presjeka) do dimenzija atoma od otprilike 10^{-10} metara.

EKSPERIMENTALNA EVIDENCIJA 1)-5) i njima slične činjenice daju jasne dokaze o zrnatoj strukturi materijala (pri njegovom usitnjavanju ne možemo ići u beskonačnost nego nailazimo na konstituente – građevne blokove koji su najmanji elementi tog materijala). Postoji neoboriva evidencija za ideju atomarnosti svijeta

S atomarnošću u mikrosvijetu nije još srušena klasična fizika, no ona pada u trenucima kada se pokušava razumjeti svojstva tih zrnastih konstituenata. U tom pokušaju razumijevanja svojstava konstituenata temeljni će problem biti nedvosmislena, eksperimentalno osigurana činjenica, da konstituenti pokazuju svojstva i čestica i valova. To svojstvo nazivamo dualnom prirodom konstituenata. Za dobro praćenje nastalih problema treba znati što se u doba nastanka kvantne fizike zna o atomima. U srednjoj školi prihvaćenu tezu da su atomi građeni od elektrona i jezgre ovdje ćemo vidjeti kako je argumentirana.

2) GRAĐA ATOMA

2.1) Otkriće elektrona i mjerenje omjera njegove mase i naboja.

Milikan je ostvarivao levitaciju kapljica ulja u električnom polju na slijedeći način. Na sitne kapljice ulja nanosio je naboj i za pojedinu kapljicu bi variranjem vanjskog električnog polja E uspostavio ravnotežu električne i gravitacijske sile koje su na kapljicu djelovale:

$$m_{\text{kapljice}} \cdot g = q_{\text{kapljice}} \cdot E \quad (2.1)$$

Ponavljajući mjerenja s različito nabijenim kapljicama ustanovio je da se q kapljice ne može kontinuirano mijenjati nego je uvijek višekratnik jednog te istog naboja. Taj je naboj pripisan novoj čestici: elektronu. Inače je omjer naboja i mase elektrona mjeren metodom ukrtštenih polja. Studenti su već vidjeli Crooksovu cijev. U njoj je plin pod sniženim tlakom, što dozvoljava relativno slobodno kretanja elektrona. U Crooksovoj su cijevi dvije elektrode. Katoda se žari; iz nje izlijeću elektroni i putuju na anodu. Ako se okomito na putanju djeluje, međusobno također okomitim električnim i magnetskim poljem, i postigne da se njihovom kombinacijom snop ne otklanja, uravnotežila su se električna i Lorentzove sile:

$$qvB = qE \quad (2.2)$$

Tako znamo brzinu:

$$v = E / B \quad (2.3)$$

Ako još odredimo impuls preko poznate veze impulsa i zakrivljenosti staze u magnetskom polju:

$$mv = rqB \quad (2.4)$$

Kombiniranjem (2.3) i (2.4) dobivamo

$$\frac{q}{m} = \frac{v}{rB} \quad (2.5)$$

U svakom slučaju, postojala je objektivna informacija o postojanju elektrona i njegovom naboju.

2.2) Otkriće jezgre

Poslije otkrića elektrona razmišljanje o strukturi materije je bilo: elektron je „umogućen“ u neku vrstu „žele-a“ pozitivnog naboja. Znalo se naime, da je materijal normalno neutralan i bez naboja. Rutherford, međutim, eksperimentira s α zrakama, koje se dobivale iz nekih radioaktivnih elemenata, čija masa je bila mnogo veća od elektronove (otprilike 8000 puta). Kada na put tih zraka postavi tanki listić zlata, na njegovo ogromno iznenađenje, neke se α zrake odbijaju unatrag. (Poznavanje sudara po kojem se objekt prema natrag može odbiti samo ako je zapreka teža od njega. Znači u zlatu su zrnca teža od α zraka.) Mi ćemo ući u vrlo detaljan analitički opis ovog Rutherfordovog raspršenja, no već ovdje se može kvalitativno izreći zaključak da je Rutherford otkrio egzistenciju pozitivno nabijenih teških (prema elektronu) objekata. To su atomske jezgre i one komplementiraju otkriće elektrona u smislu da sada imamo dva bitna konstituenta atoma: elektrone i jezgre. U nastavku ćemo obraditi analitički opis Rutherfordovog raspršenja, naime ono ne samo da

odlično opisuje glavninu sudara α zraka s jezgrama u smjeru prema naprijed, nego odstupanje eksperimentalnih rezultata u smjeru prema natrag odaje prisutnost novih, nuklearnih, sila i daje podatak o njihovom dometu, to jest o dimenzijama atomske jezgre. Možemo odmah iznijeti da je dimenzija jezgre reda veličine 10^{-4} dimenzija atoma. To jest slikovito rečeno, atom je šupalj. Središnja jezgra je teška i nosi masu atoma te pozitivni naboj. Kako je poznata neutralnost atoma (detaljnije malo kasnije), zbroj naboja elektrona koji su oko jezgre jednak je električnom naboju jezgre. Time je, bar grubo, razotkrivena struktura atoma.

3) ZRNATOST SVJETLOSTI I FOTOELEKTRIČNI EFEKT:

Njemački fizičar Lenard je opazio neobičnu pojavu pri obasjavanju metala raznim valnim duljinama svjetlosti. Ako se dvije metalne elektrode smjeste u vakuum i jedna od njih obasja svjetlošću, iz te elektrode izlaze elektroni, koji padaju na drugu elektrodu. Ako se dvije elektrode spoje vanjskim vodičem, krugom teče struja (Skica). Kinetičku se energiju elektrona poslije izlaska iz prve elektrode može određivati ovako. Na elektrodu, koja treba prihvaćati elektrone se postavi varijabilni negativni napon. Visina napona koja zaustavlja tok struje u krugu je upravo iznos maksimalne kinetičke energije koju je elektron dobio radi obasjavanja prve elektrode svjetlošću. Do ovog trenutka nema nekih iznenađenja. U prošlom semestru smo izračunali koju energiju nosi svjetlost. Stoga pojava izbijanja elektrona ulaskom svjetla u materijal metala nije iznenađenje. Iznenađenje predstavljaju međutim slijedeća opažanja. Energija izlaznih elektrona nije proporcionalna intenzitetu svjetla, kako bi klasično očekivali. Povećanje intenziteta svjetla povećava iznos struje elektrona, ali ne mijenja njihovu energiju. S druge strane kinetička energija elektrona raste linearno s frekvencijom svjetlosti kojom obasjavamo prvu elektrodu:

$$E_{kin} = h\nu - W \quad (3.1)$$

ν je frekvencija upadne svjetlosti, W je takozvani izlazni rad: energija koja varira od metala do metala i pokazuje koliko rada se utroši za vađenje elektrona iz metala. Nakon što je Planck prvi indicirao iz analize spektra, zračenja crnog tijela da se svjetlost sastoji od kvanata energije $h\nu$ (h je Planckova konstanta), Einstein se proslavio objašnjenjem fotoelektričnog efekta ukazujući da se eksperimentalno utvrđen izraz (3.1) zajedno s neovisnosti energije elektrona o intenzitetu svjetlosti najjednostavnije objašnjava činjenicom da se svjetlo sastoji od kvanata energije $h\nu$. Foton svoju energiju predaje elektronu, koji dio toga troši da bi izašao iz metala (izlazni rad W) a preostali dio postaje njegova kinetička energija. Studentima će se pokazati pokus u kojem električki nabijenu kuglu obasjavanjem jednom bojom svjetlosti ne možemo riješiti naboja, ali postizemo odlazak naboja s kugle obasjavanjem svjetlošću više frekvencije (ljubičasta boja).

Ovim se pred fizičarima otvorio potpuno novi svijet: postojanje atoma sastavljenih od elektrona i jezgri i granularnost svjetlosti. Klasična fizika ne će moći objasniti ni stabilnost atoma ni diskretne frekvencije svjetlosti koje iz njega izlaze. Prošli semestar smo objašnjavali

fenomene interferencije i difrakcije teom da je svjetlost valne prirode, dok nam drugi eksperimenti: fotoelektrični efekt i indirektno spektralno zračenje crnog tijela (vidi kolegij 2245 Uvod u kvantnu fiziku) ukazuju na korpuskularnost svjetla .

4) KLASIČNI OPIS RUTHERFORDOVOG RASPRŠENJA

Na skici uočavamo naboj Ze jezgre na kojoj se raspršuje alfa zračenje. Radi jednostavnosti tretmana smatramo jezgru nepomičnom (beskonačna masa) , što nije bitno za dobivanje ideje o sadržaju rezultata. Naime u OF1 smo savladali tehniku transformiranja među laboratorijskim sustavom i sustavom centra mase. Rezultat koji ćemo sada izvesti vrijedi u sustavu centra mase s time da se masu projektila treba zamijeniti reduciranom masom. Radi centralnosti Coulombove sile , najprije uočavamo simetriju problema oko osi koja prolazi jezgrom i ima smjer kojim iz daljine dolazi projektil. To sugerira izbor ravninskog polarnog sustava za opis problema. Ishodište polarnog sustava je u jezgri. Vrlo kratko ćemo upotrebljavati i Kartezijev sustav s istim ishodištem i njegovom x osi identičnom s osi simetrije problema. y os je naravno okomita na nju. U polarnom sustavu trajektorija projektila se prati koordinatom r , razmakom među projektilom i jezgrom, i polarnim kutom φ koji ide od osi simetrije (x) do položaja projektila. Na ovom mjestu je zgodno spomenuti i naše poznavanje trajektorija problema u kojima sila zavisi obrnuto proporcionalno s kvadratom razmaka među tijelima. Znamo da je putanja hiperbolična (vidi OF1). Kut asimptote na hiperbolu projektila u odlasku se imenuje s ϑ i on je kut raspršenja alfa čestice. Masa projektila, parametar sudara (udaljenost projektila od x -osi dok je projektil beskonačno daleko) i početna brzina alfa čestice su redom: m , b , i v_0 . Naboj projektila je ze gdje je e naboj elektrona a z redni broj elementa u Mendeljejevom sustavu elemenata. Matematički opis započinjemo dobro naučenim svojstvom centralnih sila : Moment impulsa je u tom slučaju stalan (pa je jednak početnoj vrijednosti)

$$mr^2\dot{\varphi} = -bmv_0 \quad (4.1)$$

To odmah daje korisnu relaciju:

$$\frac{1}{r^2} = -\frac{d\varphi}{dt} \cdot \frac{1}{bv_0} \quad (4.2)$$

Sada možemo početi s dinamikom problema (upotreba y komponente drugog Newtonovog zakona s tim da je sila Coulombska):

$$m\frac{dv_y}{dt} = F_y = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \sin \varphi \quad (4.3)$$

Korištenjem (4.2) ovo prelazi u:

$$m\frac{dv_y}{dt} = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \sin \varphi \cdot \left(-\frac{1}{bv_0}\right) \frac{d\varphi}{dt} \quad (4.4)$$

Ako se (4.4) pomnoži s dt dobivamo proporcionalnost dva diferencijala pa se izrazi mogu direktno integrirati; početne i konačne vrijednosti su pak očite i vidimo ih u slijedećem izrazu kao granice integracije:

$$mv_y \Big|_0^{v_0 \sin \vartheta} = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{bv_0} \cos \varphi \Big|_\pi^\vartheta \quad (4.5)$$

Odatle neposredno slijedi

$$mv_0 \sin \vartheta = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{bv_0} (\cos \vartheta + 1) \quad (4.6)$$

Korištenjem izraza za trigonometrijske funkcije polovičnog argumenta dalje dobivamo:

$$mv_0 2 \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{bv_0} 2 \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \quad (4.7)$$

Nakon kraćenja zajedničkih faktora i uz upotrebu izraza za kotangens kuta imamo:

$$b = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv_0^2} \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} \quad (4.8)$$

Ovo je izuzetno važna i razumljiva formula. Ona povezuje kut raspršenja ϑ s parametrom sudara b . Blizina početka trajektorije projektila osi simetrije problema određuje kut raspršenja. Intuicija nam pak potvrđuje : što je veći parametar sudara, to će se projektil manje raspršiti. Također je važno uočiti da nam (4.8) može pomoći opaziti eventualnu novu silu koja se može pojaviti između projektila i jezgre, posebno ako je doseg te sile bitno manji od Coulombske . (U suštini Coulombska sila ima beskonačan doseg, jer otklanja sve projektele od početnog smjera.) Ako je doseg nove sile konačan, a Coulombove beskonačan, tada će na vrijednostima parametra sudara b , koji odgovaraju dosegu nove sile početi i odstupanje smjera raspršenog projektila od izraza (4.8)! Raspored raspršenih projektila po kutovima raspršenja ϑ uobičajeno je pratiti diferencijalnim udarnim presjekom. Kako i ime kaže, ta veličina je po dimenziji površina. Uobičajena oznaka za nju je $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. Slikovito možemo reći da je to ona

površina koju projektil „vidi“ na meti da bi se raspršio u prostorni kut $d\Omega$. Sada možemo ići na proračun diferencijalnog udarnog presjeka za Rutherfordovo raspršenje. Prema (4.8) da bi se projektil raspršio u željeni kut ϑ , mora početi put na udaljenosti b koja mu tim izrazom odgovara. Diferencijal površine unutar koje projektili moraju biti da bi se raspršili oko ϑ jest:

$$d\sigma = 2\pi b |db| = 2\pi \left(\frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0 mv_0^2} \right)^2 \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} (-) \left(-\frac{d\vartheta}{2} \right) / \left(\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right)$$

$$d\sigma = 2\pi \left(\frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0 mv_0^2} \right)^2 \frac{\cos \frac{\vartheta}{2}}{\sin^3 \frac{\vartheta}{2}} d \frac{\vartheta}{2} \quad (4.9)$$

Kako je izraz za diferencijal prostornog kuta:

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta \quad (4.10)$$

možemo uz izražavanje gornjeg sinusa preko onih za polovični kut izraz (4.9) transformirati u:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (4.11)$$

Rutherford je iz pokusa s alfa zrakama (helijevim jezgrama) načinio povijesne zaključke. Najprije je uvidio da se teške alfe ne mogu raspršivati unatrag na lakim elektronima, te je zaključio da postoje vrlo masivne atomske jezgre. Nadalje (4.11) pokazuje da se ogromna većina čestica raspršuju pod malim kutem radi četvrte potencije polovice kuta raspršenja u nazivniku. To se slagalo s njegovim opažanjem. Učinilo se da postoji problem na većim kutovima raspršenja gdje se podaci i teorija nisu slagali i to bitno. Rutherford hrabro zaključuje da je na pomolu nova sila (nuklearna) između alfe i jezgre. Iz kuta na kojem odstupanje počinje prema (4.8) možemo zaključiti oko koje udaljenosti od jezgre nuklearne sile ulaze u igru. Time je došao do već navedenog podatka o dosegu nuklearnih sila to jest o dimenzijama jezgre.

5) PROBLEMI POVEZANI SA STABILNOSTI ATOMA I SPEKTRIMA ZRAČENJA KOJE IZ ATOMA IZLAZI:

Dok su otkriće elektrona i atomske jezgre, čiji je naboj jednak ukupnom naboju elektrona koji su u tom atomu (da bi atom bio električki neutralan ; neutralnost atoma je eksperimentalno neupitna) bili korak u dobrom smjeru , postavili su se smjesta brojni problemi. Zašto su svi atomi jednog elementa jednaki? Zašto su radijusi atoma svih elemenata otprilike istih dimenzija? Zašto su atomi uopće stabilni? (Naime elektroni bi za vrijeme kruženja oko jezgre morali kontinuirano zračiti i konačno pasti na jezgru). Zašto su spektri zračenja iz atoma diskretni , a ne kontinuirani? Jedan od utemeljitelja kvantne fizike , Bohr , unosi neočekivanu pretpostavku. Od niza klasičnih staza koje bi bile moguće za elektron, on postulira da elektron boravi samo u onoj u kojoj je moment impulsa elektrona :

$$J = m v a_0 = \frac{h}{2\pi} \equiv \hbar \quad (5.1)$$

Ovdje su m, v, i a_0 masa, brzina i udaljenost elektrona od jezgre. Nadalje Bohr postulira da atom , dok je elektron u takvoj stazi, ne zrači. Iako ove pretpostavke zvuče naivno i neopravdano, razvoj fizike će pokazati da su obadviije pretpostavke točne, iako kvantna fizika kasnije pokazuje da doslovni pojam precizne staze u kvantnoj fizici nije prihvatljiv. Izračunajmo posljedice (5.1) za slučaj Coulombske interakcije elektrona i vodikove jezgre (Z i z obadvoje su jedan). Ako je elektron u u kružnoj stazi, potrebnu radijalnu silu da ga se zadrži u putanji treba dobiti iz Coulombovog zakona.

$$\frac{m v^2}{a_0} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0^2} \quad (5.2)$$

Ako (5.2) množimo s faktorom koji brojnik lijeve strane pretvara u J^2 i za moment impulsa koristimo vrijednost iz (5.1) imamo:

$$\frac{\hbar^2}{a_0} = \frac{m e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

što za Bohrov radijus vodikovog atoma daje vrijednost:

$$a_0 = \frac{\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0}{me^2} \quad (5.3)$$

Kada se u (5.3) uvrste vrijednosti veličina u formuli dobiva se red veličine 10^{-10} metara, a u skladu s eksperimentalnim vrijednostima. Uskoro ćemo vidjeti da Bohr zapravo dozvoljava ne samo vrijednost \hbar za J nego i višekratnike od \hbar . Ovi Bohrovi koraci omogućuju bitan napredak u rasvjetljavanju zagonetki koje smo naveli. To će biti pokazano u slijedećem dijelu teksta.

6) KVALITATIVNE PROCJENE SVOJSTAVA ATOMA I MOLEKULA

Započinjemo s podsjetnikom iznosa važnih konstanti u atomskoj domeni:

$$m_e = 0,911 \times 10^{-30} \text{ kg} \quad e = 1,6021 \times 10^{-19} \text{ C} \quad h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (6.1)$$

Dobro je baratati i numeričkom vrijednosti Bohrovog radiusa vodikovog atoma (5.3) :

$$a_0 = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (6.2)$$

U procjenama svojstava atoma vrlo je važna takozvana konstanta fine strukture α :

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \quad (6.3)$$

Ako jezgra ima naboj Ze , tada prvi elektron koji se jezgri dodaje ima modificiran izraz (5.2) :

$$\frac{mv^2}{a} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{a^2} \quad (6.4)$$

gdje je a radijus staze najbliže jezgri. Naime slijedeći istu proceduru kojom smo od (5.2) došli do (5.3) lako vidimo da je

$$a = \frac{a_0}{Z} \quad (6.5)$$

Kako se povećava naboj jezgre, radius najbliže staze se smanjuje. S druge strane, pak, možemo navijestiti da vanjski elektron, efektom zasjenjivanja drugih elektrona koji su iz nekog razloga (koji ćemo objasniti uskoro Paulijevim principom) popunili staze bliže jezgri, on registrira ukupni naboj koji na njega djeluje kao $Z=1$ (to jest isti koji on nosi). Tako nam (6.5) ujedno objašnjava podjednaku vrijednost radijusa svih atoma, jer njihovi vanjski elektroni (zahvaljujući efektu zasjenjenja) „osjećaju u unutrašnjosti svoje orbite“ samo isti naboj kao elektron vodikovog atoma.

Temeljem iste Bohrove pretpostavke poopćene s radijusa vodikovog atoma na radius a atoma s nabojem Ze možemo najprije napisati:

$$amv = \hbar \quad (6.6)$$

i odatle nadalje:

$$v = \frac{\hbar}{ma} = \frac{\hbar}{m a_0} = Z \frac{\hbar}{m} \left[\frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} \right]^{-1} = Z\alpha c \quad (6.7)$$

Ovo je vrlo poučna relacija. Kako je alfa relativno mala, to naša procjena brzina za lakše elemente kaže da su brzine elektrona nerelativističke. Tako za kinetičku energiju možemo koristiti uobičajeni izraz s kvadratom brzine to jest:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m Z^2 \alpha^2 c^2 \quad (6.8)$$

Za vodik specijalno to je

$$E_{kin}(H) = \frac{1}{2} m \alpha^2 c^2 = 13.6 eV \quad (6.9)$$

Za potencijalnu energiju imamo:

$$E_{pot} = -\frac{Ze^2 / (4\pi\epsilon_0)}{a} = -\frac{Ze^2 / (4\pi\epsilon_0)}{\frac{1}{Z} \frac{\hbar^2}{me^2} / (4\pi\epsilon_0)} = -Z^2 \alpha^2 mc^2 \quad (6.10)$$

Time zbroj kinetičke i potencijale energije (ukupna energija) postaje:

$$E_{ukupno} = -\frac{1}{2} m Z^2 \alpha^2 c^2 \quad (6.11)$$

$$E_{ukupno}(H) = -\frac{1}{2} m \alpha^2 c^2 = -13.6 eV \quad (6.12)$$

Da bismo ionizirali vodikov atom (odvojili elektron od jezgre) treba mu dovesti gornju energiju. Doista je neočekivano da ovakva poluklasična procjena jest u dobrom slaganju i s pravim kvantnomehaničkim računom i s eksperimentom.

Nakon relativno uspješnog razmatranja vodikovog atoma i prve naznake kako bismo naša razmatranja mogli generalizirati i na atome s većim nabojem jezgre, moramo se suočiti s Paulijevim principom. Na njega nailazimo već kod atoma s rednim brojem 2 : helijem. Naime eksperimentalna je činjenica da u prirodi postoje dvije vrste spektara zračenja koje iz helija izlazi. U jednoj je vrsti spektara osnovno stanje moguće razumjeti analizom bliskoj gornjoj. Za drugu vrstu spektara su rezultati takvi da najniže stanje ima svojstva kao da drugi elektron ne može biti u istoj orbiti kao prvi. Preciznije, kao da relaciji (5.1) J ima otprilike dvostruku vrijednost. Ovo je bilo vrlo zbunjujuće. Misterij dvije vrste spektara helija je razriješio Pauli. On postulira da u identičnu orbitu ne možemo dodati još jedan elektron. To objašnjava onu drugu vrstu helijevih spektara. Kako je , međutim, moguća prva vrsta. Ovdje nam se nameće spin elektrona kao odgovor. Naime, studenti će upoznati čuveni Stern-Gerlachov pokus u kojem je demonstrirano eksperimentalno da elektron ima intrinzični moment vrtnje s dvije moguće orijentacije. U prvoj vrsti helijevih spektara spinovi dva elektrona su antiparalelni. Stoga obadva elektrona mogu „stanovati“ u istoj orbiti jer se razlikuju bar orijentacijom svojih spinova. U drugoj vrsti helijevih spektara, spinovi elektrona su paralelni, stoga, da bi se elektroni razlikovali, moraju „stanovati“ u različitim orbitama; drugi elektron u relaciji (5.1) mora koristiti veću vrijednost J. Stoga kao bitan element u nastojanju globalnog razumijevanja periodičkog sustava elemenata sada imamo Paulijev princip, ne više kao ad hoc hipotezu, nego kao razumljivo tumačenje izgradnje periodičkog sustava elemenata. U pravilu su za atomske spektre ključni upravo prijelazi među stazama vanjskog elektrona, a time i njegova kemijska svojstva, kao i ionizacijski potencijali.

Napomena o molekulama

Imajući u vidu ove kvalitativne uvide u svojstva atoma elemenata, bliska nam je ideja da se atomi mogu povezivati u molekule ili dijeleći vanjske elektrone ili „preseljenjem“ jednog vanjskog elektrona atomu s većim Z čime među dva atoma nastaje jednostavna električna privlačnost. I elektromotornu galvansku silu možemo kvalitativno razumjeti preko gornje slike. Prijelaz elektrona od atoma na drugi atom u molekuli dešava se kao razlika vezanja (vanjskog) elektrona u atomskoj orbiti. Kako su te razlike reda veličine 1eV, to se prijelazom elektrona javlja napon od jednog Volta.

7) FENOMENOLOŠKE INFORMACIJE O ATOMSKIM JEZGRAMA

Rutherford je svojim pokusima dokazao postojanje jezgri, njihovu masivnost kao i domet nuklearnih sila. Kako na temelju znanja iz OF2 možemo razumjeti princip rada masenih spektrometara, dodat ćemo ovdje i informacije o masama jezgara nekim njihovim najosnovnijim svojstvima. Jezgru vodika predstavlja proton koji je otprilike 2000 puta masivniji od elektrona. Chadwick je 1932. godine otkrio i neutron; česticu mase slične protonskoj. Tako su kompletirani konstituenti atomske jezgre. U nuklearnoj fizici je uobičajeno koristiti Mega elektron Volt za jedinicu energije (MeV). Mase nuklida (ime za različite atomske jezgre se mjerilo rafiniranim postupcima preciznim masenim spektrometrima. Ovdje ćemo uz skicu dati ideju kako funkcionira jedan jednostavniji maseni spektrometar. Neka se iz izvora u kojem je atomima otrgnut elektron izvlače ioni potencijalom U . Njihova je kinetička energija po tome upravo jednaka umnošku njihovog naboja i primijenjenog potencijala. Ako sada na put iona postavimo okomito polje B , iz zakrivljenosti staze doznajemo impuls iona. Iz elementarne veze kinetičke energije i impulsa, koje su veličine gornjim postupcima eksperimentalno utvrđene, izračunavamo mase iona. Masa neutrona određena je malo kompliciranijim postupkom. No za tri najjednostavnija nuklearna objekta poznate su mase:

$$m_p c^2 = 938,279 \text{ MeV} \quad m_n c^2 = 939,57 \text{ MeV} \quad m_{\text{deuterij}} = m_p + m_n - \Delta \quad (7.1)$$

Veličina Δ naziva se defektom mase. U slučaju deuterija ona je ona iznosi 2,22 MeV. Pri nuklearnim reakcijama u kojima poslije sudara atomskih jezgri nastaju nove jezgre i nastaje ili nestaje dodatna kinetička energija, verificiran je Einsteinov izraz za ekvivalent mase i energije:

$$|Q| = |\Delta m| c^2 \quad (7.2)$$

Ovdje je Q poznata Q -vrijednost nuklearne reakcije; ukupna promjena kinetičke energije tijekom procesa, a Δm je ukupna promjena mase u reakciji. Dimenzije jezgre određene su sudarima slično Rutherfordovim pokusima. Najpreciznija mjerenja činjena su koristeći elektrone kao projekte. Ustanovljeno je da se radijus jezgre ponaša prema izrazu:

$$r = r_0 \cdot (A)^{\frac{1}{3}} \quad (7.3)$$

gdje je r radijus jezgre, r_0 je konstanta približno veličine jednog femtometra a A je maseni broj jezgre to jest broj nukleona (zbroj broja protona i neutrona u jezgri). Iz (7.3) slijedi da je gustoća nuklearnog materijala u jezgri otprilike stalna, što nas navodi na takozvanu saturaciju nuklearnih sila. Jednostavnim jezikom to znači da pojedini nukleon ne osjeća utjecaj svih nukleona, nego samo njih nekoliko. Sličan smo efekt već imali pri studiju napetosti površine u OF1. (Ovdje se može spomenuti da je svojstvo (7.3) bilo jedan od argumenata Bohru za formulaciju opisa jezgre kao kapljice nuklearnog materijala). Završit ćemo ovaj kratki pregled jezgrinih svojstava spominjanjem energije vezanja jezgre i energije vezanja po nukleonu. Slijedeća relacija definira energiju vezanja jezgre:

$$M(Z, A) = Zm_p + Nm_n - B(Z, A) \quad (7.4)$$

$M(Z,A)$ je masa jezgre od A nukleona od kojih su Z protoni . Broj neutrona N lako se odatle računa jer je $A=N+Z$. $B(Z,A)$ je dakle energija koja nedostaje da bi se nukleoni mogli

potpuno osloboditi. Radi usporedbe koliko su snažno nukleoni vezani u raznim jezgrama, često se energija veze $B(Z,A)$ dijeli s brojem nukleona: veličina nam govori koliko je pojedini nukleon uvezan u pojedinoj jezgri. Dakle definicija energije veze po nukleonu jest:

$$\text{Energija veze po nukleonu} = \frac{B(Z, A)}{A} \quad (7.5)$$

Ova se veličina često prikazuje grafički i ima karakterističan oblik. Ona najprije raste, kako rase broj parova nukleona koji se privlače (bez privlačenja jezgre ne bi bile stabilne). Ona dostiže maksimum oko $A \approx 60$, da bi zatim počela opadati. Maksimalna vrijednost je otprilike osam MeV po nukleonu. Ta krivulja temelj je objašnjenja mnogo fenomena. Dva najpotresnija su nuklearna fuzija: proces kojim se prema ovoj krivulji spajanjem lakših jezgri može dobiti energija (proces kojim Sunce i zvijezde stvaraju energiju za emisiju) u nuklearna fisija: proces kojim se iz teških jezgri (na primjer urana 235) može dobiti energija cijepanjem na jače vezane jezgre. Nuklearna fisija se mirnodopski koristi u nuklearnim elektranama, a postoje i oružane primjene kao i kod fuzije.

8) GLOBALNI PREGLED STRUKTURE ATOMSKIH SPEKTARA ELEMENATA

8.1 Povijesni uvod

Kada je Fraunhofer počeo eksperimentirati sa svojom difrakcijskom rešetkom (vidi OF3 za svojstvo rešetke da razlaže vidljivu svjetlost na komponente prema valnoj dužini zračenja) dočekalo ga je temeljno iznenađenje. Svjetlost emitirana iz pobuđenih atoma nije imala kontinuirani spektar, nego je bila sastavljena od diskretnih linija. U prošlom semestru studenti su vidjeli spektar žive, koji se sastojao od diskretnih linija, a u ovom kolegiju vidjet će čuveni Balmerov dio spektra vodika i spektre više plinova. Kao što je već spomenuto, klasična fizika predviđa kontinuirani spektar zračenja za elektrone u atomu. Većina studenata, pogotovo onih koji nisu usmjereni na studij fizike, na ovoj točki smjesta prelazi na Bohrov model i dodatak s Paulijevim principom da bi se razumjelo periodički sustav elemenata. U ovom kolegiju želimo studente upoznati sa eksperimentalnim činjenicama koje su nanizane da se razumije put kojim fizičari često prolaze, kada se suočavaju s potpuno novim, neočekivanim fenomenom. Prirodno je da se posebna pažnja posvetila dešifriranju spektra atoma vodika, jer je on najjednostavnije građe. Uočena je pravilnost, nazvana Ritzovim principom, da se inverzne valne duljine emitiranog zračenja:

$$\tilde{\nu} (cm^{-1}) \equiv \frac{1}{\lambda (cm)} \quad (8.1)$$

često mogu kombinirati. Naime ako postoje spektralne linije s frekvencijama ν_1 i ν_2 , često će se naći i frekvencija

$$\tilde{\nu}_3 = \tilde{\nu}_1 + \tilde{\nu}_2 \quad (8.2)$$

Da bi se objasnilo Ritzov princip kombinacije, uvedena je ideja „terma“. Za svaki spektar se pretpostavlja (tada nerazjašnjenog porijekla) sustav diskretnih veličina T_n sa svojstvom da diskretne frekvencije treba obilježavati s dva indeksa povezana sa sustavom terma ovako:

$$\tilde{\nu}_{ij} = T_i - T_j \quad (8.3)$$

Očito se preko ideje terma smjesta dobiva Ritzov princip. Uzimimo tri terma: T_1, T_2 i T_3 .

Tada uz prijelaze :

$$\tilde{\nu}_{21} = T_2 - T_1 \quad (8.4)$$

i

$$\tilde{\nu}_{32} = T_3 - T_2 \quad (8.5)$$

prema ideji terma postoji i

$$\nu_{31} = T_3 - T_1 \quad (8.6)$$

Spoznajni prodor u kvantnu fiziku će načiniti fizičar koji će dati fizikalnu interpretaciju i dati analitički izraz za ovako pripremljene terme.

8.2 Bohrova interpretacija nastanka atomskih spektara

Einstein je u fotoelektričkom efektu postulirao energiju kvanta svjetla relacijom:

$$E = h\nu \quad (8.7)$$

Bohr postulira da se svjetlo frekvencije ν_{21} emitira kao rezultat prijelaza među diskretnim energijskim stanjima atoma: $E_2 \rightarrow E_1$, što prema zakonu sačuvanja energije rezultira u:

$$E_2 - E_1 = h\nu_{21} \quad (8.8)$$

Ovo je relacija nevjerojatnog dometa. Ona se potvrđuje kroz sve dijelove fizike mikrosvijeta od molekularnih sustava do kvarkovskih sistema. S druge strane, vidimo da ta duboko temeljna relacija nije rezultat genijalne ideje pojedinca, nego je nastalo mukotrpnim nastojanjem velikog broja fizičara da razumiju strukturu atomskih spektara. Fraunhofer s optičkom rešetkom nalazi diskretnost spektara. Sustavno istraživanje spektara rezultira u Ritzovom principu. Njega , pak, objašnjava ideja terma. Svjetsku slavu stječe Bohr objašnjenjem da su termi zapravo pridruženi energijskim nivoima (numeričke vrijednosti terma i nivoa su proporcionalne) i ubacivanjem Einsteinove veze energije kvanta svjetla i njegove frekvencije u zakon sačuvanja energije razrješuje problem razumijevanja energijskih spektara svih kvantnomehaničkih sustava.

Tako se globalno razumijevanje atomskih spektara reducira na dva Bohrova postulata:

- i) Atom boravi u određenim stacionarnim energijskim diskretnim stanjima.
- ii) Atom emitira zračenje samo tijekom prijelaza među tim stanjima prema (8.8)

8.3 Frank-Hertzovi pokusi ; fenomen fluorescencije i Stokesovo pravilo

Potpuno nezavisna potpora Bohrovim postulatima proizlazi iz Frank Hertzovih pokusa.

(Skica) U staklenoj posudi (kruškastog oblika) su razrijeđene živine pare. U izbočenom dijelu posude je izvor elektrona promjenjive kinetičke energije elektrona. Promjenjivost energije se osigurava promjenljivim naponom kojim se iz katode izvora izvlače elektroni. U kuglastom dijelu posude su dvije elektrode . Mjeri se struja koja nastaje kao posljedica udara fotona nastalih pri deekscitaciji žive uzbuđene udarom elektrona. Kako energija elektrona raste ,

struja se ponaša skokovito . Naime kako se diže energija elektrona i oni pogađaju sve više nivoe žive, stvara se sve veći broj kanala, čijom deekscitacijom nastaju fotoni, koji udarom u elektrode uzrokuju struju. Na ovom mjestu je prirodno spomenuti i pojam flourescencije. Naime , ako atom uzbudimo visoko pobuđeni nivo, on u svojoj deekscitaciji ne mora nužno pasti u svoje prvobitno stanje. Elektron se može spustiti u neko međustanje energije koja je

niža od prve uzbude a viša od osnovnog stanja. U tom će slučaju emitirani foton biti niže energije (veće valne duljine) nego originalni uzbudni foton. To je fenomen flourescencije. Opaženi fenomen o produljenju valnih duljina naziva se Stokesovim pravilom.

8.4 Upozorenje o nedostacima striktnog prihvaćanja Bohrovih postulata

Iako su Bohrovi postulati divovski napredak mjereći neuspjehom klasične fizike da se suoči s atomskim spektrima, potrebna je svijest, da postoji i znanje i potreba da ovo nije kraj traganja za kvalitetnim opisom fenomena mikrosvijeta. Zasada ostavljamo po strani činjenicu da nam je nepoznat kvalitetan opis kako ćemo teorijski točno predvidjeti pozicije atomskih nivoea, tu je još i svojstvo pobuđenih atomskih nivoea da imaju svoju širinu. Naime, kao kada kod fenomena rezonacije, uz postojanje gušenja odziv sustava na prisilu frekvencijom ω u blizini rezonantne frekvencije ω_0 sustav titra i drugim frekvencijama osim rezonantne ali sa smanjenom amplitudom. Analogno tome, kada se atomski sustav uzbuđuje pobudom varijabilne frekvencije pobuda se ne prihvaća samo na rezonantnoj frekvenciji nego i u njenoj blizini. Upoznati s nazivom puna širina na polovici maksimuma (FWHM), spremni smo prihvatiti kao širinu stanja upravo FWHM. Kada je atom slobodan od vanjskih utjecaj (na primjer lebdi u vakuumu) tada se širine stanja nazivaju prirodnim širinama stanja. Te se širine mogu povećavati umjetnim skraćivanjem života stanja (na primjer sudarima atoma s drugim atomima kojom prilikom se atomi deekscitiraju). To pak preko relacija neodređenosti kojima smo već bili blizu u OF3, a koje u ovom semestru prelaze u

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar \quad (8.9)$$

Sa smanjenim vremenom trajanja nivoea dešava se njegovo energijsko proširenje. Također je iz (8.9) jasno da osnovna stanja (s beskonačnim trajanjem), nemaju prirodne širine; ona žive beskonačno dugo.

8.5 Analogije s klasičnim modelima

U OF3 smo imali primjere stanja titranja sustava, koja vječno traju i periodički se onavljaju. Stojni val s definiranim rubnim uvjetima je bio jedan takav model. U njemu se energija sustava ne mijenja. S druge strane imali smo i model gušenog titranja. U njemu osnovno titranje frekvencije ω_1 biva gušeno s modulacijskim faktorom, koji osigurava da intenzitet titranja, proporcionalan kvadratu amplitude titranja trne s relaksacijskim vremenom τ : U tom slučaju nešto u atomu mora titrati s amplitudom titranja opisanom kao :

$$A(t) = A_0 e^{-i\omega_1 t} e^{-\frac{t}{2\tau}} \quad (8.10)$$

Student može kvadriranjem (8.10) dobiti intenzitet fenomena i onda nalaženjem srednje vrijednosti trajanja dobiti da ono iznosi upravo τ . Ako bi isti sustav silili na titranje tada bi titranje opisivali diferencijalnom jednačbom:

$$\frac{dA}{dT} + (i\omega_1 + \frac{1}{2\tau})A = F_0 e^{-i\omega t} \quad (8.11)$$

Jasno je da je lijevi dio diferencijalne jednačbe podešen da mu titranje oblika (8.10) bude rješenje. Nadalje, uz taj homogeni dio dodan i uobičajeni oblik harmonijske prisile na desnoj strani. Uz supstituciju :

$$A(t) = B e^{-i\omega_1 t} \quad (8.12)$$

Dobivamo algebarsku jednačbu za B i njenim rješenjem odredimo analitički oblik za fenomen:

$$A = \frac{F_0 i}{\omega - \omega_1 + \frac{i}{2\tau}} e^{-i\omega t} \quad (8.13)$$

Kvadrat modula amplitude (u ovom slučaju intenzitet zračenja) će imati slijedeću frekvencijsku zavisnost :

$$I(\omega) = I(\omega_0) \frac{(\frac{1}{2\tau})^2}{(\omega - \omega_1)^2 + (\frac{1}{2\tau})^2} \quad (8.14)$$

U prošlom semestru smo pokazali da FWHM ovog fenomena, dakle širina rezonantnog stanja, iznosi upravo :

$$\Delta\omega = \frac{1}{\tau} \quad (8.15)$$

Korištenjem Einsteinove relacije za energiju zračenja, nakon što smo (8.15) pomnožili s Planckovom konstantom h , dobivamo upravo:

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} \quad (8.16)$$

Time smo opravdali relaciju (8.9) i tvrdnje koje su iz nje proizlazile i vezi širine nivoa i njegovog vremena trajanja. Ovdje još možemo dodati da će se tek u trećoj godini studija odrediti, koja se to prijelazna struja formira pri prijelazu među stacionarnim stanjima čija je posljedica zračenje. Naravno, također će se ispostaviti da pri boravku u stacionarnom stanju, zračenja nema, jer je energija u njemu stalna.

8.6 Proširenje Bohrove hipoteze (5.1) na višekratnike od \hbar ; pobuđena stanja atoma.

Za numeričko računanje energije atoma koristili smo relaciju (5.1), međutim iz nje rezultira samo jedno atomsko stanje. Viša pobuđenja dobivaju se dozvolom da lijeva strana (5.1) može biti i višekratnik od \hbar .

$$J = mva = n\hbar \quad (8.17)$$

Ovo je zapravo generalizacija relacije (6.6). dok relacija (6.7) prelazi u

$$v = \frac{n\hbar}{ma} = \frac{n\hbar}{m} \frac{Z}{a} = Z \frac{n\hbar}{m} \left[\frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} \right]^{-1} = Z\alpha c / n \quad (8.18)$$

Relaciju (8.18) možemo upotrijebiti za simboličku redefiniciju konstante alfa:

$$\alpha(z, n) = \frac{Z}{n} \alpha \quad (8.19)$$

ovaj korak nam je zgodan kada želimo upotrijebiti rezultate (6.8), (6.10) i (6.11) za

generalizaciju koja je posljedica poopćenja (8.17). Sada procjene nivoa elektrona, koji je u polju naboja Z a vrijednost konstante iz relacije (8.17) nije 1 nego n , glase:

$$E_{ukupno} = -\frac{1}{2}mZ^2\alpha^2c^2/n^2 \quad (8.20)$$

Tako imamo prvu shemu nivoa atoma s rednim brojem Z za niz nivoa u kojem se pojavljuje i kvantni broj n . Za prvi tren on se povezuje s orbitalnom kutnom količinom gibanja. Time se uz osnovno stanje vodika smješteno na -13.6 eV, nalaze i viša pobuđena stanja oblika:

$$E_n(H) = -13.6eV \cdot \frac{1}{n^2} \quad (8.21)$$

moгуće energije fotona pri prijelazima su:

$$\Delta E_{lm} = -13.6eV \cdot \left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{m^2}\right) \quad (8.22)$$

Povijesnu je ulogu odigrala takozvana Balmerova serija u kojoj se elektroni spuštaju s viših staza u $n=2$ stazu. Naime, čovječanstvo je imalo sreću da su četiri Balmerove linije, koje vode na opisanu stazu smještene u vidljivo područje. To je omogućilo smiono opažanje da se frekvencije prijelaza u vodikovom spektru odnose kao razlike inverznih kvadrata cijelih brojeva. Ova je empirijska činjenica bila poznata prije Bohrove hipoteze! Osim Balmerove serije, u kojoj elektron pada u stanje s $n=2$ postoji i Lymanova (pada se u orbitu $n=1$; ultraljubičasta domena) i Paschenova (pada se u orbitu $n=3$; infracrvena domena) . Studentima će se slikovito prikazati navedene serije prijelaza.

8.7 Postojanje kvantnih brojeva kojima se sistematiziraju atomski spektri.

U našoj najgrubljoj sistematizaciji atomskih nivoa (8.20) pojavljuje se cjelobrojnik n kojim karakteriziramo nivoe. Uobičajeno je tu veličinu zvati glavnim kvantnim brojem elektrone orbite u atomu. Einstein –de Haas eksperiment je pokazao da postoji i orbitalna kutna količina gibanja na atomskom nivou. Naime, ako se vertikalni cilindar materijala drži unutar vertikalno položenog solenoida (gravitacija je uravnotežena izolatorskom niti na kojoj cilindar visi), dok u solenoidu ne teče struja, cilindar miruje. Ako se pusti struja, kutne količine gibanja individualnih atoma se orjentiraju i nastane rezultatna kutna količina gibanja atomskog nivoa. Kako, pak, ukupna kutna količina gibanja cilindra mora ostati sačuvana, jer pojavom vertikalnog magnetskog polja na cilindar nije djelovao moment sile, to se cilindar mora početi okretati. To se doista i eksperimentalno opaža. Tako nam je lakše prihvatiti rezultat koji će biti izveden u kolegiju Kvantne mehanike :

$$n_{Bohr} = n_r + l + 1 \quad (8.23)$$

Ovdje je s lijeve strane glavni kvantni broj iz (8.20) n_r je radijalni kvantni broj povezan s radijalnom zavisnosti orbite. Orbitalna kutna količina gibanja je predstavljena s l ; sve veličine u (8.23) su cjelobrojne, a stvarna kutna količina gibanja orbite je

$$J = l\hbar \quad (8.24)$$

Povijesno se uvriježila ova korespondencija u obilježavanju atomskih orbita:

$$\begin{aligned} s \text{ orbita} &\rightarrow l=0 \\ p \text{ orbita} &\rightarrow l=1 \\ d \text{ orbita} &\rightarrow l=2 \\ f \text{ orbita} &\rightarrow l=3 \\ g \text{ orbita} &\rightarrow l=4 \end{aligned} \quad (8.25)$$

Pravi kvantnomehanički računi daju i pravilo

$$l \leq n_r \quad (8.26)$$

U izgradnji periodičkog sustava elemenata korisna je i činjenica da se orijentacija kutne količine gibanja također karakterizira cijelim brojem m čije vrijednosti idu od $-l$ do $+l$, tako da je broj podorbita unutar jednog l : $2l+1$. m se inače interpretira kao projekcija l na os kvantizacije (izabranu os u prostoru) i često se naziva magnetskim kvantnim brojem. Stern-Gerlachov pokus dao je informaciju da se intrinzični moment impulsa elektrona $s=1/2$ može orjenirati na dva načina: $-1/2$ i $+1/2$. U zaključku sumiramo da se pojedino stanje elektrona u atomskom stanju karakterizira kvantnim brojevima: n_r, l, m, s i Σ gdje je Σ projekcija s na os kvantizacije. Dok se ne uđe u finu strukturu atomskih spektara (mali efekt od interakcije magnetskih momenata orbitalnog i spinskog magnetizma), unutar pojedine vrijednosti l postoji degeneracija $2l+1$. To jest toliki je broj različitih elektronskih stanja; svako karakterizirano jednim od dozvoljenih vrijednosti magnetskog broja m . Zapravo se degeneracija udvostručuje, jer elektron može još imati dvije orijentacije svog spina $\Sigma = \pm \frac{1}{2}$.

Time je ukupna degeneracija stanja karakteriziranog s l : $2(2l+1)$.

Studenti se upoznaju s „dvodimenzionalnim“ spektrima vodika i helija i time se zaključuje prva ljuska u periodičkom sustavu. Pod „dvodimenzionalnošću“ se podrazumijeva činjenica da se pojedini nivo karakterizira i sa brojem n_{Bohr} (energijski položaj, obično vertikalna koordinata) i s l , koji određuje stupac u kojem se nivo crta (horizontalna koordinata). Također se napominje da postoje izborna pravila za prijelaze: prijelazi se dešavaju samo među nivoima susjednih kolona, dakle l vrijednost se može promijeniti samo za jedinicu. Slijedeći je spektar litija. Njegov treći elektron ne može više ići u najnižu ljusku, jer je $1S$ stanje popunjeno s dva elektrona. Stoga njegov spektar ima karakteristike vodikovog spektra, samo mu nedostaje vodikovo osnovno stanje. U toj ljusci ($n_{Bohr} = 2$) imamo dvije vrste stanja $n_{Bohr} = 2, l = 0$. Tu je degeneracija dva. Druga vrsta stanja je s $n_{Bohr} = 2, l = 1$ ovdje je degeneracija $2 \cdot (2 \cdot 1 + 1) = 6$ tako drugu ljusku prema Paulijevom principu zaključujemo s 8 elektrona, Za kvalitetno razumijevanje periodičkog sistema potrebno nam je kvantitativnije poznavanje atomskih stanja. Naime u daljnjoj izgradnji periodičkog sistema pojavljuju se i efekti međudjelovanja elektrona, a posebno bitan efekt nastaje od inerakcije orbitalnog i spinskog magnetizma (stručni termin je vezanje spina i staze). Stoga je za praćenje potankosti poretka rješenja Schrödingerove jednačbe potreban mnogo jači matematički formalizam.

8.8 Eksperimentalno određivanje naboja atomske jezgre elemenata

Mosley je određivao energijske nivoe najnižih (normalno popunjenih stanja) elemenata. Ideja je bila slijedeća. Položaj najniže ljuske (inače stručno nazvane K-ljuskom) prema Bohru je bio

$$E_K = -13.6 \cdot Z^2 \quad (8.27)$$

Slijedeća (L ljuska) je po Bohru

$$E_L = -13.6 \cdot Z^2 \cdot const \quad (8.28)$$

Na ovu konstantu elektroni izvan L ljuske nemaju utjecaja.

Tako je frekvencija prijelaza unutar unutrašnjih ljusaka:

$$h\nu = (1 - const) \cdot 13.6 \cdot Z^2 \quad (8.29)$$

U sve tri gornje relacije su energijske jedinice naravno elektronvolti. Mjereći frekvencije prijelaza ustanovio je da broj pozitivnih naboja jezgre odgovara mjestu u Mendeljejevom sustavu elemenata.

9) DUALNA SVOJSTVA ELEKTROMAGNETSKOG ZRAČENJA

U OF3 smo naučili da elektromagnetsko zračenje ima ogromno područje valnih duljina (od kilometarskih do mnogo manjih od femtometra. U cijelom tom području, argumentirat ćemo u ovom poglavlju, kvanti elektromagnetskog zračenja (generalizirano nazvani fotoni) manifestiraju dualnu prirodu. U različitim pokusima manifestiraju se katkad poput čestica (definirani impuls i diskretna energija određena frekvencijom a ne intenzitetom) a katkad kao val.

9.1 Područje vidljive svjetlosti

Ovdje smo obećano već ispunili. Difrakcija svjetlosti je demonstracija valnog aspekta ponašanja fotona, a fotoelektrični efekt ukazuje i na čestični aspekt ponašanja fotona.

9.2 Područje x-zraka

X zrake se dobivaju pri kočenju elektrona visoke energije na metalnim elektrodama. Red veličine njihove energije možemo procijeniti iz izraza u Mosleyevom eksperimentu, naime dio spektra x-zraka potječe od činjenice da elektron projektil izbija elektron metu unutrašnjih staza. Unutrašnja se staza potom popunjava prijelazom koji je koristio Mosley koji proizvodi zračenje sukladno izrazu (8.29). Radi visoke vrijednosti kvadrata naboja jezgre x zrake mogu biti u visokom keV-skom području. Njihovu korpuskularnu stranu demonstrira Comptonov efekt. U Comptonovom efektu se x-zraka sudara s elektronom i raspršuje. U kinematici tog sudara elektronu se nanosi prijenos impulsa kao da ga je udarila čestica impulsa: $h\nu_0/c$ a od njega se odbila čestica impulsa: $h\nu/c$; ν_0 i ν su frekvencije fotona prije i poslije sudara što je sve u skladu s čestičnom predodžbom o x zraci. Skicirat ćemo sada kinematiku

Comptonovog raspršenja. Zakon sačuvanja energije za sustav x-zraka, elektron daje:

$$h\nu_0 + mc^2 = h\nu + E \quad (9.1)$$

Gdje su m i E masa mirovanja elektrona i energija elektrona po sudaru.

Elektron, koji nije imao impuls prije sudara dobio je nakon sudara impuls \vec{p} , koji je vektorska razlika impulsa upadne i izlazne x-zrake. Kut elektrona u odnosu na upadnu x zraku označavamo s \mathcal{G} Prema tome kvadrat impulsa izlaznog elektrona jest:

$$p^2 = \left(\frac{h\nu_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu_0}{c}\frac{h\nu}{c}\cos\mathcal{G} \quad (9.2)$$

Ako (8.31) množimo s kvadratom od c i dodamo tom novom izrazu m^2c^4 dobivamo s lijeve strane novog izraza kvadrat energije elektrona:

$$E^2 = (h\nu_0)^2 + (h\nu)^2 - 2h\nu_0h\nu\cos\mathcal{G} + m^2c^4 \quad (9.3)$$

Izračunavši kvadrat elektronove energije iz (9.1), možemo ga izjednačiti s izrazom (9.3) i tako dobiti:

$$(h\nu_0 - h\nu + mc^2)^2 = E^2 = (h\nu_0)^2 + (h\nu)^2 - 2h\nu_0h\nu\cos\mathcal{G} + m^2c^4 \quad (9.4)$$

Obratimo pažnju na prvi i posljednji dio lanca jednakosti u (9.4) i poništimo identične kvadratne termine u njima. Preostaje:

$$-2h\nu_0h\nu + 2mc^2h\nu_0 - 2mc^2h\nu = -2h\nu_0h\nu\cos\mathcal{G} \quad (9.5)$$

Ako (9.5) podijelimo s $2hmc^2$ slijedi:

$$-\frac{h\nu\nu_0}{mc^2}\cos\mathcal{G} = \nu_0 - \nu - \frac{h}{mc^2}\nu\nu_0 \quad (9.6)$$

Iz (9.6) možemo dobiti dvije ekvivalentne formulacije kinematike Comptonovog efekta.

Ako u (9.6) skupimo sve članove koji sadrže ν i tada izračunamo izraz za tu frekvenciju imat

$$\text{ćemo: } \nu = \frac{V_0}{1 + \frac{h\nu_0}{mc^2}(1 - \cos \vartheta)} \quad (9.7)$$

Ako pak u (9.6) podijelimo s $\nu\nu_0$ i pomnožimo s c te iskoristimo vezu među frekvencijom, valnom duljinom i c , dobivamo:

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1 - \cos \vartheta) \quad (9.8)$$

Pokazat će se studentima eksperimentalne rezultate koji su u skladu s izvedenim relacijama. Comptonov efekt, znači, demonstrira korpuskularno ponašanje elektromagnetskog zračenja u području x zraka. S druge strane smo već u OF3 pokazali kroz Braggove rezultate da iste zrake demonstriraju kroz difrakciju na kristalnim rešetkama valno ponašanje. Ovaj valni aspekt ćemo još jednom studirati u ovom semestru detaljnije.

9.3 Područje γ - zraka

Elektromagnetsko zračenje proizvedeno u nuklearnim procesima nazivamo gama zrakama. Njihove energije počinju s redom veličine MeV-a, mogu biti i nekoliko redova veličine više. Čestice takvih energija izvode procese analogne Comptonovom efektu i to na mnogo masivnijim objektima. S druge strane imamo pojavu i difraktivnog raspršenja na diskovima dimenzija femtometra.

Tako možemo zaključiti tvrdnjom da elektromagnetsko zračenje pokazuje dualnu prirodu preko ogromnog područja valnih duljina i impulsa.

9.4 Gama zrake i procesi stvaranja antimaterije

Radi opće profesionalne kulture, spominjemo da se pomoću gama zraka ostvarilo i stvaranje antičestica u odnosu na čestice našeg svijeta. Kada gama zraka dovoljno visoke energije prođe blizu masivnog nabijenog objekta može stvoriti par elektron-pozitron. Proces se naziva produkcijom parova. U njemu, uz nama poznati elektron nastaje i pozitron. Pozitron ima masu, iznos naboja i iznos drugih elektromagnetskih svojstava isti kao elektron, no naboj mu ima suprotni predznak. Pozitron bi vječno živio, no kako se nalazi u svijetu ogromnog broja elektrona, on se s elektronom anihilira/poništava uz stvaranje dviju gama zraka. Uobičajeno je upozoriti studente na specifičnosti procesa tvorbe parova i njihove anihilacije. Pogledajmo najprije proces poništenja. U njemu se dešava:



Ovdje je broj emitiranih gama kvanata (n) jednak ili veći od dva. Razlog je tome nemogućnost istovremenog ispunjavanja zahtjeva za zakon sačuvanja energije i impulsa ako bi se emitirala samo jedna gama zraka. Naime, u procesu se oslobađa energija (i elektron i pozitron imaju energijski ekvivalent mase mirovanja 0.511 MeV-a). Tu oslobođenu energiju odnosi elektromagnetsko zračenje. Ako bi se emitirala samo jedna gama zraka, ona bi išla nekim smjerom. To bi narušavalo zakon sačuvanja impulsa, jer u sustavu CM za elektron pozitron par rezultatni impuls ne postoji; početni impuls je nula, dok bi konačni bio različit od nule. Dominantni proces je emisija dvije nasuprotno emitirane game, energije jednake masi mirovanja elektrona. Ovaj anihilacijski proces ima danas raširenu primjenu u medicinskoj fizici u takozvanoj PET metodi. Pacijent prima izotop koji emitira pozitrone. Put toga izotopa ljudskim tijelo prati se hvatajući koincidentno emitirane game. Naime, pozicija pozitrona u trenutku emisije i anihilacije koja nastupa praktički istovremeno (na istom mjestu na kojem je pozitron emitiran) mora ležati na spojnici pozicija na kojima su detektirane game. To daje jednu informaciju o poziciji izotopa (obilježivača) unutar specifične molekule, čije putovanje pratimo.

Parovi se pak ne mogu kreirati gama zrakom u vakuumu; potreban je još objekt u blizini, koji preuzimanjem dijela impulsa dozvoljava da se i u produkciji parova istovremeno zadovolje i sačuvanje impulsa i energije.

Elektron i pozitron nisu jedini par čestica-antičestica. Dolje navodimo još samo nekoliko takvih parova:

$$\begin{array}{l} e^- \mu^- \pi^- p n \dots \\ e^+ \mu^+ \pi^+ \bar{p} \bar{n} \end{array} \quad (9.10)$$

Za većinu takozvanih elementarnih čestica postoje i njihove anti čestice. Ovih je godina moderno studirati svojstva antiatoma. Na primjer antivodik je sustav u kojem je antiproton jezgra, a pozitron ima elogu elektrona. Naime, velika je teorijska zagonetka: zašto u nama vidljivom Svemiru postoji samo materija, a ne i antimaterija? Iz dosadašnjih istraživanja, koja potvrđuju simetriju među fizikalnim svojstvima materije i antimaterije, nejasna je evidentna neravnoteža u njihovoj količini u Svemiru.

10) KONCEPCIJSKE POTEŠKOĆE S DUALNOŠĆU PRIRODE SVJETLOSTI

10.1 Mogu li se fotoni cijepati?

Sreli smo koncept polupropusnog zrcala kod Michelson-Morley-eva eksperimenta. Dio svjetla prolazi kroz takvo ogledalo, a dio se reflektira. Ako fotoelektrički efekt naglašava korpuskularnu prirodu svjetla, da li se u polupropusnom ogledalu foton cijepa? Odgovor može pružiti eksperiment. Opišimo detektor koji se pri tome koristi. Kao u fotoefektu, svjetlo zadane frekvencije ν pada na metalnu površinu i izbija fotoelektrone određene kinetičke energija. Ako druga elektroda detektora ima negativni električni potencijal, takav da ga mogu savladati samo elektroni koji imaju $2/3$ kinetičke energije koju imaju elektroni izbijeni fotoelektričkim efektom fotonima frekvencije ν , tada će detektor (brojeći pristigle elektrone) sigurno registrirati svaki foton te frekvencije koji padne na prvu elektrodu. U pokusu se koriste dva takva detektora, svaki na putanji ili prolazne ili reflektirane svjetlosti. Detektor bilježi ulazak fotona ili na jedan ili drugi detektor. Suma ukupno detektiranih fotoelektrona odgovara ukupnom broju fotona, no oni su detektirani ili u jednom ili u drugom detektoru! Za razliku od korištenja Michelson-Morleyeve situacije, gdje se detektira interferencijski uzorak dvije razne putanje, ovdje se detektira foton u svakoj putanji i on je pao ili na jednu ili drugu elektrodu; to jest bio je ili na jednoj ili na drugoj putanji.

10.2 Kroz koji otvor prolazi foton pri interferenciji pri padu svjetla na dva otvora?

U OF3 smo se upoznali s klasičnim eksperimentom interferencije na dvije pukotine. Studenti su na zastoru iza pukotina vidjeli minimume i maksimume svjetla (interferencijske pruge) koje svjedoče da je zahvaljujući koherencije svjetlosti na dva otvora došlo do interferencijskog fenomena, to jest na nekim područjima zastora je svjetlo pojačano, a na nekim svjetla nema. Kako je to moguće ako je svjetlo zapravo roj čestica? Čestice bi trebale prolaziti samo kroz jedan od otvora i rezultat eksperimenta bi treba biti takav da bi ga morali moći dobiti superponirajući dva rezultata u kojima je u jednom zatvoren jedan otvor, a u drugom drugi otvor. To međutim eksperimentalno nije tako! Klasično obrazovanim fizičarima ovo je prilična zagonetka. Uobičajen je odgovor da foton prolazi kroz obadva otvora. Bohr na ovom mjestu daje profesionalniju interpretaciju. Često, pogotovo u mikrosvijetu, odgovor zavisi o vrsti mjerenja. Ako bismo eksperiment izvodili tako da ustanovljujemo kroz koji otvor prolazi foton, srušili bismo interferentni rezultat. Dok opažamo interferentnu sliku, ne možemo reći koju je trajektoriju imao foton. U kvantnoj se fizici koncept trajektorije ne koristi ili ga se koristi s velikim oprezom. Time Bohrove staze nemaju kvalitetno uporište. Isti

će se rezultati dobiti strožijim pristupom. Ovdje se zapravo srećemo s Bohrovom idejom da se može govoriti samo o rezultatima mjerenja. O onome što nije mjereno često ne možemo zaključivati. Njegova je ideja (eksperimentalno često a i nedavno provjeravana) : kada u kvantni sustav ulazimo s mjerenjem, taj sustav nakon mjerenja nije isti nego je srušen u jedno od takozvanih vlastitih stanja. U eksperimentu s dva otvora, mjerenjem pozicije, sustav rušimo u stanje dobro određene koordinate. Opažanje interferencije ne bi pak bilo moguće bez koherencije unutar svjetlosti, to jest bez dobro definirane frekvencije i faze. Istovremeno opažanje pozicije i interferencije nije moguće! Definitivnu potvrdu ovakvoj Bohrovoj interpretaciji načinio je Taylor eksperimentom u kojem je intenzitet izvora svjetla bio tako nizak da se u danom trenutku u sustavu doista nalazio samo jedan foton. Nakon dovoljno dugo vremena akumulirana ustanovljene su interferencijske pruge!

10.3 Statistička interpretacija; mogući izlaz iz paradoksa dualnosti svjetla

Navedene eksperimentalne činjenice koje sve ukazuju da dualni karakter svjetla mogu se obuhvatiti slijedećim formulacijama:

i) Fotoelektrički efekt indicira da se u snopu svjetla nalaze obrocima energije, koja je dana Einsteinovim izrazom:

$$E = h\nu \quad (10.1)$$

ii) Maxwellove jednadžbe uspješno opisuju cijelu elektrodinamiku pa tako i fenomene interferencije i ogiba, ali je potrebna slijedeća reinterpretacija:

iii) Dok se u klasičnoj elektrodinamici integral gustoće elektromagnetskog polja interpretira kao vrijednost energije, može ga se suptilnije interpretirati na slijedeći način:

$$\int_V \left(\frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \right) dV = \langle n \rangle h\nu \quad (10.2)$$

Gdje je $\langle n \rangle$ prosječni broj fotona frekvencije ν u tom volumenu. Time intenzitet elektromagnetskog vala (kvadrat amplitude) stječe zrnasti karakter i suma je energija pojedinih fotona.

iv) Ako se elektromagnetsko zračenje frekvencije ν emitira ili apsorbira, to se dešava u obrocima energije prema relaciji (10.1).

Bitni iskorak u odnosu na naše znanje iz OF3 jest probabilistička (vjerojatnostna) interpretacija kvadrata amplitude polja. Kada se iii) reducira na jedan foton, tada taj kvadrat mjeri raspodjelu vjerojatnosti tog fotona po prostoru. Osjetljivo pitanje kauzaliteta ćemo još općenitije razmatrati. U ovom slučaju kauzalitet je sadržan u Maxwellovim jednadžbama, a kvantna priroda i „rušenje sistema u vlastito stanje“ je inkorporirano u interpretaciju kvadrata amplitude polja.

10.4 Gedanken eksperiment s emisijom jednog fotona u Svemir i njegovom detekcijom

U vrijeme utemeljenja kvantne fizike između Bohra i Einsteina razbuktao se epistemološki sukob. Bohr je inzistirao na idejama koje smo gore naznačili, a Einstein je nastojao smisliti idealni pokus, koji bi svojim ishodom oborio Bohrove ideje. Ovdje će biti iznesen primjer, koji ima sličnosti s jednim takvim slučajem. Neka imamo izolirani atom u Svemiru koji je u pobuđenom stanju i koji emitira kvant zračenja. Dok nema vanjskih utjecaja, koji bi atom prije emisije orijentirali, amplituda vala se širi Svemirom izotropno istovremeno padajući inverzno s udaljenošću od atoma. Intenzitet vala pada, pak s kvadratom udaljenosti. Neka je na velikim jednakim udaljenostima i međusobno vrlo razmaknuto smješteno više detektora kakve smo opisali u odjeljku o mogućnosti cijepanja fotona. Postoji konačna vjerojatnost da će foton biti detektiran. Eksperimentalna je činjenica da astronomi opažaju energiju svjetla iz dalekih zvijezda s istom energijom s kojom su emitirani. (na primjer jasno se vide vodikove,

helijeve i druge linije elemenata s tih zvijezda) . To upozorava da doista pad amplitude zračenja s udaljenošću od izvora ne znači i pad energije fotona. Ono što pada jest vjerojatnost detekcije, jer se oblak amplitude jednog fotona širi po sve većoj površini kugle. To je u potpunoj suglasnosti s gore navedenim interpretacijskim postulatima. Sada međutim nastupa zaprepaštenje. Dok se foton nije manifestirao u jednom od detektora, postojala je konačna vjerojatnost da ga se detektira u bilo kojem od (moguće više svjetlosnih godina) razmaknutih detektora. Detekcijom fotona u jednom takvom detektoru , nestaje vjerojatnost da ga se detektira u nekom drugom detektoru i ova informacija putuje brže od svjetlosti! Ovakav razvoj jest potvrđen, doduše u laboratorijskim uvjetima; potankosti eksperimenta su prezamršene za ovaj nivo znanja. To pokazuje istinitost Bohrove tvrdnje da se mjerenjem doista kvantni sustav ruši na nekontroliran način u vlastito stanje protivno našoj intuiciji.

11) DUALNA PRIRODA „ ČESTICA MATERIJE“

Čestice materije su gore pod navodnicima, jer to ime zapravo ima povijesno porijeklo. U ovom kolegiju , potpomognuti eksperimentalnom evidencijom , nalazimo da i svjetlost i objekti s masom u mikrosvijetu demonstriraju dualna (čestična i valna) svojstva.

11.1 De Broglie-evi valovi

Ako se u svjetlu nalaze valni paketi energije :

$$E = h\nu \quad (11.1)$$

i impulsa :

$$p = E / c \quad (11.2)$$

Tada uz :

$$\nu = c / \lambda \quad (11.3)$$

uvrštavanjem izraza za frekvenciju (11.3) u izraz za energiju (11.1) dobivamo vezu energije i valne duljine. Kada taj izraz za energiju uvrstimo u (11.2) nalazimo da između impulsa i valne duljine fotona postoji relacija:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (11.4)$$

De Broglie relaciju (11.4) poopćuje na valove koji pripadaju objektima u mikrosvijetu koji imaju i masu mirovanja. Tu čuvenu de Broglievu relaciju možemo dobiti i drugim putovima. Ako prihvatimo da ravni val opisuje česticu dobro definiranog impulsa treba u opisu:

$$\psi(r, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (11.5)$$

samo odrediti vezu k i ω . Polazimo od dva izraza za energiju:

$$\hbar\omega = E = mc^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (11.6)$$

U (11.6) prva jednakost je identična (11.1), a u drugoj je relativistički izraz za energiju čestice, čija je masa mirovanja m ! Kao i u slučaju fotona, čestici pripisujemo valni paket. (Valni paket se može približno lokalizirati. Valni se paket širi grupnom brzinom , pa je izraz za brzinu valnog paketa:

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\omega}{dv} \cdot \frac{dv}{dk} \quad (11.7)$$

Sada iz (11.7) možemo početi računati derivaciju k po v i kada nam zatreba derivacija kružne frekvencije po brzini možemo koristiti (11.6):

$$\frac{dk}{dv} = \frac{1}{v} \frac{d\omega}{dv} = \frac{1}{v} \frac{d}{dv} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \right) = \frac{mc^2}{\hbar} \frac{1}{v} \frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-2\frac{v}{c^2}\right)}{\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{3}{2}}} \quad (11.8)$$

i u nastavku (11.8):

$$\frac{dk}{dv} = \frac{m}{\hbar} \left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{3}{2}} = \frac{d}{dv} \left(\frac{\frac{mv}{\hbar}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \right) \quad (11.9)$$

Dakle vrijedi:

$$dk = \frac{1}{\hbar} d\left(\frac{mv}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right) = \frac{1}{\hbar} dp \quad (11.10)$$

To jest :

$$p = \hbar k \quad (11.11)$$

Kako smo u OF3 naučili vezu između valnog broja k i valne duljine λ :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (11.12)$$

Vidimo da je zapravo uz (11.12) relacija (11.11) istovjetna s (11.4) . Prve provjere ideja da na primjer elektroni mogu pokazati fenomen difrakcije (ogiba) načinili su Davisson i Germer. Obasjavali su Ni kristal snopom elektrona od 50 eV. Možemo ilustrirati kako se iz kinetičke energije elektrona procjenjivala njihova valna duljina. Počnimo s (11.4) i tada za impuls koristimo uobičajenu vezu impulsa i kinetičke energije:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}} = \sqrt{\frac{150,4eV}{E_{kin}(eV)}} \cdot 10^{-10} m \quad (11.13)$$

Posljednji numerički izraz dobiva se uvrštenjem vrijednosti za Planckovu konstantu i masu elektrona. Korištenjem geometrije ravnina (1,1,1) u kristalu dobili su uz razmak ravnina:

$$d = 2.15 \cdot 10^{-10} m \quad (11.14)$$

na eksperimentalnom kutu $\vartheta = 50^\circ$ uvjet $d \sin \vartheta = \lambda$ je ispunjen za energiju od 50 eV. To je bio poznati difrakcijski maksimum, kojim je pokazano da i elektroni imaju valna svojstva. U slijedećem odjeljku razmotrit ćemo opće uvjete za difrakcijske maksimume na generalnoj periodičkoj rešetci. Naime, nakon brojnih pokusa s elektronima pokazana su difrakcijska svojstva i mnogo masivnijih objekata: vodikovih molekula, helijevih atoma, a posebnu ulogu u istraživanju struktura igra raspršenje neutrona. Možemo još spomenuti da je difrakcija različitih projektila na kristalnim rešetkama svjetski prihvaćena metoda za utvrđivanje rasporeda atoma u rešetkama.

11.2 Teorija difrakcije na periodičkoj rešetci

Kada se istražuje prostorna mikrostruktura materijala, traži se u prvom koraku pravilnost u ponavljanju identične grupe atoma duž sve tri dimenzije kristala. Naime u kristalu postoji jedna osnovna raspodjela atoma unutar jedne jedinice (nazvane ćelijom), koja se periodički ponavlja u svim smjerovima. Da dođemo do sveukupne slike, početak ćemo s jednodimenzionalnom rešetkom dakle onom u kojoj se, na primjer, istovrsni atom pojavljuje nakon svakog pomaka za vektor \vec{e}_1 .

11.2.1

Raspršenje na jednodimenzionalnoj rešetci:

Položaji atoma koji učestvuju u difrakciji su dani s:

$$\vec{r}_n = \vec{r}_0 + n\vec{e}_1 \quad (11.15)$$

n je cijeli broj koji simbolički podsjeća da se radi o 1D problemu. Radimo u aproksimaciji u kojoj projektili (elektroni ili x zrake) dolaze iz dalekog izvora tako da se mogu predstaviti ravnim valom koji dolazi iz smjera danog jediničnim vektorom $\hat{\mu}_i$. Elastično raspršeni val s rešetke detektira se u smjeru $\hat{\mu}_d$. Sa slike zaključujemo da je razlika putova zraka koje se reflektiraju od dva susjedna atoma:

$$\hat{\mu}_i \vec{e}_1 - \hat{\mu}_d \vec{e}_1 \quad (11.16)$$

Uvjet difrakcijskog maksimuma dobijemo kada gornji izraz izjednačimo s višekratnikom valnih duljina projektora λ . Množenjem tako dobivenog izraza s omjerom Planckove konstante i valne duljine imamo:

$$\hat{\mu}_i \frac{h}{\lambda} \vec{e}_1 - \hat{\mu}_d \frac{h}{\lambda} \vec{e}_1 = m\hbar \quad (11.17)$$

Koristeći (11.4) i izlučujući zajednički faktor \vec{e}_1 ,

$$(\vec{p}_i - \vec{p}_d) \cdot \vec{e}_1 = m\hbar \quad (11.18)$$

Ovdje su s p označeni impulsi projektora iz izvora i onog detektiranog u detektoru.

Uvjet difrakcijskog maksimuma prema (11.18) jest da je skalarni produkt transfera impulsa (izraza u okrugloj zagradi) i karakterističnog vektora rešetke \vec{e}_1 višekratnik Planckove konstante \hbar . Ovo možemo grafički lijepo ilustrirati kao na slici. Izaberimo kao os smjer vektora \vec{e}_1 . Na osi izaberimo točku kao ishodište i oko nje opišimo kuglu radijusa :

$$p = |\vec{p}_i| = |\vec{p}_d| \quad (11.19)$$

Gornja jednakost modula upadnog i detektiranog impulsa slijedi iz elastičnosti interakcije projektora s atomom. Vektor \vec{p}_i dolazi iz smjera izvora i impuls je upadnog projektora. Vektor \vec{p}_d odlazi u smjeru detektora. Transfer impulsa (okrugla zagrada u (11.18) je razlika navedenih vektora, kako je to vidljivo u navedenoj zagradi. Kada se vektor izlaznog impulsa varira mijenjanjem po kugli radijusa p , mijenja se i transfer impulsa. Uobičajeno je vektor promjene impulsa pisati kao:

$$\vec{q} \equiv \vec{p}_i - \vec{p}_d \quad (11.20)$$

Ako početni i konačni impuls smjestimo u središte spomenute kugle i iz te točke povučemo ravninu okomitu na vektor \vec{e}_1 , presjek ravnine i kugle je kružnica. Dok vektor \vec{p}_d varira završavajući na kružnici presjeka, vektor transfera impulsa je okomit na vektor \vec{e}_1 , čime je njegov skalarni produkt s tim vektorom jedna nuli. Dakle zračenje emitirano duž plašta stošca kojeg čine središte kugle i kružnica presjeka zadovoljava uvjete difrakcijskog maksimuma (u 11.18 $m=0$). Ako se duž osi \vec{e}_1 pomaknemo u istom smjeru za iznos:

$$q_{e1} = \frac{\hbar}{e_1} \quad (11.21)$$

i kroz tu točku povučemo ponovno ravninu okomitu na os \vec{e}_1 , presjecište nove ravnine s kuglom je geometrijsko mjesto točaka za kraj vektora \vec{p}_d , koji vektori zadovoljavaju (11.18) s vrijednošću $m=1$. Zračenje emitirano po rubu novog plašta je ponovno difrakcijski maksimum. Postupak možemo ponavljati i za više vrijednosti parametra m dok nam pomaci po osi \vec{e}_1 ne iziđu izvan kugle. Tako dobivamo prednje maksimume. Ponavljanjem iste procedure u koracima (11.21) ali u suprotnom smjeru od \vec{e}_1 , dobit ćemo difrakcijske

maksimume na drugoj strani za negativne vrijednosti parametra m . Sumarno možemo dati recept: kreiramo kuglu radijusa p i iz točke gdje \vec{p}_i dotiče kuglu spuštamo ravninu okomitu na \vec{e}_1 i s njom paralelne ravnine međusobno udaljene za (11.21). presjecišta svih tih ravnina s kuglom su kružnice koje zajedno s ishodištem tvore temelj za konstrukciju difrakcijskih maksimuma. Važno je uočiti da su razmaci među ravninama (11.21) obrnuto proporcionalni modulu razmaka atoma u rešetci. Ovo je temelj da se u kasnijim razmatranjima analogoni ovog pomaka nazivaju vektorima inverzne rešetke.

11.2.2

Raspršenje na dvodimenzionalnoj rešetci

Analogon opisa mjesta atoma raspršivača jednodimezionalnom slučaju (11.15) je sada:

$$\vec{r}_{n_1, n_2} = \vec{r}_0 + n_1 \cdot \vec{e}_1 + n_2 \cdot \vec{e}_2 \quad (11.22)$$

Polje raspršivača ima dvije dimenzije i karakteristični vektori su sada: \vec{e}_1 i \vec{e}_2 . Transfer impulsa je i dalje opisan s (11.20). Da bi atomi duž prve osi bili koherentni (da doprinose s istom fazom u detektoru) treba biti kao i prije:

$$(\vec{p}_i - \vec{p}_d) \cdot \vec{e}_1 = \vec{q} \cdot \vec{e}_1 = m_1 h \quad (11.23)$$

Da bi atomi duž druge osi bili koherentni, treba vrijediti izraz analogan izrazu (11.23)

$$(\vec{p}_i - \vec{p}_d) \cdot \vec{e}_2 = \vec{q} \cdot \vec{e}_2 = m_2 h \quad (11.24)$$

Kada u 2D slučaju pravimo grafički prikaz difrakcijskih maksimuma potrebna su nam sada dva skupa ravnina. Jedan okomit na smjer \vec{e}_1 , s međusobnim razmacima danim s (11.21) a drugi okomit na \vec{e}_2 s međusobnim razmacima, kojima je samo indeks 1 zamijenjen s indeksom 2 u izrazu (11.21). Presjecišta ravnina su pravci, a presjeci pravaca s kuglom su točke. Tako u 2D raspršenju maksimume imamo na pravcima na kojima su istovremeno ispunjeni i (11.23) i (11.24).

11.2.3 Raspršenje na trodimenzionalnoj rešetci.

Atomi rešetke su sada poslagani u prostoru kao:

$$\vec{r}_{n_1, n_2, n_3} = \vec{r}_0 + n_1 \cdot \vec{e}_1 + n_2 \cdot \vec{e}_2 + n_3 \cdot \vec{e}_3 \quad (11.24)$$

U potpunoj analogiji s 1D i 2D razmatranjima, nama se samo povećao broj zahtjeva na koherenciju; trebaju vrijediti simultano:

$$\vec{q} \cdot \vec{e}_1 = m_1 h \quad (11.25)$$

$$\vec{q} \cdot \vec{e}_2 = m_2 h \quad (11.26)$$

$$\vec{q} \cdot \vec{e}_3 = m_3 h \quad (11.27)$$

Pri poopćavanju razmatranja s ravninama okomitim na glavne osi kristala, sada imamo tri skupa paralelnih ravnina, čija su presjecišta mreža točaka dimenzija: koje su generalizacije relacije (11.21) za sva tri smjera. Da bismo ustanovili difrakcijske maksimume treba još ispitati da li koja točka inverzne rešetke leži na kugli zadanoj impulsom (valnom duljinom) projektila. Ako ne, da bismo dobili maksimum možemo mijenjati valnu duljinu. Takva se ispitivanja provode i nalaze točke inverzne rešetke da bi se na kraju rekonstruirala trodimenzionalna struktura rasporeda ćelija. Moguće je difrakcijom određivati i sadržaj ćelije, no to zahtijeva dodatni matematički aparat (na primjer konvolucije funkcija i Diracove delta funkcije) i to se odgađa za više godine studija.

11.3

Zaključno o dualnosti „materijalnih čestica“

Korpuskularni aspekt ponašanja elektrona, protona, neutrona i drugih objekata s masom mirovanja smo na temelju eksperimenata već i prije prihvatili. Ovo poglavlje, međutim

demonstrira i valno ponašanje tih objekata. Intuitivno smo potpuno spremni prihvatiti činjenicu da dualna (dvojna) priroda karakterizira objekte mikrosvijeta. Problem kvantna svjetla smo riješili razmatranjima u (10.3) gdje smo imali uz jednačbe za propagaciju kvantata i postulate za statističku interpretaciju. Za „materijalne čestice“ nismo još u toj poziciji. Znamo doduše kako „čestici“ pridijeliti valnu duljinu vala vjerojatnosti da je se tamo locira, ali nam nedostaje analogon Maxwellovih jednačbi. U nerelativističkoj fizici taj je analogon Schroedingerova jednačba. U slijedećem poglavlju ćemo poći od Klein-Gordonove jednačbe koja se dobije pretpostavkom da je izraz za relativističku energiju kvalitetna polazna točka da bude disperzijska jednačba jednačbe valova materije. Zatim ćemo prijeći u nerelativistički režim rada i obrazložiti Schroedingerovu jednačbu.

12) KLEIN GORDONOVA JEDNAČBA I NJEZINA INTERPRETACIJA

Polazimo od temeljnog izraza za energiju relativističke čestice:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (12.1)$$

Ako za energiju upotrijebimo prošireni Einsteinov oblik :

$$E = \hbar \omega \quad (12.2)$$

a za impuls (11.11)

$$p = \hbar k \quad (12.3)$$

tada uz dijeljenje (12.1) s \hbar^2 dobivamo ekvivalentnu relaciju, u kojoj je i informacija o valnom broju vala materije:

$$\omega^2 = c^2 k^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2 \quad (12.4)$$

Uz pokratu:

$$\omega_0^2 = \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2 \quad (12.5)$$

slijedi:

$$\omega^2 = c^2 k^2 + \omega_0^2 \quad (12.6)$$

ovo je disperzijska relacija na putu prema Klein Gordonovoj jednačbi. Naime, početna relacija vrijedi za čestice u vakuumu izvan djelovanja drugih sila. Za kvante svjetla znamo da vrijedi princip superpozicije i da ih se može opisivati u slobodnom prostoru kao ravne valove oblika:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (12.7)$$

Nadalje je jasno da vršenje druge derivacije po vremenu ima ekvivalentni učinak na (12.7)

kao da oblik (12.7) množimo s $-\omega^2$, to jest simbolički:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\omega^2 \psi \quad (12.8)$$

i slično:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = -k_x^2 \psi \quad (12.9)$$

Na ovom mjestu je zgodno uočiti da je prva derivacija valne funkcije po x proporcionalna impulsu. To je u suglasnosti s (12.9), ali i provjerljivo deriviranjem (12.7) i korištenjem (12.3). Tako registriamo upotrebljivu relaciju:

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (12.9a)$$

Jasno da vrijedi i:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (12.10)$$

Kada (12.6) pomnožimo s $\psi(\vec{r}, t)$ i uvrstimo relacije (12.8) do (12.10), dobivamo

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \nabla^2 \psi - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi \quad (12.11)$$

Ovo je čuvena Klein Gordonova jednadžba koju smo sreli već u OF3. Jednadžbu zadovoljavaju ravni valovi (oblik im je (12.7)) a kako je diferencijalna jednadžba linearna to je i superpozicija rješenja. Tako na primjer možemo iz početnog opisa valnog paketa:

$$\psi(\vec{r}, t = 0) = \int A(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k} \quad (12.12)$$

znati stanje paketa u bilo koje vrijeme:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int A(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} d\vec{k} \quad (12.13)$$

Statističku interpretaciju amplitude koju smo stekli već kod elektromagnetskih kvanata zadržavamo i ovdje:

(12.13) reprezentira amplitudu vjerojatnosti da se kvant nalazi u vrijeme t na poziciji \vec{r} ili još preciznije kvadrat modula od (12.13) jest gustoća vjerojatnost nalaženja kvanta na danim vremensko prostornim koordinatama. Dobro je na ovom mjestu objasniti postojanje kauzaliteta u kvantnoj fizici. Pod kauzalitetom podrazumijevamo da iz dobro definiranih početnih uvjeta slijedi kauzalno (uzročno posljedično povezan) razvoj. Kauzalitet se u ovoj situaciji realizira preko (12.11) ili na primjer preko kombinacije (12.12) i (12.13). Našu klasičnu intuiciju smeta da u danom trenutku nemamo dobro definiranu koordinatu ili pak valnu duljinu, ali za opis sustava (12.12) mi znamo precizno njegov razvoj u svim vremenima i to je kvantno-fizikalni kauzalitet.

NAPOMENA: na ovom je mjestu korisno uočiti da prije (12.8) postoji i međukorak:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi = -i\omega\psi \quad (12.8a)$$

13) HEISENBERGOVE RELACIJE NEODREĐENOSTI

Snabdjeveni idejama da se kvanti elektromagnetskog polja i kvanti koje smo povijesno zvali česticama moraju u mikrosvijetu zapravo opisivati preko probabilističkih (vjerojatnostnih) amplituda kakva je na primjer ona u (12.13), sada možemo iskoristiti naše znanje stečeno o valnim paketima iz OF3. tamo smo na primjer pokazali da puls vremenske širine Δt možemo izgraditi iz frekvencijskog intervala $\Delta\omega$ pod uvjetom da vrijedi:

$$\Delta\omega\Delta t \approx \pi \quad (13.1)$$

Ako gornju relaciju pomnožimo s Planckovom konstantantom i iskoristimo Einsteinovu vezu energije i frekvencije (12.2) dobili bismo vezu između neodređenosti u energiji i neodređenosti vremena trajanja:

$$\Delta E\Delta t = \hbar/2$$

Heisenberg je načinio strožiju analizu u kojoj se umjesto ovako procijenjenih granica uzimaju egzaktno definirane statističke pogreške i dobio rezultat istog reda veličine:

$$\Delta E\Delta t \geq \hbar/2 \quad (13.2)$$

Pri proučavanju fenomena difrakcije pokazali smo da neodređenost u širini otvora Δy rezultira u neodređenosti valnog broja u istom smjeru:

$$\Delta k_y \Delta y = \pi \quad (13.3)$$

idući istim koracima kao i gore Heisenberg je dokazao vezu među neodređenostima koordinate i konjugiranog impulsa:

$$\Delta p_y \Delta y \geq \hbar/2 \quad (13.4)$$

Analogne relacije vrijede i za x i z smjerove. (13.2) i (13.4) su vrlo bitne za intuiciju o kvantno-mehaničkim fenomenima. U stvarnosti, ne možemo koordinate (a ni energiju)

poznavati s proizvoljnom točnošću. Što se jače naglašava čestični aspekt, gubi se informacija u komplementarnom valnom dijelu. Produkt pogrešaka ta dva dijela ne može ići ispod minimalne vrijednosti od $\hbar/2$. To je cijena koja se mora platiti za eksperimentalno verificiranu dualnost u mikrosvijetu.

14) SCHRÖDINGEROVA JEDNADŽBA

14.1) Uvodno o Schrödingerovoj jednadžbi

Američki sveučilišni udžbenici preskaču izvođenje Schrödingerove jednadžbe (Berkleyski udžbenik polazi od Klein Gordonove, ali u ključnom trenutku, bez opravdanja, izvedeni oblik koji vrijedi za prostorno konstantan potencijal generalizira na prostorno varijabilan slučaj.) Svi se međutim slažu da je najbolje opravdanje za Schrödingerovu jednadžbu činjenica da korektno predviđa fenomene na atomskom nivou. Mi ćemo slijediti ideje o valovima materije koje smo usvojili u odjeljku 12). Tamo smo krenuli od disperzijske relacije za kvadrat energije relativističke čestice. Ako sada krenemo od nerelativističkog izraza:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (14.1)$$

i proširimo ga s valnom funkcijom dobivamo:

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + V(r)\psi \quad (14.2)$$

Iz (12.8a) imamo

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\frac{E}{\hbar}\psi \quad \text{odnosno} \quad E\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \quad (14.3)$$

Iz (12.9) i analognih relacija za druge dvije koordinate slijedi:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -k_x^2\psi \quad \nabla^2\psi = -k^2\psi \quad (14.4)$$

Vezom valnog broja k i impulsa p (11.11) i uvrštenjem (14.4) i (14.3) u (14.2) imamo:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi \quad (14.5)$$

Ovo je vremenski ovisan oblik Schrödingerove jednadžbe. Valna funkcija zavisi i o prostoru i o vremenu. Ona je temelj kauzaliteta u nerelativističkoj kvantnoj mehanici. Ako je pravilno normirana, kvadrat modula valne funkcije daje gustoću vjerojatnost da se kvant lokalizira na danjoj koordinati u danom vremenu. Traženjem stacionarnih rješenja ove jednadžbe dakle onih koja titraju jedinstvenom frekvencijom :

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{r}) \quad (14.6)$$

(14.5) se reducira na vremenski nezavisan oblik:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi \quad (14.7)$$

Matematički gledano ovaj se problem naziva traženjem vlastitih vrijednosti (E) i vlastitih vektora ψ Hamiltonovog operatora (energije):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (14.8)$$

14.2 Primjer jednodimenzionalne potencijalne barijere:

Razmatramo jednostavan fizikalni problem: kvanti koji zadovoljavaju jednodimezionalnu varijantu jednadžbe (14.7) stalno nailaze na potencijalnu barijeru V , koja je viša od energije kvanata E . Upotrebljavamo stacionarni oblik jednadžbe u smislu da se ništa u vremenu ne

mijenja. Vrijednost potencijala V je jednaka nuli do ishodišta sustava. Na tom mjestu skače na vrijednost V i ne mijenja se iza toga. Tako za vrijednosti koordinate x koje su negativne jednačba (14.7) ima oblik:

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \quad (14.9)$$

Uz pokratu:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (14.10)$$

jednačba prelazi u oblik koji smo već rješavali u OF3:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0 \quad (14.11)$$

Rješenja poznajemo:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (14.12)$$

(14.12) je opće rješenje problema u dijelu prostora u kojem kvanti nisu došli do barijere. U prostoru iza barijere treba riješiti jednačbu:

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V\psi(x) \quad \text{to jest} \quad (V - E)\psi(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \quad (14.13)$$

Uz novu pokratu:

$$\kappa^2 = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2} \quad (14.14)$$

i tu znamo rješenja:

$$\psi(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} \quad (14.15)$$

Kako rješenje fizikalno ne može divergirati u beskonačnosti, uzimamo smjesta:

$$D=0 \quad (14.16)$$

Ovu smo situaciju već sreli u OF3. S lijeve strane je disperzivno područje s oscilatornim rješenjima koja reprezentiraju ulazne i reflektirane valove, a s desne strane je reaktivno područje u kojem val, amplitudno gledajući, eksponencijalno trne. Za razliku od klasične slike u kojoj se čestica reflektira od barijere odmah u točki kontakta, kvanti koji su rješenja Schrödingerove jednačbe dijelom prodiru u barijeru i postoji konačna vjerojatnost da ih se unutar barijere lokalizira! Kako smo do sada dobili argumente i za valnu komponentu ponašanja na primjer elektrona, to ovo prodiranje, koje dolazi od valne komponente svojstva kvanta, nije iznenađenje. Iskoristit ćemo ovu transparentnu situaciju i za pripremu opće procedure koja se primjenjuje za Schrödingerovu jednačbu kada potencijal ima skok. Iz usporedbe (14.9) i (14.13) jasno je da druga derivacija valne funkcije u točki $x=0$ doživljava konačni skok. Međutim, integral druge derivacije valne funkcije je neprekinut! Znači da je prva derivacija neprekinuta a isto vrijedi za valnu funkciju. To je opravdanje za metodu izračunavanja integracijskih konstanti u rješenjima (14.12) i (14.15) koja upotrebljava kontinuitet valne funkcije i njene derivacije u točki $x=0$ da poveže rješenja (14.12) i (14.15) i poveže navedene konstante. Pravi profesionalni pristup je konstatacija da je i kvocijent prve derivacije funkcije i valne funkcije jest također kontinuiran. Ovim se zaobilazi pitanje takozvane normalizacijske konstante, jer je ona ista za obadvije domene, a koja ponekad može biti problem, ta normalizacijska konstanta je ista u valnoj funkciji i derivaciji i u njihovom omjeru (logaritamskoj derivaciji) se pokratu. Mi ćemo ovdje problem normalizacijske konstante izbjeći pretpostavkom da je amplituda upadnog vala :

$$A = 1 \quad (14.17)$$

Time neprekinutost valne funkcije u $x=0$ daje:

$$1+B=C \quad (14.18)$$

Neprekinutost prve derivacije daje:

$$ik - ikB = -\kappa C \quad \text{ili} \quad 1 - B = i \frac{\kappa}{k} C \quad (14.19)$$

Iz (14.18) i (14.19) proizlazi zbrajanjem:

$$C = \frac{2}{1 + i \frac{\kappa}{k}} \quad (14.20)$$

Uvrštavanjem (14.20) u (14.18) dobivamo i:

$$B = C - 1 = \frac{1 - i \frac{\kappa}{k}}{1 + i \frac{\kappa}{k}} \quad (14.21)$$

Kako su u brojniku i nazivniku (14.21) kompleksno konjugirani brojevi, modul od B je jedinica, to jest jednak je modulu od A. Kako odnos A i B određuje koeficijent refleksije, očito se radi jednakosti modula A i B svi kvanti reflektiraju, no pri tome ipak djelomično prodiru u barijeru u područje koje je klasično zabranjeno.

Radi potpunosti ćemo obraditi i situaciju kada je energija projektila veća od potencijalne barijere. Što se tiče lijevog dijela problema i diferencijalna jednadžba (14.11) i njeno opće rješenje (14.12) ostaju na snazi. Promjena se dešava samo na desnoj strani od ishodišta. Analitički oblik jednadžbe (14.13) je isti, no radi promjene u odnosu apsolutnih vrijednosti energije i visine barijere, oportuno je definirati novu veličinu k' :

$$k'^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \quad (14.22)$$

Opće rješenje na desnoj strani je sada:

$$\psi(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \quad (14.23)$$

Kako se iz beskonačnosti valovi ne reflektiraju konstanta koja bi mjerila njihov povratak, D, iščezava:

$$D=0 \quad (14.24)$$

Procedurom koju smo gore uveli ponavljajući $A=1$, smjesta dobivamo:

$$1 + B = C \quad (14.25)$$

$$1 - B = \frac{k'}{k} C \quad (14.26)$$

Time slijedi:

$$C = \frac{2}{1 + \frac{k'}{k}} \quad (14.27)$$

$$B = \frac{k - k'}{k + k'} \quad (14.28)$$

Ovaj smo dio odradili da bismo pokazali ponovnu razliku klasičnog i kvantnog slučaja. Naime neiščezavanje koeficijenta B, iako se očito amplituda za refleksiju smanjila prema jedinici koju vrijednost ima upadni val, pokazuje da se dio kvantata reflektira iako imaju energiju za prijelaz barijere. Klasični projektil se tako ne ponaša. Na primjer elektronu bi se pri ulasku u odbojni potencijal samo smanjila kinetička energija, ali bi svi elektroni prošli skok u potencijalu!

14.3 Transmisija kroz pravokutnu potencijalnu barijeru konačne debljine

Udžbenici redovito spominju ovu problematiku, naročito stoga što se rezultati ovog problema i danas koriste u profesiji samo na uvijek novim konfiguracijama. Problem se u 1D prikazu

definira u tri područja u području i) potencijal je nula i to područje završava ishodištem $x=0$. U području ii) potencijal V je iznad energije čestice E . Područje ii) se prostire od ishodišta do $x=a$. u području iii) ponovno je potencijal jednak nuli. Koristeći metodologiju iz 14.2 pišemo rješenje u i) :

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (14.29)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (14.30)$$

Za razliku od prijašnjeg tretmana ne ćemo koristiti $A=1$, nego ćemo provesti tretman egzaktno. To proizlazi iz činjenice da nam se u transmisijskom faktoru normalizacija upadnog vala pokra! U području ii) početni oblik rješenja je isti kao i za područje gornjeg problema, ali unutar barijere.

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \quad (14.31)$$

$$\kappa^2 = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2} \quad (14.32)$$

U području iii) odmah ćemo uzeti samo val koji odlazi u beskonačnost tako da je koeficijent reflektiranog vala jedna nuli. Tako je u iii) rješenje:

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \quad (14.33)$$

Izjednačavanjem funkcijskih vrijednosti u $x=0$ to jest oblika (14.29) i (14.31) imamo:

$$A + B = C + D \quad (14.34)$$

Izjednačavanjem vrijednosti njihovih derivacija slijedi:

$$A - B = \frac{i\kappa}{k}(C - D) \quad (14.35)$$

Zbrajanjem (14.34) i (14.35) slijedi:

$$2A = C\left(1 + i\frac{\kappa}{k}\right) + D\left(1 - i\frac{\kappa}{k}\right) \quad (14.36)$$

Pri spajanju rješenja područja ii) i iii) u točki $x=a$ radi izjednačavanja funkcijske vrijednosti imamo:

$$Ce^{-\kappa a} + De^{\kappa a} = Fe^{ika} \quad (14.37)$$

Preko izjednačavanja derivacija dobivamo:

$$Ce^{-\kappa a} - De^{\kappa a} = -\frac{ik}{\kappa} Fe^{ika} \quad (14.38)$$

Zbrajanjem (14.37) i (14.38) dobivamo:

$$C = F \frac{e^{ika}}{2} \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa a} \quad (14.39)$$

a oduzimanjem:

$$D = F \frac{e^{ika}}{2} \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-\kappa a} \quad (14.40)$$

Uvrštavanjem (14.39) i (14.40) u (14.36) nakon izlučivanja zajedničkog faktora i grupiranja dijelova s istim realnim eksponencijalnim faktorom imamo:

$$2A = F \frac{e^{ika}}{2} \left\{ e^{\kappa a} \left[2 + i\left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right) \right] + e^{-\kappa a} \left[2 + i\left(\frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k}\right) \right] \right\} \quad (14.41)$$

Odatle možemo izračunati A i odijeliti realni od imaginarnog dijela izraza:

$$A = Fe^{ika} \left\{ \frac{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}}{2} + \frac{i}{2} \frac{\kappa^2 - k^2}{k\kappa} \frac{e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}}{2} \right\} \quad (14.42)$$

Ovo se može pisati i preko hiperbolnih funkcija:

$$A = Fe^{ika} \left\{ ch\kappa a + \frac{i}{2} \frac{\kappa^2 - k^2}{k\kappa} sh\kappa a \right\} \quad (14.43)$$

Transmisijski faktor je omjer kvadra modula F i A . Iz (14.43) slijedi da je kvadrat modula vitičaste zgrade u suštini inverzna vrijednost transmisijskog faktora T. Dakle:

$$T^{-1} = ch^2\kappa a + \frac{1}{4} \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{k^2\kappa^2} sh^2\kappa a \quad (14.44)$$

Promjenom predznaka u okrugloj zagradi to se može pisati i kao:

$$T^{-1} = ch^2\kappa a + \frac{1}{4} \frac{(\kappa^2 + k^2)^2}{k^2\kappa^2} sh^2\kappa a - sh^2\kappa a \quad (14.45)$$

korištenjem veze među kvadratima sh i ch dalje slijedi:

$$T^{-1} = 1 + \frac{1}{4} \frac{(\kappa^2 + k^2)^2}{k^2\kappa^2} sh^2\kappa a \quad (14.46)$$

Iz eksplicitnih izraza za k i κ (14.30) i (14.32) to se svodi na:

$$T^{-1} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V^2}{E(V - E)} sh^2\kappa a \quad (14.47)$$

U literaturi se umjesto ovog egzaktnog izraza koristi za studente prihvatljiviji oblik:

$$T \approx e^{-2\kappa a} \quad (14.48)$$

Studenti mogu procjenjivati kada će upotrebljavati ovu jednostavniju formu , a i shvatiti da je to prihvatljivo u prilici kada kvadrat prvog člana hiperbolnog sinusa dominira ponašanjem izraza.

Značenje ovog rezultata je bilo od velike važnosti u kvantnoj fizici. George Gamow je na temelju ovakvog razmatranja predvidio i objasnio svojstva alfa raspada atomskih jezgri. U njegovoj slici, alfa čestica je zarobljena u jezgri potencijalnom barijerom, koja je mješavina nuklearne i Coulombske sile. Ona nasrće mnogo puta na tu barijeru i iako je čestica s masom, ona na temelju valnih svojstava uspijeva tunelirati kroz barijeru! U kolegiju OF3 mi smo demonstrirali analogan efekt za mikrovalove. Kada su mikrovalovi ulazili u dio (zračni otvor) u kojem zbog indeksa loma nisu bili dozvoljeni ući i kada se iza tog otvora nalazio ponovno materijal u kojem im je bila dozvoljena propagacija, oni su (sa smanjenim intenzitetom) također tunelirali kroz barijeru.

14.4 Tuneliranje kroz općenitiju barijeru

Ako je potencijalna barijera varijabilne visine, najprije odredimo točke na kojima je tuneliranje potrebno, to jest one u kojima je $V > E$. Zatim rascjepkamo to područje u tanje zone , za koje možemo pretpostaviti da bi za njih mogao vrijediti gore diskutirani tretman. Jasno je da je vjerojatnost transmisijske produkt vjerojatnost da se penetrira svaka pojedina barijera:

$$T = T_1 \cdot T_2 \cdot T_3 \dots T_n \quad (14.49)$$

Gdje je T_i transmisijski koeficijent za i-ti dio barijere. Ako se (14.49) logaritmiramo,

$$\ln T = \ln T_1 + \ln T_2 + \dots \ln T_n \quad (14.50)$$

No prema (14.48),

$$\ln T_i \approx -\frac{2\Delta x}{\hbar} \sqrt{2m[V(x_i) - E]} \quad (14.51)$$

Uvrštenjem (14.51) u (14.50) dobivamo:

$$\ln T = \sum_i (-) \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m[V(x) - E]} \Delta x_i \Rightarrow \int_a^b (-) \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m[V(x) - E]} dx \quad (14.52)$$

Tako je za barijeru općenitijeg oblika transmisijski koeficijent:

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[V(x)-E]} dx} \quad (14.53)$$

Podsjećamo da su a i b vrijednosti varijable x na kojima vrijednost potencijala $V(x)$ nadilazi energiju projektila.

15. NORMALIZIRANJE VALNE FUNKCIJE I JEDNADŽBA KONTINUITETA

15.1 Normalizacija

Mi smo Schrödingerovu jednadžbu napisali u takozvanoj koordinatnoj reprezentaciji. To podrazumijeva da su sve veličine opisane ili kao funkcije prostornih koordinata ili operatora (obično diferencijalnih) opisanih preko istih koordinata. To ne mora biti općenito slučaj kako će se učiti u naprednijim kolegijima kvantne fizike. Fizikalno značenje smo već dotaknuli. U ovom slučaju je kvadrat modula te funkcije mjera vjerojatnosti lokalizacije kvanta na danoj koordinati. No ukupna vjerojatnost nalaženja kvanta u cijelom prostoru je jednaka jedinici. Dakle, u slučaju jednodimenzionalnog problema treba vrijediti za tzv. normaliziranu valnu funkciju svojstvo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_N(x)|^2 dx = 1 \quad (15.1)$$

Indeks N uz valnu funkciju ovdje posebno naglašava da je ta funkcija korektno normalizirana. U slučaju da nismo vodili računa o normalizaciji valne funkcije, to jest da imamo rješenje Schrödingerove jednadžbe ali da vrijedi:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = a \quad (15.2)$$

Tada je normalizirana valna funkcija:

$$\psi_N(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \psi(x) \quad (15.3)$$

15.2 Jednadžba kontinuiteta

Dok nam stalna norma valne funkcije osigurava da čestice ni ne nastaju ni ne nestaju u procesu opisanom Schrödingerovom jednadžbom, dobro je znati na račun čega se eventualno može mijenjati kvadrat modula valne funkcije u nekom dijelu prostora. Pođimo od (14.5).

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V(x)\psi \quad (15.4)$$

Ovu jednadžbu pomnožimo (s lijeva) s konjugirano kompleksnom vrijednošću valne funkcije ψ^* . Napišimo po tome konjugirano kompleksnu jednadžbu od (14.5):

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* + V(\vec{r})\psi^* \quad (15.5)$$

Ovu jednadžbu pomnožimo na isti način s ψ . Po odbijanju ove dvije tvorevine jedne od druge dobivamo:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} (\psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi) \right] = 0 \quad (15.6)$$

Ovo možemo usporediti s jednadžbom kontinuiteta koju smo već upoznali u OF2:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (15.7)$$

Vidimo da u kvantnoj mehanici ulogu struje preuzima:

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi) \quad (15.8)$$

i analogno za ostale komponente struje. Kao zgodnu primjenu (15.6) možemo postaviti pitanje da li normalizacijski faktor a iz (15.2) zavisi o vremenu? Pitanje možemo postaviti i preko vremenskog deriviranja njegove inverzne vrijednosti:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{a} &= \text{prema (15.2)} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \text{prema (15.6)} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \frac{\partial}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}) \right] dx = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0 \end{aligned} \quad (15.9)$$

Posljednja jednakost je posljedica iščezavanja valnih funkcija u beskonačnosti. Kada to ne bi bilo istinito, valne funkcije se ne bi dale normirati. Ovdje ćemo dati upozoravajući komentar o ravnim valovima. Oni su vrsta rješenja Schrödingerove jednačbe bez potencijala i ne daju se normirati. Matematički rečeno oni ne spadaju u klasu kvadratno integrabilnih funkcija.

16) RAZMATRANJA O STACIONARNIM STANJIMA SCHRÖDINGEROVE JEDNADŽBE

16.1) Uvod

Linijski spektri emitirani iz atoma bili su prva bitna evidencija za egzistenciju stacionarnih stanja, koja titraju dobro definiranim frekvencijama. Dakle njihov opis je jasno oblika:

$$\psi_n(t) \propto e^{-i\omega_n t} \quad (16.1)$$

gdje je naravno :

$$\omega_n = E_n / \hbar \quad (16.2)$$

a E_n energija n-tog stanja atoma. Ove su se energije nazivale vlastitim energijama a pridružene valne funkcije vlastitim stanjima atoma. Ponovit ćemo i ovdje relaciju (14.7) koja opisuje diferencijalnu jednačbu, koju u prostornom dijelu mora zadovoljiti valna funkcija nakon što smo u (16.1) napisali oblik zavisnosti u vremenskom dijelu:

$$E_n \psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_n + V(\vec{r}) \psi_n \quad (16.3)$$

U jednodimenzionalnom slučaju valna funkcija, naravno, zavisi samo o koordinati x kao i potencijal. Umjesto kvadrata nable pojavljuje se samo druga derivacija po x .

16.2) Potencijalna jama s beskonačno visokim zidovima.

Ovo je edukacijski primjer, koji se u realnosti ne realizira. Potencijala nema u intervalu: $0 < x < a$. Izvan tog intervala, potencijal je neizmjereno visok. U području neizmjereno visokog potencijala valna funkcija iščezava. To se lako vidi počevši od konačno visokog potencijala u kojem bi prema našem istraživanju potencijalne barijere valna funkcija to jače trnula, što je barijera viša. Dakle u limesu neizmjerne visine, valna funkcija iščezava. Unutar opisanog intervala imamo, nama već poznata, oscilatorna rješenja jednodimenzionalne varijante jednačbe (16.3):

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (16.4)$$

gdje je valni broj k

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (16.5)$$

Radi iščezavanja valne funkcije na zidovima barijere

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (16.6)$$

rješenja su oblika:

$$\psi_n(x) = A \sin k_n x \quad (16.7)$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (16.8)$$

a prema (16.5)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (16.9)$$

Iz uvjeta normalizacije (15.1) slijedi:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (16.10)$$

Ako želimo kompletnu vremensko –koordinatnu zavisnost valne funkcije, ona glasi:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (16.11)$$

Gustoću vjerojatnosti nalaženja kvanta na koordinati x dobivamo iz kvadrata modula (16.11) to jest:

$$P_n(x) = \frac{2}{a} \sin^2(n\pi x / a) \quad (16.12)$$

16.3) Fenomen titranja vjerojatnosti nalaženja u superpoziciji stacionarnih stanja.

Iz (16.12) je jasno da se raspodjela gustoće vjerojatnosti u prostoru za jedno stacionarno stanje ne mijenja u vremenu. S druge strane već znamo da je i superpozicija rješenja ponovno rješenje. Radi jednostavnosti uzimamo samo superpoziciju dva stanja, koja titraju frekvencijama ω_1 i ω_2 . U tom slučaju vjerojatnost nalaženja nakon ispravne normalizacije glasi:

$$P(x,t) = \frac{1}{a} \left[\sin^2(k_1 x) + \sin^2(k_2 x) + 2 \sin(k_1 x) \sin(k_2 x) \cos(\omega_2 - \omega_1)t \right] \quad (16.13)$$

Očito da u mješavini stanja raspored kvanta po prostoru nije stalan nego se mijenja; on titra periodički frekvencijom prijelaza:

$$\omega_2 - \omega_1 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (16.14)$$

Sustav dolazi u superpoziciju stanja samo dodatnom interakcijom (na primjer pod utjecajem vanjskog elektromagnetskog vala; naročito ako je on u rezonanciji s (16.14)).

16.4) Opće rješenje Schrödingerove jednačine:

Kao što smo u OF3 kombinirali vlastita rješenja u opće rješenje, slično vrijedi i u ovom slučaju. Ovdje su izostavljeni teoremi i dokazi no u postupnoj izgradnji predodžbe o kvantnoj mehanici spominjemo da se linearnim superponiranjem rješenja dobiva (opće) rješenje:

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \psi_n(x,t) \quad (16.15)$$

Upravo je jednodimenzionalna potencijalna jama s beskonačno visokim zidovima jedan takav primjer.

16.5) Razmatranja potankosti važnih za postojanje diskretnih stacionarnih stanja.

Ostajemo u jednodimenzionalnom modelu, radi bolje zornosti. Diskretna stacionarna stanje dobivamo zahtjevom da valna funkcija iščezava u beskonačnosti te se tako može normirati (uvjet (15.1)). Ovdje ćemo dati slikovito ilustriranje kako ovaj zahtjev vodi na diskretne vrijednosti energije E_n . (Prirodno, vezanje kvanta u neko područje može prouzročiti samo privlačni/atraktivni/negativni potencijal.) Pogledat ćemo predznak zakrivljenosti valne funkcije u različitim okolnostima. Predznak zakrivljenosti funkcije određen je predznakom druge derivacije. Zakrivljenost je inače predmetom na primjer diferencijalne geometrije, no

studenti se mogu empirijski uvjeriti da zakrivljenost funkcije određuje njezina druga derivacija (brzo mijenjanje prve derivacije indicira brzo mijenjanje funkcije i mali radijus zakrivljenosti). Predznak omjera druge derivacije i funkcijske vrijednosti mogu studenti očitati s crteža krivulje koja se svija prema koordinatnoj osi x . Bila funkcija iznad ili ispod x osi, taj je omjer negativan. Obratno, ako se funkcija svija od x osi, taj je omjer pozitivan. Drugu derivaciju možemo računati iz Schrödingerove jednadžbe:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi(x) \quad (16.16)$$

Odatle je očito da oblikovno ponašanje valne funkcije zavisi o veličinskom odnosu ukupne energije E i lokalne vrijednosti potencijala na koordinati x : $V(x)$. Ako je energija veća od potencijala, valna funkcija će se svijati prema osi, što povlači oscilatorni oblik ponašanja. Ako je energija manja od potencijala, valna funkcija će imati oblik eksponencijalnog vala; ona će, na primjer, u beskonačnosti trnuti. Da bismo imali normalizabilno rješenje Schrödingerove jednadžbe, ono mora u beskonačnosti iščezavati. Dakle, ako krećemo od lijeve strane potencijala proizvoljnog oblika, on mora biti veći od ukupne energije rješenja u tom dijelu. Kada dođemo u privlačni dio potencijala, valna funkcija može privremeno zaoscilirati. Na rubu potencijala ne će nam biti problem prilagoditi dvije konstante oscilatornog rješenja funkcijskoj vrijednosti i prvoj derivaciji trnućeg vala koji opstoji u lijevoj beskonačnosti. Problem se javlja na rubnom dijelu izlaska iz potencijalne jame. Sada imamo determiniranu i funkcijsku vrijednost i prvu derivaciju valne funkcije, no radi TRNUĆEG karaktera valne funkcije, kada odlazimo u beskonačnost, na raspolaganju nam je samo jedna konstanta (eksponencijalno eksplodirajuća varijanta nam nije dozvoljena). Generalno, problem glatkog nastavka valne funkcije na desnoj strani više ne možemo riješiti. Ipak, za neke diskretne vrijednosti ukupne energije E , logaritamska derivacija unutar potencijala i logaritamska derivacija eksponencijalno trnućeg rješenja mogu koincidirati, no samo za tu diskretnu vrijednost energije. Tako imamo generalni zaključak: vlastita rješenja Schrödingerove jednadžbe koja se mogu normirati imaju samo diskretne vrijednosti ukupne energije. Matematičari, u svom rječniku, postupak određivanja vlastitih vrijednosti energije i vlastitih valnih funkcija: E_n i ψ_n nazivaju dijagonalizacijom Hamiltonijana H operatora, koji smo već uveli i koji ponavljamo u (16.17)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (16.17)$$

16.6) WKB postupak

Ovaj postupak je bio popularniji u vrijeme kada se kvantno mehaničke probleme nastojalo rješavati analitičkim putem. Razvojem računala, može se probleme rješavati i numeričkim putem. Mi ćemo kratko upoznati WKB metodu kako bi nam pomogla dobiti prečicom rješenja kvantno mehaničkog oscilatora, a time i dobiti uvid u dio molekularnih spektara. Razmatramo potencijal koji može generirati vezana stanja. Nazovimo točkama obrata x_1 i x_2 koordinate na kojima se ukupna energija sistema izjednačava s vrijednosti potencijala. Studentima bi trebalo biti prihvatljivo, da u tom području imamo oscilatorno rješenje i da se u osnovnom stanju faza tog titranja mijenja za $\pi/2$. U idućem stanju ta se faza mijenja za $\pi + \pi/2$, a u višim stanjima se samo povećava broj π višekratnika. Tako se rješenje pretpostavlja u obliku:

$$\psi(x) = A(x) \sin[f(x)] \quad (16.18)$$

Ovdje je $A(x)$ sporije mijenjajuća funkcija, a $f(x)$ je faza valne funkcije. Promjenu faze lako računamo iz valnog broja i nama poznatog izraza za valni broj:

$$df(x) = k(x)dx = \frac{p(x)}{\hbar} dx = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - V(x)]} dx$$

Ukupna promjena faze između točaka obrata je stoga:

$$\Delta f = \int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - V(x)]} dx \quad (16.19)$$

Prema diskusiji kolika treba biti promjena faze na početku ovog odjeljka imamo uvjet:

$$\frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[E - V(x)]} dx = (n + \frac{1}{2})\hbar \quad (16.20)$$

Ako podintegralnu funkciju označimo s $H(E)$,

Treba riješiti jednačinu :

$$H(E) = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar \quad (16.21)$$

16.7 Primjena WKB metode na kvantni harmonički oscilator:

Podsjećamo na notaciju i svojstva klasičnog harmoničkog oscilatora:

$$V(x) = \frac{1}{2} Kx^2 \quad (16.22)$$

Maksimalna odstupanja od ravnoteže su povezana s ukupnom energijom:

$$V(x_{\max}) = \frac{1}{2} Kx_{\max}^2 = E \quad (16.23)$$

Time su određene točke obrata iz prijašnjeg odjeljka:

$$x_1 = -x_{\max} = -\sqrt{\frac{2E}{K}} \quad x_2 = x_{\max} = \sqrt{\frac{2E}{K}} \quad (16.24)$$

Uz gornje eksplicitne izraze za potencijal i točke obrata, WKB rezultat (16.21) je:

$$\int_{-x_{\max}}^{x_{\max}} \sqrt{2m \left[\frac{1}{2} Kx_{\max}^2 - \frac{1}{2} Kx^2 \right]} dx = \sqrt{mK} \int_{-x_{\max}}^{x_{\max}} \sqrt{[x_{\max}^2 - x^2]} dx = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar \quad (16.25)$$

Integral u srednjem izrazu lanca (16.25) je zapravo površina kruga radijusa x_{\max} , pa imamo:

$$\sqrt{mK} \cdot \frac{\pi x_{\max}^2}{2} = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar \quad (16.26)$$

Nakon sređivanja i uključivanja (16.23) dobivamo:

$$E \sqrt{\frac{m}{K}} = (n + \frac{1}{2})\hbar \quad (16.27)$$

Očito energija zavisi o diskretnom cijelom broju n . Stoga joj možemo pripisati indeks n . Uz poznatu vezu mase, konstante oscilatora K i kružne frekvencije oscilatora ω_0 dobivamo:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\omega_0 \hbar = (n + \frac{1}{2})\hbar \nu_0 \quad (16.28)$$

Iako je (16.28) dobivena WKB metodom, ona je korektna. Studenti trebaju memorirati da su nivoi kvantnog harmoničkog oscilatora diskretni i stalnog međusobnog razmaka.

17) MOLEKULARNI SPEKTRI

17.1) Uvod

U ovom smo kolegiju išli direktno na atomske spektre. Naime oni su jedan od direktnih pokazatelja potrebe za novom, kvantnom, fizikom. Obogaćeni novom slikom o mikrosvijetu pogledati ćemo globalna svojstva molekularnih spektara. Molekularni spektri su mnogo

zamršeniji, jer se u njima pojavljuju dodatni stupnjevi slobode osim stacionarnih stanja elektrona unutar Coulombskog polja. S druge strane, iako ne ćemo razmatrati nuklearne spektre, ti novi, dodatni stupnjevi slobode javljaju se i u nuklearnim spektrima. Grubo rečeno, molekule nastaju procesima u kojima vanjski elektroni atoma pojedinih elemenata nalaze da im je energijski povoljnije ili dijelom prijeći u polje drugog atoma, čime se među atomima javlja privlačenje temeljeno na razlici u naboju ili formiranjem zajedničkih staza više elektrona oko zajedničkog polja dva atoma. Na temelju ove slike odmah uočavamo da se pobuđenja molekule mogu realizirati različitim putovima. Jedan je više energijsko stanje unutar cijelog Coulombskog polja jezgre za vanjski elektron. Drugu mogućnost razumijemo iz našeg klasičnog znanja stabilne ravnoteže. Ako sustav izvedemo malo iz ravnoteže, sila je elastična i nastaje harmonički oscilator. Jezgre atoma, u naprimjer dvoatomskoj molekuli, mogu zatriti oko svog ravnotežnog položaja. Kvantni oscilator, koji smo upravo studirali daje odgovor da će spektar vibriranja biti ekvidistantan. Dvoatomski model daje nam i moguće razumijevanje rotacijskih spektara. Dvoatomska molekula može rotirati oko osi okomite na njenu os simetrije. U ovom odjeljku ćemo nastojati uspostaviti procjenu razmaka nivoa za ta tri moguća modela uzbude molekule.

17.2) Vibracijski spektri i usporedba s jednočestičnim

Empirijska je činjenica da se privlačenje atoma u dvoatomskoj molekuli daje parametrizirati kao:

$$V(r) = R_\infty \left(\frac{r - r_0}{a_0} \right)^2 + V(r_0) \quad (17.1)$$

gdje su r varijabilni razmak među molekulama, r_0 međuatomski razmak (jezgri) kod kojeg je molekula najstabilnija, R_∞ je poznata Rydbergova konstanta čije porijeklo i numeričku vrijednost imamo u (12.6). a_0 je Bohrov radijus vodikovog atoma (5.3). Jasno je da (17.1) opisuje potencijal harmoničkog oscilatora s oscilatorovom konstantom K :

$$K = \frac{2R_\infty}{a_0^2} \quad (17.2)$$

Razmak među nivoima za vibracije međuatomskog razmaka možemo dobiti kombiniranjem (17.2) izraza za konstantu oscilatora, M reduciranu masu dvoatomskog sustava i relacije (16.27). Notaciju frekvencije koja tom razmaku pripada ω_0 ćemo zamijeniti s ω_{vib} da nas podsjeti da se radi o harmoničkim vibracijama molekule.

$$\omega_{vib} = \sqrt{\frac{K}{M}} = \sqrt{\frac{2R_\infty}{a_0^2 M}} = \sqrt{\frac{\alpha^2 m_e c^2}{\left(\frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c^2}\right)^2 M}} \quad (17.3)$$

Nakon sređivanja zaključujemo:

$$\omega_{vib} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m_e}{M}} \quad (17.4)$$

Kada to usporedimo s frekvencijama reda veličine vodikovog atoma koje možemo dobiti iz (6.11), slijedi:

$$\frac{\omega_{vib}}{\omega_e} = \sqrt{\frac{m_e}{M}} \quad (17.5)$$

Odavle je jasno da su vibracijski nivoi mnogo gušće postavljeni od elektronskih stanja. Gruba procjena daje bar faktor 30.

17.3) Rotacijski molekularni spektri

Ako se koristimo znanjem iz OF1 o momentu inercije, za dvije mase koje rotiraju lako pokazujemo u sustavu centra mase:

$$I = M_1 r_1^2 + M_2 r_2^2 = \mu r^2 \quad (17.6)$$

M su označene mase atoma, indeksirani r su njihove udaljenosti od CM, μ je njihova reducirana masa a r je njihov razmak.

Poznato je da se kutna količina gibanja klasično povezuje s momentom inercije i kutnom frekvencijom:

$$L = I\omega \quad (17.7)$$

Bohr je međutim uveo relaciju, koju smo već koristili kod vodikovog atoma:

$$L = \hbar = I\omega \quad (17.8)$$

Iz (17.8) možemo procijeniti rotacijsku frekvenciju molekule ω_{rot} , potom koristiti (17.6) u kojem će za dvoatomsku molekulu reducirana masa biti M , a razmak među atomima već upotrebljavani radijus vodikovog atoma:

$$\omega_{rot} = \frac{\hbar}{I} \approx \frac{\hbar}{Ma_0^2} \quad (17.9)$$

Uvrštenjem rezultata (5.3) dalje slijedi:

$$\omega_{rot} \approx \frac{\hbar}{M \left(\frac{\hbar}{\alpha m_e c^2} \right)^2} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{\hbar} \frac{m_e}{M} \quad (17.10)$$

Kada u prvom faktoru (17.10) prepoznamo ω_e prema (6.11), slijedi:

$$\frac{\omega_{rot}}{\omega_e} \approx \frac{m_e}{M} \quad (17.11)$$

Ovim rezultatom vidimo da je prvi rotacijski nivo tri reda veličine manje odmaknut od svog susjeda nego jednočestični nivo. Ipak, rotacijski spektri se razlikuju kvalitativno od vibracijskih spektara u činjenici da se razmaci unutar obitelji rotacijskih spektara kvadratično povećavaju. Naime, poznat nam je klasični rezultat:

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2I} \quad (17.12)$$

Uz Bohrovu pretpostavku:

$$L = n\hbar \quad (17.13)$$

Vidimo kvalitativno obrazloženje tvrdnje o kvadratičnom povećanju razmaka nivoa.

17.4) Vrpčasta struktura molekularnih spektara.

Rezultate odjeljka 17. možemo ovako sumirati. Molekule su mnogo složenije za teorijsku obradu od atoma. U atomu postoji odlično definiran centar sile (Coulombske) kojem su podložni elektroni. Iako interakcije među elektronima kompliciraju sliku sa samo jednim centralnim potencijalom, centralni potencijal za atom u praksi odlično predviđa poredak diskretnih i oštro definiranih nivoa. Kod molekule imamo bitni iskorak. Mala je promjena da postoji još uvijek neka vrsta zajedničkog potencijala s dva izvora. No bitna je promjena da dvije jezgre pružaju mogućnost međusobnog titranja i rotiranja. Ti nivoi su, međutim mnogo gušće postavljeni, tako da se u molekuli na svako jednočestično stanje superponira i „kontinuum“, stanja rotacijsko-vibracijskog karaktera. Taj se kontinuum na nekoj spektralnoj točki prekida, jer molekularne sile ne mogu držati molekulu na okupu, ako je se rotacijsko-vibracijski previše uzbudi. Eksperimentalno je tada opažanje da se na svaki jednočestični nivo superponira kontinuum rotacijsko-vibracijske aktivnosti, koji je međutim u energiji ograničen. Rezultat je da molekularni spektri nisu tako oštri kao atomski, nego su vrpčastog karaktera.

17.5) Molekularni spektri i modeliranje nuklearnih spektara

Razmatranja molekularnih spektara nisu sama po sebi svrha. Naime i u atomskoj jezgri imamo iskustvo o postojanju centralnog potencijala. No još je Bohr uočio mogućnost takozvanog kolektivnog modeliranja za nuklearne spektre. U takozvanom modelu kapljice, dio nukleona može udruženo „putovati“ površinom jezgre, tvoreći rotacijski stupanj slobode. S druge strane, površina jezgre može vibrirati, što je vibracijski stupanj slobode. Razmatranja o molekularnim spektrima pružaju nam stoga intuiciju i za područja fizike daleko od problematike molekula.

18) PORIJEKLO BOHROVIH KVANTIZACIJSKIH POSTULATA

Teorija koja bi se temeljila na neobrazloženim postulatima ne bi se smatrala dobrom teorijom. Schrödingerova jednačba jest dobro utemeljen teorijski fundament za opis valova materije u nerelativističkoj domeni mikrosvijeta. U ovom odjeljku ćemo indicirati kvalitativne korake koje student treba proći u jednom stupnju obrazovanja, kako bi bolje zasnovao vlastito razumijevanje Bohrovih postulata. Polazna točka jest Schrödingerova jednačba u tri dimenzije.

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi \quad (18.1)$$

Za jednočestičnu Coulombsku silu, koja je centralna vrlo je upotrebljivo umjesto Kartezijevih koordinata upotrebljavati prostorne polarne koordinate. Operator kvadratne nable se transformacijskim pravilima prevodi u oblik za polarne koordinate. U kolegiju Klasične mehanike studenti će se upoznati s transformacijskim postupkom za diferencijalne operatore. Operator kvadrata nable poprima oblik:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (18.2)$$

Radi centralnosti Coulombskog potencijala u (18.1), opravdano je pretpostaviti da se rješenje problema daje separirati u odvojene funkcije radijalne i kutnih koordinata:

$\psi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$. To separiranje uzrokuje da se (18.1) prevodi u slijedeću diferencijalnu jednačbu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\Theta\Phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R\Phi}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \frac{R\Theta}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right] + V(r)R\Theta\Phi = ER\Theta\Phi \quad (18.3)$$

Dijeljenjem s faktorom $R\Theta\Phi$ i dijeljenjem s faktorom ispred uglate zagrade u (18.3) te dovođenjem faktora $r^2 \sin^2 \vartheta$ u brojnik, dobivamo prikladniji oblik (18.3):

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \vartheta [E - V(r)] \quad (18.4)$$

Sada nam je prilika naučiti često upotrebljavani zaključak pri parcijalnim diferencijalnim jednačbama. Lijeva i desna strana od (18.4) nisu funkcije iste varijable. To je moguće samo ako su i jedna i druga strana jednake istom broju nezavisnom od varijabli. Taj ćemo broj označiti kako se vidi u (18.5):

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m_{proj}^2 \Phi \quad (18.5)$$

Sada se i desna strana može pisati nakon očitog manipuliranja:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + 2m \frac{r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = \frac{m_{proj}^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) \quad (18.6)$$

Ponovno u (18.6) imamo situaciju da dvije strane jednadžbe ne zavise o istim varijablama. Uvodimo o varijablama nezavisnu vrijednost koju poprima i lijeva i desna strana. Sukladno raširenoj notaciji ćemo je zvati $l(l+1)$. Iz lijeve strane (18.6) i vrijednosti novog zajedničkog parametra slijedi radijalna diferencijalna jednadžba oblika:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 R) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R = l(l+1) \frac{R}{r^2} \quad (18.7)$$

Iz uvjeta da valna funkcija mora trnuti, slijedi kao i u primjerima koje smo prošli da su vrijednosti energije diskretne s vlastitim vrijednostima energije za vodik oblika (8.2). U jednadžbi se pojavljuje glavni kvantni broj n koji smo već upoznali kao prvi parametar opisa spektra vodiku sličnih atoma. S druge strane sličnim argumentom rezultira i kvantizacija i apsolutne vrijednosti količine gibanja l i njegove projekcije na os kvantizacije m_{proj} . Dok nema interakcije magnetizma staze i spina, ova dva su parametra bitna za knjigovodstvo stanja i međusobno su povezana relacijom (8.23). Trebamo samo spomenuti da n_{Bohr} u (8.23) zapravo glavni kvantni broj n iz (8.21). Možemo još informirati studente o činjenici da će eksplicitno rješavanje jednadžbe (18.7) savladati u kolegiju Matematičke metode fizike. Slično vrijedi i za jednadžbu koja se dobije uvrštenjem zajedničkog parametra $l(l+1)$ u desnu stranu jednadžbe (18.6).

Zaključno, eksplicitnim rješavanjem Schrödingerove jednadžbe potpuno se opravdava Bohrove postulate. Bohrovi postulati, kada smo jednom svjesni njihovog porijekla i ograničenja su odlično pomoćno sredstvo za brzu orijentaciju u atomskoj spektroskopiji. Ovo je vjerojatno zgodno mjesto za upozorenje studentima da vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba daje samo stacionarna rješenja atomskih stanja. Da bismo dobili informaciju o širinama tih stanja, to jest o intenzitetima zračenja za pojedine prijelaze, moramo u najprimitivnijem tretmanu u razmatranje uključiti i međudjelovanje oscilirajućeg vanjskog polja s atomskim sustavom. Stručnim rječnikom govoreći, razvija se perturbativni (ometajući) tretman primijenjen na Schrödingerovu jednadžbu gdje je perturbacija klasično titrajuće polje. U prvom tretmanu najprije se kvantizira električno polje, a u slijedećem koraku i polje elektronskog opisa. Ta slika naziva se kvantnom elektrodinamikom.

19) EHRENFESTOVI TEOREMI ; ODNOS KVANTNE MEHANIKE S KLASIČNOM TEORIJOM

Pokazat će se kako je kvantna fizika takav iskorak iz klasičnog pristupa, koji u svom graničnom slučaju usrednjavanja po velikom broju slučajeva pokazuje rezultate analogne klasičnim.

19.1) Prvi Ehrenfestov teorem; gibanje težišta valnog paketa.

Promatra se vremensko ponašanje srednje vrijednosti koordinate valnog paketa :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx \quad (19.1)$$

u odnosu na ponašanje srednje vrijednosti impulsa za isti valni paket:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* p_x \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi dx \quad (19.2)$$

Za obrazloženje gornje relacije može se pogledati (12.9a)

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] dx \quad (19.3)$$

Kada na ovom mjestu u (19.3) uvrstimo izraze za vremensku derivaciju valne funkcije i konjugirane valne funkcije iz (15.4) i (15.5) uočiti ćemo najprije da se članovi, koji sadrže potencijal dokidaju te da nakon toga u (19.3) preostaje:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{-1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) x \psi + \psi^* x \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \right] dx = \\ &= \frac{\hbar}{2im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi \right) - \left(\psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right] dx + \frac{\hbar}{2im} \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial (x\psi)}{\partial x} + \frac{\partial (\psi^* x)}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx \quad (19.4) \end{aligned}$$

Prvi integral rezultira u uglatoj zagradi, čiju vrijednost treba uzeti na granicama integrala. Kako i valna funkcija i derivacija iščezavaju na rubovima područja, to i prvi integral iščezava:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\hbar}{2im} \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi dx + \frac{\hbar}{2im} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \quad (19.5)$$

Naime pri računanju drugog integrala u (19.4) pri deriviranju produkta, članovi koji se dobivaju ne deriviranjem koordinate x se poništavaju. Tako preostaje nakon nadopunjavanja prvog člana u (19.5) na derivaciju produkta:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\hbar}{2im} \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \psi) + 2\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx \quad (19.6)$$

Integral prvog člana iščezava, jer se svodi na kvadrat modula valne funkcije uzet na granicama integracije gdje valna funkcija iščezava. Tako je preostalo:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \quad (19.7)$$

Posljednji korak u lancu (19.7) imamo iz (19.2).

Relacija (19.7) kaže da se centar kvanta giba brzinom koja je kvocijent srednje vrijednosti njegovog impulsa i njegove mase. Ovdje se ogleda po prvi put kompleksnost kvantnog opisa. S jedne strane, kvant je „razmazan“ (nije precizno definiran ni po položaju ni po impulsu). S druge strane njegovo težište se giba brzinom koja je omjer usrednjene vrijednosti impulsa i mase. Dakle točno onako, kako se giba klasična čestica. Sada već naslućujemo, a slijedeći Ehrenfestov teorem će nas dodatno uvjeriti u novo ponašanje kvantata. Oni nisu dobro definirani ni prostorno ni impulsno, no oni se u globalnom smislu (usrednjene vrijednosti) ponašaju upravo onako kao i objekti Newtonovske mehanike. Kako se kvanti nagomilavaju u makroskopsku česticu, neodređenosti u položaju postaju zanemarive u odnosu na ukupnu koordinatu. S druge strane, ako kvante koherentno prepariramo u jedan jedinstveni impuls: valnu duljinu, tada će do izražaja doći valna svojstva sustava.

19.2) Drugi Ehrenfestov teorem

Razmatra se ponašanje vremenske derivacije srednje vrijednosti impulsa (19.2) valnog paketa.

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx \quad (19.8)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left[(-i\hbar) \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (-i\hbar) \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] dx \quad (19.9)$$

Iz (19.8) u (19.9) smo prešli najprije zamjenom poretka vremenske i prostorne derivacije u drugom članu uglate zagrade, a potom smo u okrugle zagrade istaknuli faktore koje možemo dobiti iz Schrödingerove jednadžbe (15.4) i (15.5):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi^* \right) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \right) \right] dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) - \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi \right] dx \end{aligned} \quad (19.10)$$

Pri prijelazu iz prvog u drugi red relacije (19.10) članovi nastali pri nadopunjavanju na punu derivaciju produkta za prva dva člana u drugom redu (19.10) su se poništili. Dodatno su se poništili drugi član prvog retka (19.10) i član koji nastane pri deriviranju valne funkcije iz okrugle zagrade prvog retka (19.10). Za prva dva člana (19.10) može se izvršiti integriranje (derivacije). Kako valna funkcija i njena prva derivacija iščezavaju na krajevima intervala, vremenska derivacija impulsa se svodi na:

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi \right] dx = - \langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle \quad (19.11)$$

Drugi Ehrenfestov teorem je zapravo kvantno mehanički ekvivalent drugog Newtonovog zakona. Vremenska derivacija impulsa paketa potječe od gradijenta potencijala usrednjenom po području u kojem se paket nalazi. Ponovno je jasno da se gomilanjem broja čestica na jednoj lokaciji u limesu dobiva klasični rezultata. S druge strane, valni paket, dok nema specifične lokalizacije svojom valnošću registrira fizikalna svojstva cijelog područja po kojem je rasprostrt. To daje odličnu intuiciju za razumijevanje interferentnog pokusa s na primjer dva otvora!

19.3) Zaključno o Ehrenfestovim teoremima

U praksi ove teoreme ćemo rijetko koristiti. S druge strane, oni su spoznajno bitni za studente koji žele ne samo naučiti kvantnu fiziku operativno, nego i razumjeti njen odnos prema klasičnoj fizici. Klasična fizika je nastala iz naših napora da razumijemo naš svakodnevni makrosvijet, kojem smo životnim iskustvom izloženi. Fenomen dualnosti kvanata mikrosvijeta je duboko suprotstavljen intuiciji utemeljenoj na dnevnom iskustvu. Vidjeli smo da nas je koegzistencija interferencije i fotoelektričkog efekta natjerala reinterpretirati Maxwellove jednadžbe u smislu da amplituda vala nakon kvadriranja nije intenzitet svjetla, nego vjerojatnost nalaženja fotona. Za nerelativističke valove materije tu ulogu ima Schrödingerova jednadžba. I opet kvadrat modula valne funkcije predstavlja vjerojatnost nalaženja kvanta. No najsajnije od svega su dvije činjenice:

- 1) Predikcije Schrödingerove jednadžbe odlično se slažu s eksperimentima
- 2) Kroz Ehrenfestove teoreme vidimo kako se gomilanjem kvanata, pogotovo u statistički veliko mnoštvo formiraju rezultati klasične fizike.

Bohr je formulirao korespondentno načelo. Po njemu rezultati kvantne mehanike prelaze u klasičnu mehaniku kada možemo smatrati da u problemu koji razmatramo Planckova konstanta postaje zanemariva: $\hbar \rightarrow 0$.

19) PREGLED SLOJEVA MIKROSVIJETA

Zaključit ćemo razmatranja o konstituentima u mikrosvijetu pregledom upoznatih i navođenjem danas poznatih konstituenata. Idući od makrosvijeta u sve manje prostorne dimenzije, prva zrnca na koja nailazimo su molekule. Molekularne spektre, koji su naša temeljna informacija o molekulama smo razmatrali u poglavlju 17. Možemo samo dodati da se molekule svojim dimenzijama mogu protezati daleko preko 10^{-10} m . Naime organske molekule, naročito one važne za život, mogu biti ulančene u vrlo duge lance. Globalna svojstva atoma smo razmatrali u poglavljima 6) i 8) . Prostorno podsjećamo da su im dimenzije reda veličine 10^{-10} m . Slijedeći sloj konstituenta predstavljaju atomske jezgre, čije su dimenzije veće od 10^{-15} m . Nuklearnoj fenomenologiji (dimenzijama i masama) posvetili smo poglavlje 7). Polovicom dvadesetog stoljeća nalazi se da uz nukleone postoji vrlo brojna obitelj objekata čije su mase i dimenzije slične nukleonskim , koje se raznim procesima mogu međusobno transformirati. Međusobno djeluju jakim silama, koje su vrlo slične silama u jezgri; jakim silama. Također je uočena njihova nestabilnost. Brzina njihovih raspada, zajedno s raspadom neutrona navodi nas da i u jezgri i u tim objektima , uz jaku silu postoji i slaba sila, koja generira relativno vrlo spore pretvorbe među tim objektima. Taj sloj objekata naziva se „elementarnim česticama“ . Naime u to doba se činilo da smo u svom prodoru u mikrosvijet došli do kraja i da sićušnijih i elementarnijih objekata nema. No, čovječanstvu najbolje poznata interakcija, koja nam je pomogla otkriti jezgre, a zatim kroz sudare elektrona s jezgrama dati uvid i u potankosti njezine strukture, bila je ključ da se eksperimentalno ustanovi postojanje objekata, čije moguće dimenzije idu ispod 10^{-18} m . U naivnoj slici možemo reći da se elektron poslije sudara ponašao kao da se sudario sa sićušnim objektom koji ima trećinski ili dvotrećinski naboj od elektronovog. Ti novi konstituenti imaju međutim svojstvo nepoznato do sada u povijesti znanosti: ne mogu egzistirati izvan većih objekata (na primjer protona). Konstituenti su nazvani kvarkovima i ima ih šest vrsta. U stručnoj literaturi ih se opisuje slijedećim slovima: u, d, s, c, b i t. Teorijski opis za njihovu jaku silu je kvantna kromodinamika dok se za slabu interakciju našlo da je se može opisati jedinstvenom teorijom koja uključuje elektrodinamiku. To je takozvana elektroslaba interakcija. Tako danas imamo kao konstituente kvarkove i njihove inerakcije opisane kromodinamikom i elektroslabom interakcijom. Još možemo spomenuti da uz šest kvarkova imamo i šest vrlo lakih čestica, leptona , koji su svojstvima slični elektronu i neutrinu. Trenutno postoji jedinstvena teorija za sve te fenomene, osim gravitacijskih. Naziva se standardnim modelom. Dok se piše ovaj tekst, u najvećem svjetskom centru za istraživanje mikrosvijeta CERN-u , sudaraju se protoni do sada ne postignutim energijama. Ti pokusi predstavljaju najveći test standardnom modelu, a ujedno traže česticu (Higgs bozon) , koja bi trebala objasniti, kako elementarne čestice stječu svoju masu.