

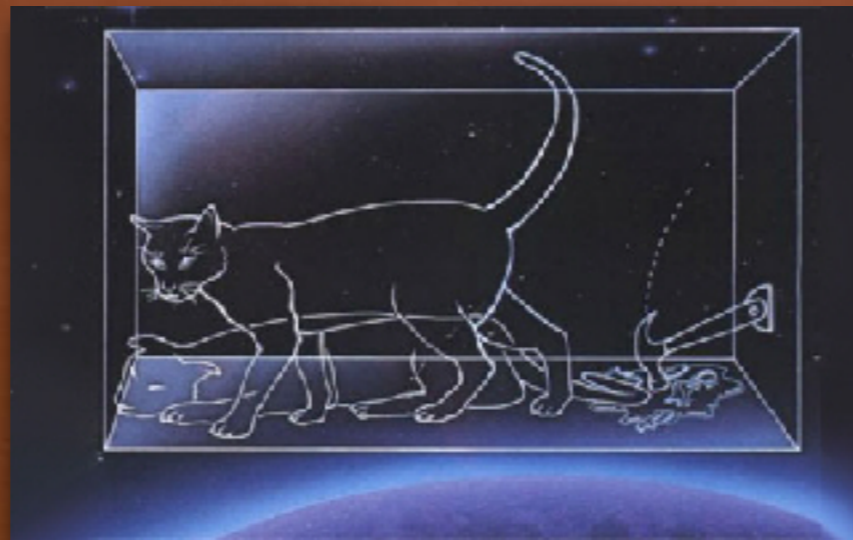
UVOD U KVANTNU FIZIKU

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\Delta x_i \Delta p_i \geq \frac{\hbar}{2}$$

Werner Heisenberg (1901-1976)

Winner of the 1932 Nobel Prize in Physics



ZRAČENJE CRNOG TIJELA I PLANCKOVA HIPOTEZA

- svaki objekt pri nekoj temperaturi emitira **termičko (toplinsko)** zračenje
- ukupna snaga koju tijelo zrači dana je **Stefanovim** zakonom:

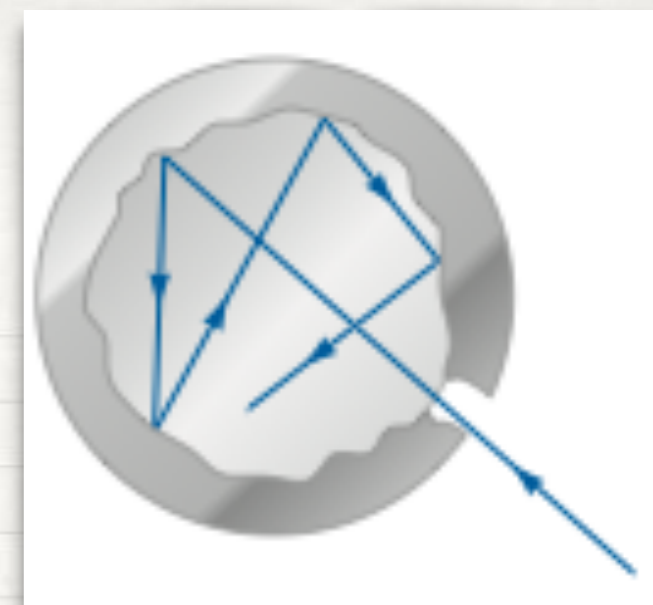
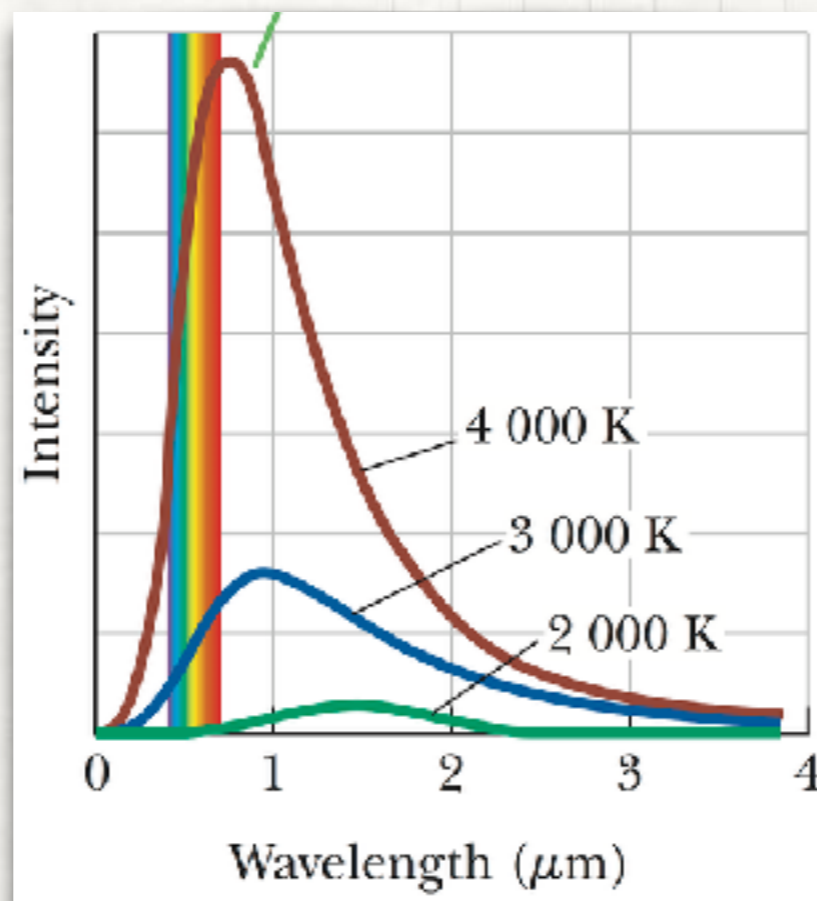
$$P = \sigma A e T^4$$

gdje su: $\sigma = 5.669 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$ Stefan-Boltzmannova konstanta, A je površina tijela, T je temperatura tijela, e je *emisivnost* tijela (između 0 i 1)

- spektar zračenja ovisi o temperaturi i svojstvima tijela
- pri niskim temperaturama frekvencija zračenja je u infracrvenom području i nevidljiva za ljudsko oko
- frekvencija se mijenja s povećanjem temperature i prelazi u područje vidljive svjetlosti (kažemo da je tijelo "užareno")
- spektar se sastoji od kontinuirane raspodjele valnih duljina u području infracrvenog dijelu spektra, vidljive svjetlosti i ultraljubičaste svjetlosti
- klasično gledajući, termičko zračenje dolazi od ubrzanih nabijenih čestica koje se nalaze blizu površine tijela (kao male antene)
- upravo to objašnjenje pokazalo se nedadekvatno i dovelo do razvoja kvantne fizike

- problem je bilo shvaćanje opažene raspodjele energije kao funkcije valne duljine zračenja koje emitira **crno tijelo**
- **crno tijelo je tijelo koje apsorbira svo zračenje koje pada na njega**
- emitirano zračenje ovisi isključivo o temperaturi a ne o obliku ili vrsti tijela

emitirana energija povećava se s temperaturom



aproksimacija crnog tijela

Wienov zakon pomaka:

$$\lambda_{\max} \cdot T = 0.2898 \times 10^{-2} \text{ m} \cdot \text{K}$$

(SUNCE 5800 K)



Max Planck (1858-1947)

Klasična teorija:

$$I(\lambda) = \frac{2\pi ckT}{\lambda^4}$$

Rayleighev zakon (UV katastrofa)

Nemoguće je objasniti oblik krivulje klasičnom fizikom!

- dobro slaganje postoji samo za velike valne duljine

1900. Max Planck daje objašnjenje!

- njegova tvrdnja je da su za zračenje crnog tijela zaslužni submikroskopski, električno nabijeni, oscilatori koje je nazvao *rezonatori*
- prema njemu, stijenske crnog tijela sadrže milijarde takvih rezonatora, premda je njihovo porijeklo nepoznato
- svaki od rezonatora može imati samo određenu energiju

$$E_n = nhf$$

→
$$I(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)}$$
 Planckov zakon zračenja

- n je cijeli broj, f je frekvencija titranja rezonatora a h je Planckova konstanta

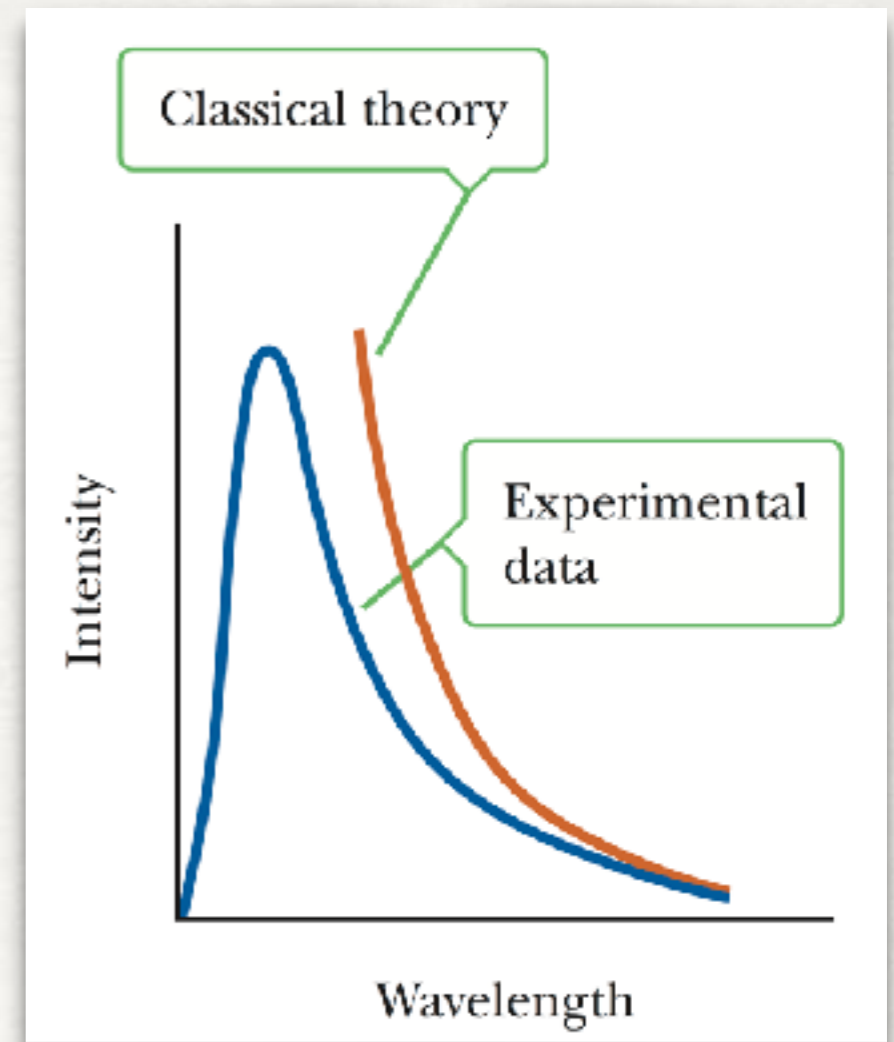
- $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

- **energija je kvantizirana** (može poprimiti samo određene vrijednosti)

- n predstavlja *kvantno stanje*

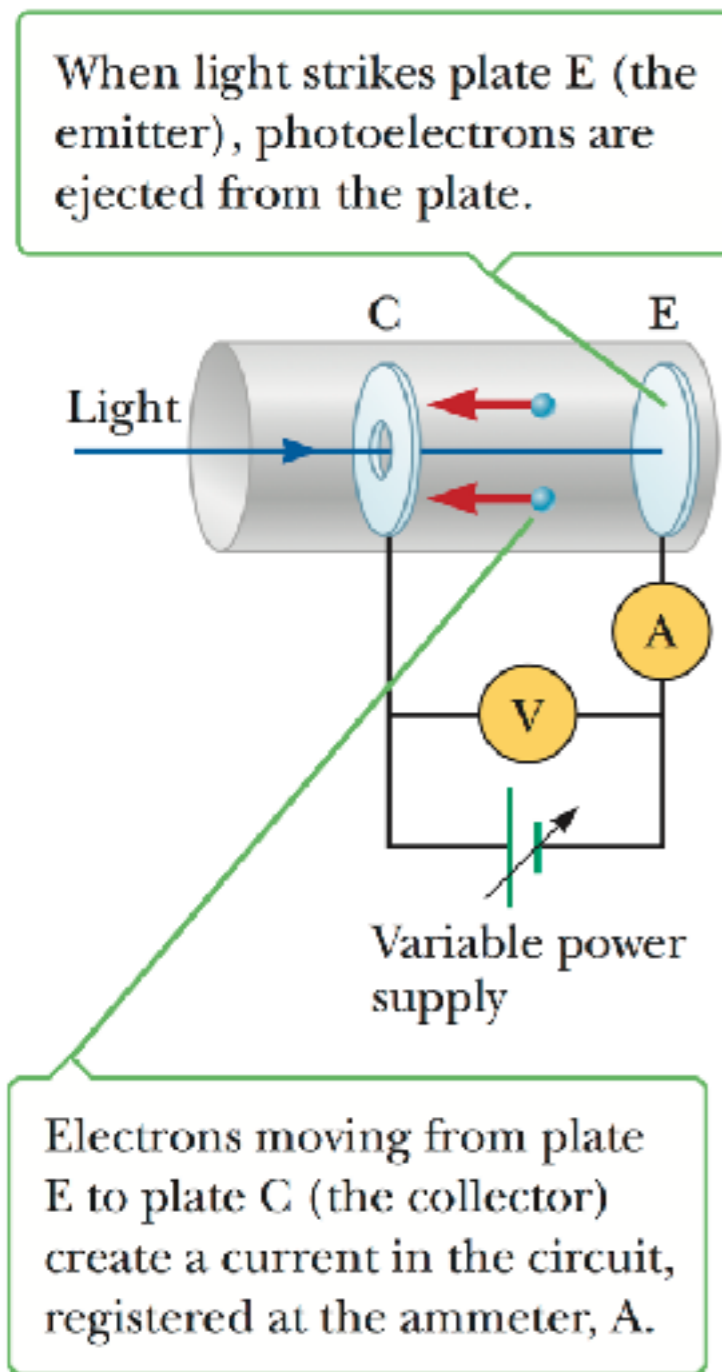
- ključna pretpostavka je postojanje kvantiziranih energijskih stanja, odnosno samo neke vrijednosti energije su dozvoljene

- to je osnovna razlika u odnosu na klasičnu teoriju



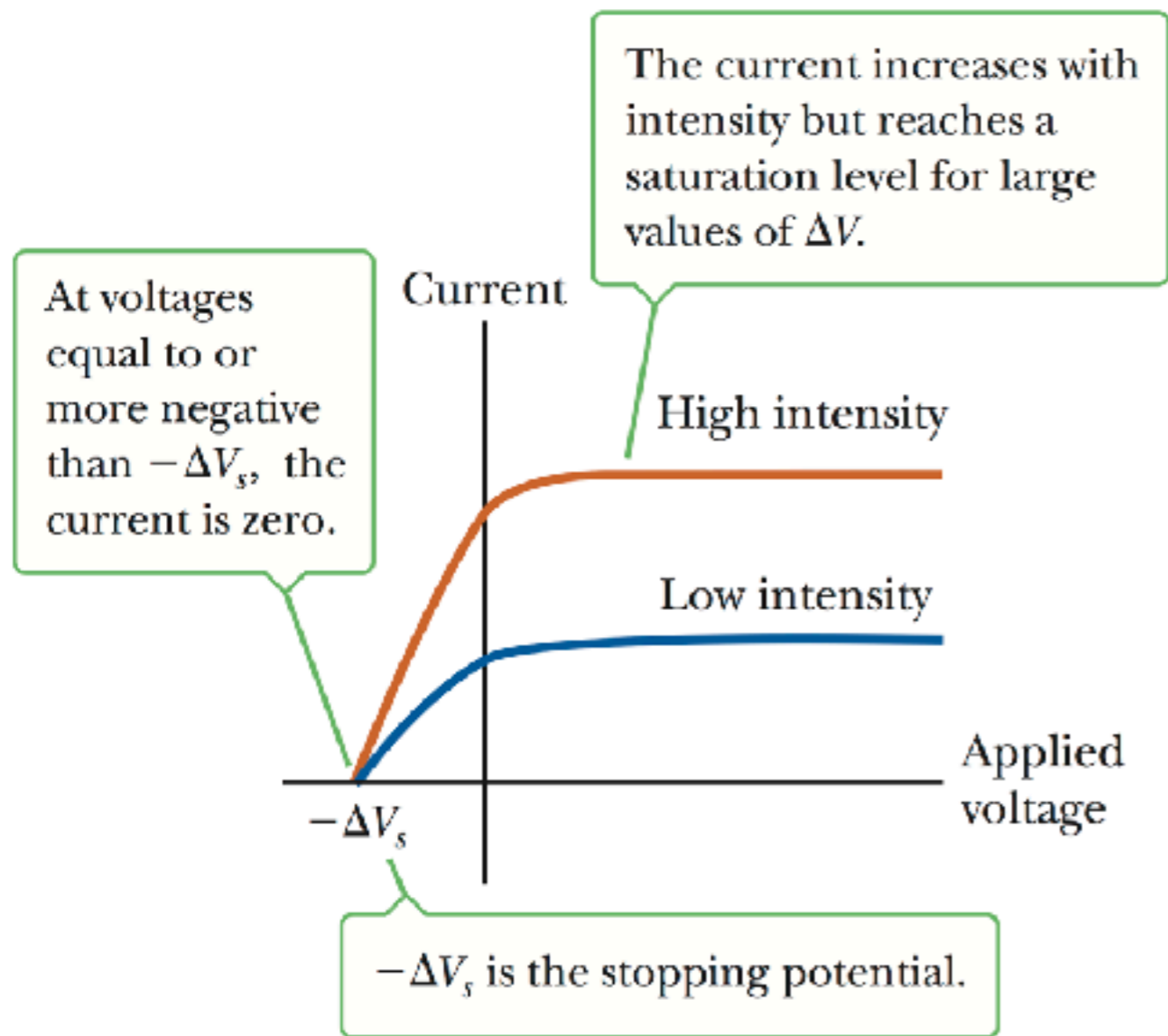
FOTOELEKTRIČNI EFEKT I ČESTIČNA NARAV SVJETLOSTI

- u drugom dijelu 19. stoljeća eksperimenti su pokazali da obasjavanje površine određenih metala svjetlošću izaziva emisiju elektrona s površine



- ovaj fenomen naziva se **fotoelektrični efekt** a emitirani elektroni **fotoelektroni**
- efekt je otkrio Hertz, koji je prvi proizveo elektromagnetske valove koje je predvidio Maxwell
- kada E ozračimo svjetlošću valne duljine **kraćom** od određene vrijednosti koja ovisi o vrsti materijala dolazi do pojave struje u krugu!
- **jakost struje ovisi o intenzitetu svjetlosti** - očekivano
- kada je ΔV negativno struja elektrona se smanjuje (C je sada negativno nabijen i odbija elektrone)
- samo elektroni kinetičkom energijom većom od $e\Delta V$ dolaze do C
- za određenu vrijednost V_s struja pada na nulu
- **$V_s =$ zaustavni potencijal**
- **V_s ne ovisi** o intenzitetu
- maksimalna kinetička energija elektrona određena je s V_s

$$KE_{\max} = eV_s$$



Sljedeće činjenice ne mogu se objasniti klasičnom teorijom:

1. ukoliko je frekvencija svjetlosti *niža* od određene vrijednosti, koja ovisi o materijalu, *nema pojave struje - to je u kontradikciji s valnom teorijom*
2. maksimalna brzina elektrona *ne ovisi* o intenzitetu svjetlosti
3. maksimalna kinetička energija elektrona povećava se s *frekvencijom svjetlosti*
4. elektroni se emitiraju gotovo odmah nakon izlaganja svjetlosti ($<10^9$ s)

Odgovor na ove probleme dao je A. Einstein 1905. godine (nakon objavljivanja svoje teorije o relativnosti)

Za objašnjenje fotoelektričnog efekta dobio je Nobelovu nagradu 1921. g.

- on je tvrdio da dolazi do emisije malenog paketa svjetlosne energije, tzv. *fotona*, kada oscilator skače iz energijskog stanja E_n u stanje E_{n-1}

- *energija fotona je $E = E_n - E_{n-1} = nhf - (n-1)hf = hf$*

- osnovna pretpostavka ovdje je da energijski paket hf ostaje vrlo lokaliziran tako da se u potpunosti predaje elektronu
- takav energijski paket naziva se *foton*
- prema Einsteinu, maksimalna kinetička energija fotoelektrona može se pisati kao:

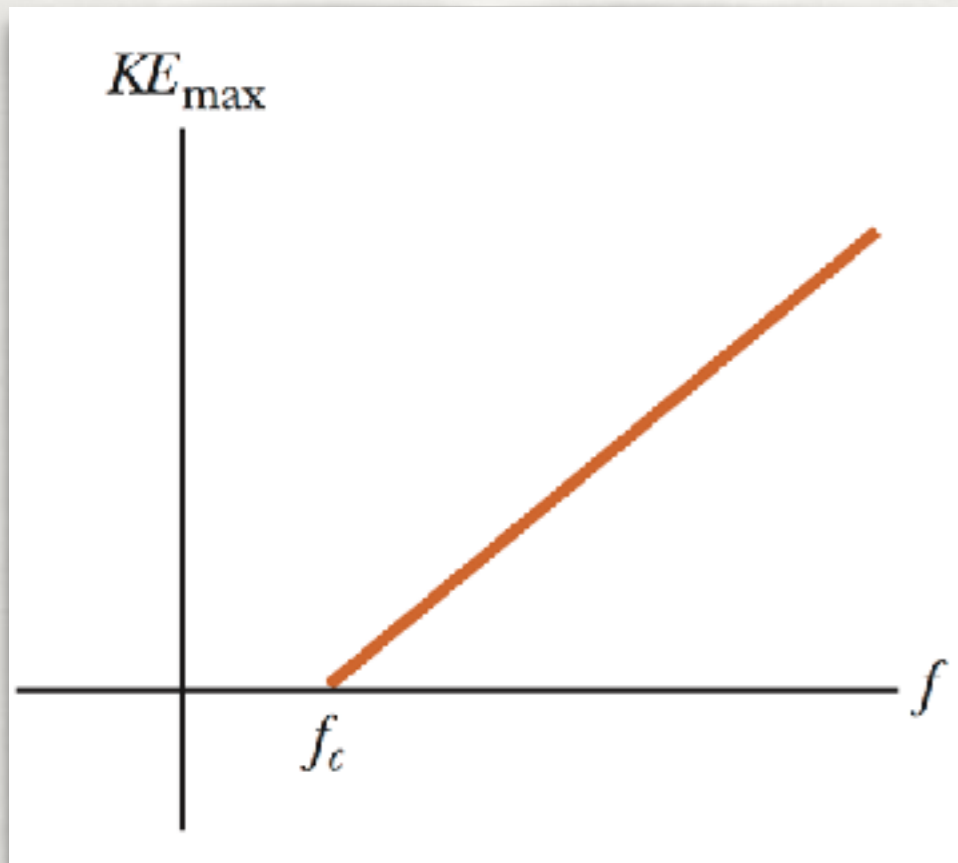
$$KE_{\max} = hf - \phi$$

- ϕ se naziva rad izlaza metala
- to je minimalna energija vezanja elektrona, obično reda eV ($1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$)

Objašnjenje fotoelektričnog efekta pomoću čestične prirode svjetlosti:

- fotoelektroni nastaju absorpcijom jednog fotona i prema tome energija tog fotona mora biti veća od rada izlaza. To objašnjava postojanje minimalne frekvencije.
- maks. kinetička energija ovisi o frekvenciji svjetlosti i radu izlaza, a ne o intenzitetu svjetlosti
- KE_{\max} je linearna u frekvenciji pa se povećava s frekvencijom
- elektroni se emitiraju gotovo trenutno zbog toga što je svjetlosna energija koncentrirana u paketima a nije razmazana u valovima

Metal	ϕ (eV)
Ag	4.73
Al	4.08
Cu	4.70
Fe	4.50
Na	2.46
Pb	4.14
Pt	6.35
Zn	4.31



- f_c je minimalna frekvencija koju svjetlost mora imati da bi elektron napustio metal (cutoff frekvencija)
- cutoff valna duljina (λ_c) može se izračunati:

$$KE_{\max} = hf_c - \phi = 0 \rightarrow h \frac{c}{\lambda_c} - \phi = 0$$

$$\lambda_c = \frac{hc}{\phi}$$

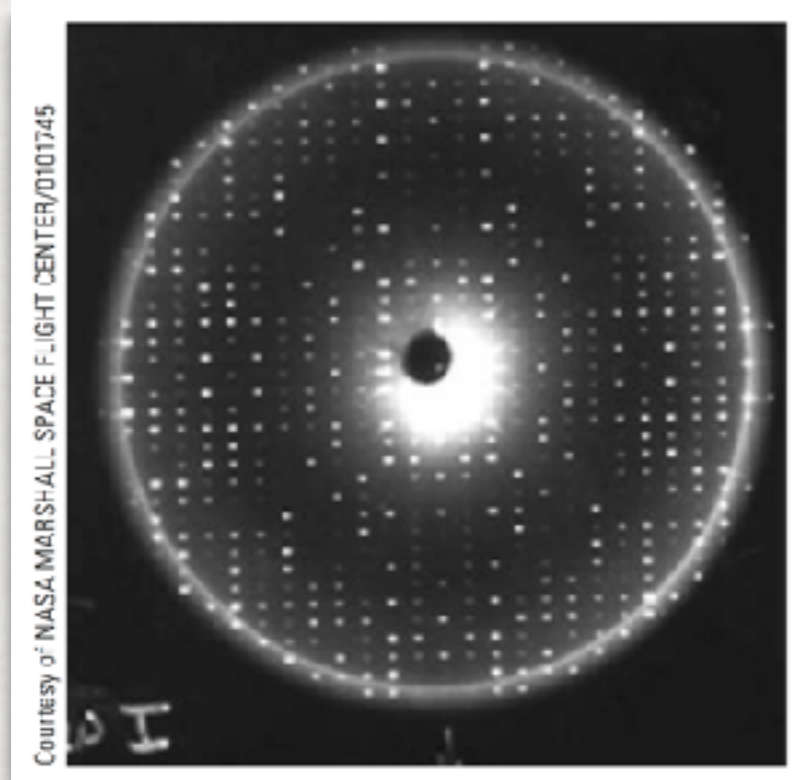
Primjena: fotoćelije

- npr. ulična rasvjeta - kada dnevna svjetlost padne na fotoćeliju ona aktivira prekidač koji gasi rasvjetu
- vrata na garaži ili dizalu - kada svjetlost pada na fotoćeliju generira se električna struja dovoljna za održavanje zatvorenog strujnog kruga. Kada se snop svjetlosti prekine (prolaskom čovjeka) strujni krug se prekida i time se daje signal za otvaranje vrata



RENDGENSKO ZRAČENJE

- rendgenske zrake otkrio je 1895 godine Wilhelm Röntgen, a tek mnogo kasnije dokazano je da su one elektromagnetski valovi
- rendgenske zrake imaju frekvenciju višu od ultraljubičastog zračenja i s lakoćom prodiru u većinu tvrari
- tipična valna duljina rendgenskog zračenja je 0.1 nm što je red veličine međuatomske udaljenosti u krutinama
- upravo zbog toga regularna kristalna (atomska) rešetka može difraktirati valove rendgenskog zračenja



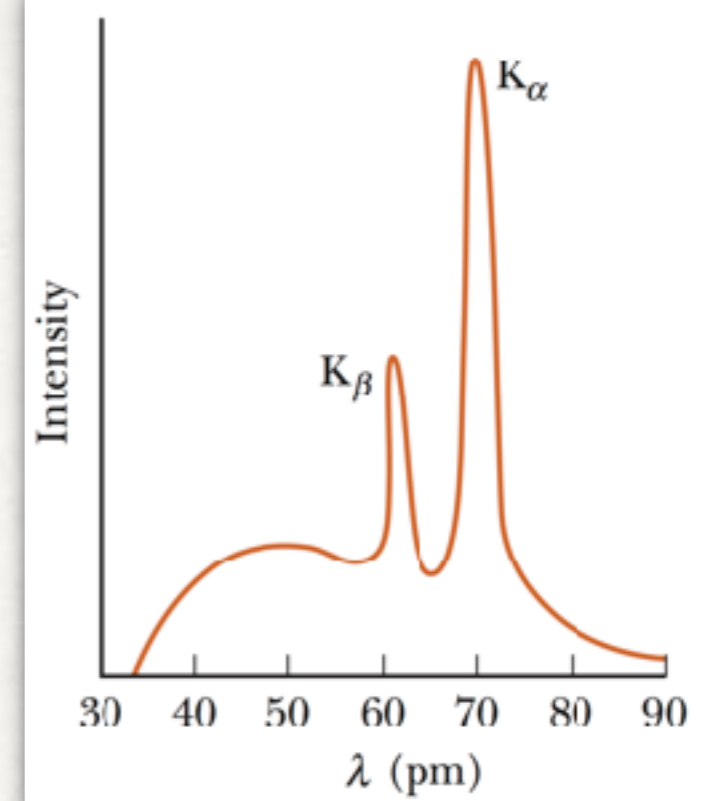
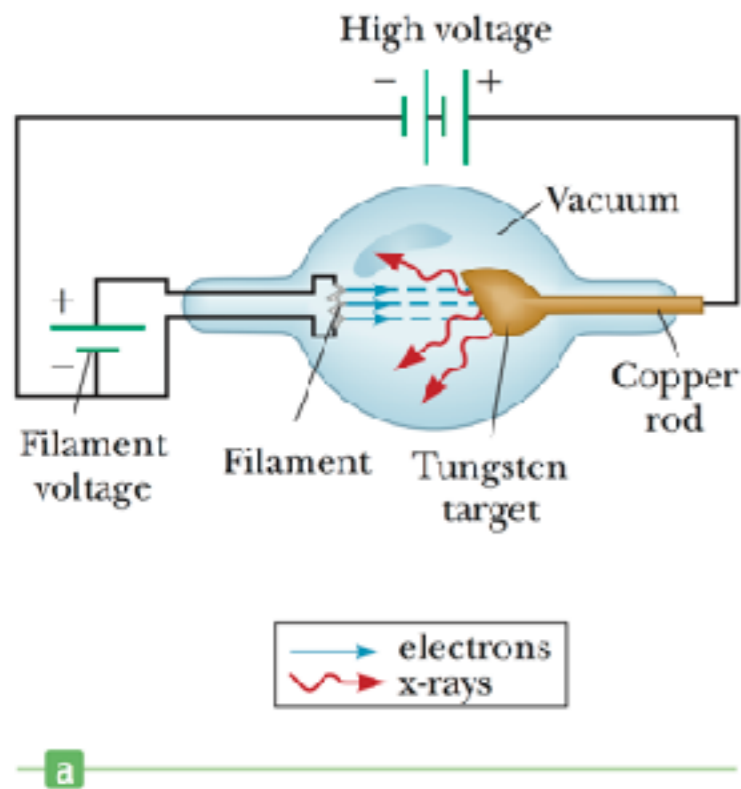
difrakcija X-zraka
u proteinu



Wilhelm Röntgen
(1845-1923)



radiograf šake
Röntgenove supruge

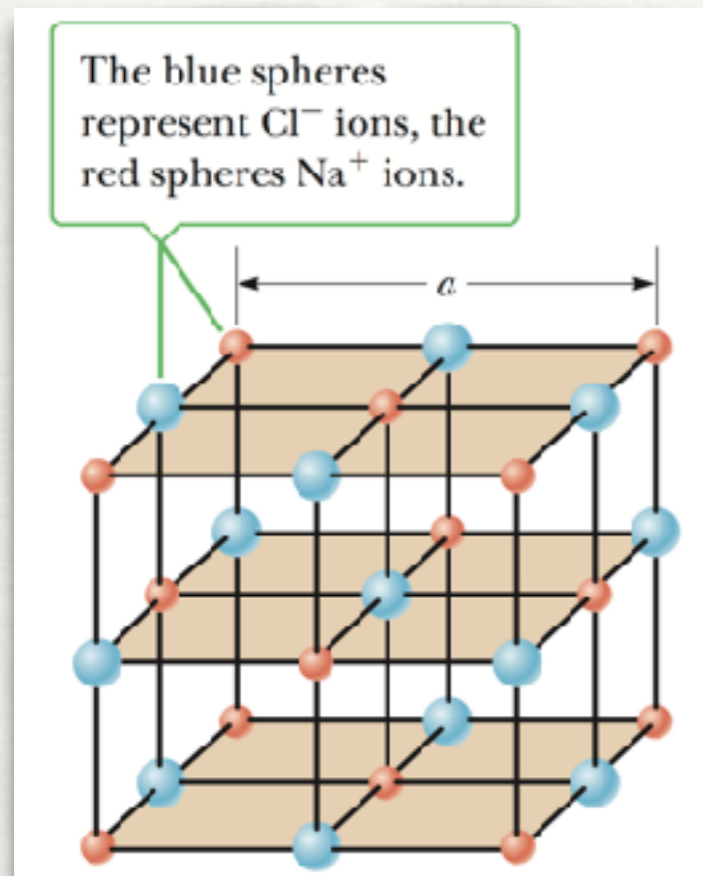


- rendgenske zrake nastaju naglim usporavanjem jako brzih elektrona
- npr. elektroni ubrzani naponom od par tisuća volta udaraju u metalnu metu
- u spektru X-zraka opaža se kontinuirani dio ali i oštri maksimumi koji ovise o vrsti mete
- kontinuirani spektar (bremsstrahlung, zakočno zračenje) dolazi od usporavanja elektrona u unutrašnjosti metala
- karakteristične linije nastaju kada upadni elektroni izbace vezani elektron iz ljuske atoma u materijalu i zračenje se emitira kada idući vezani elektron pada iz više energijske ljuske u nepopunjenu
- minimalna valjna duljina X-zraka:

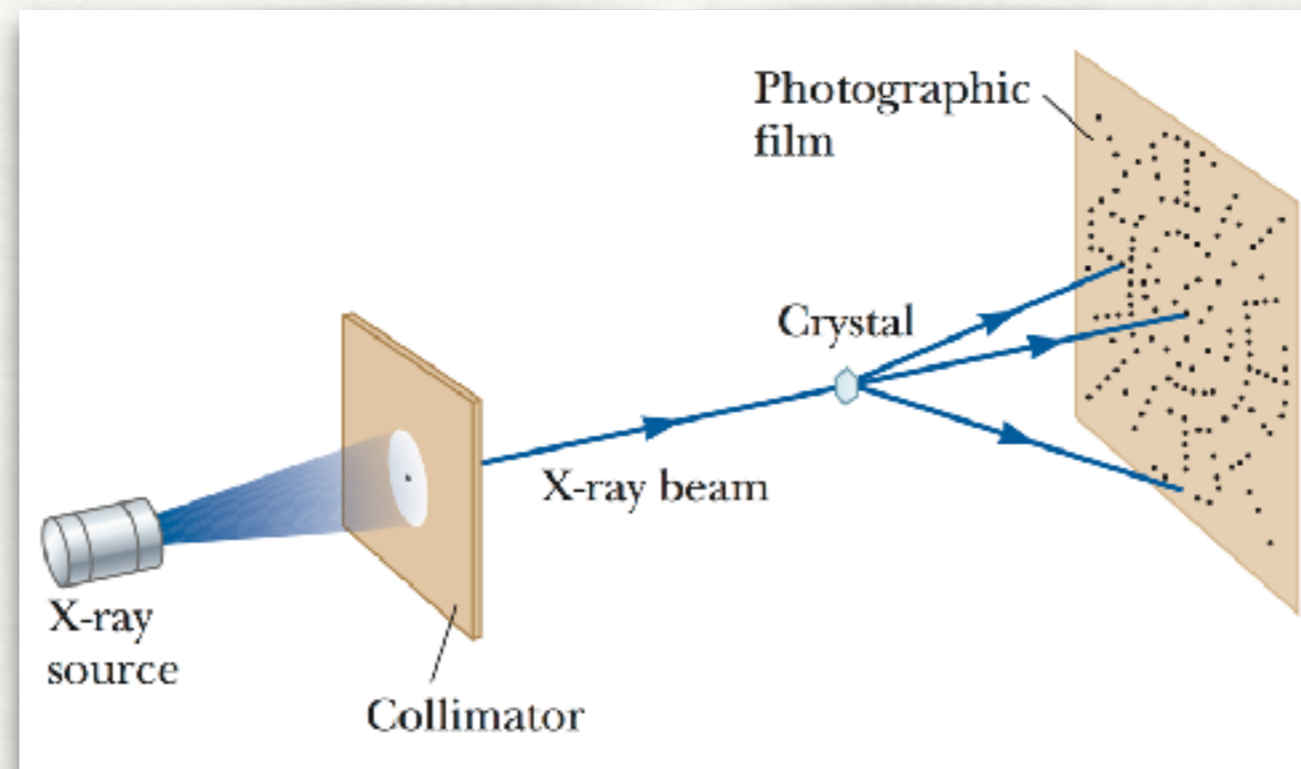
$$e\Delta V = hf_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}} \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{hc}{e\Delta V}$$

RENDGENSKA DIFRAKCIJA U KRISTALU

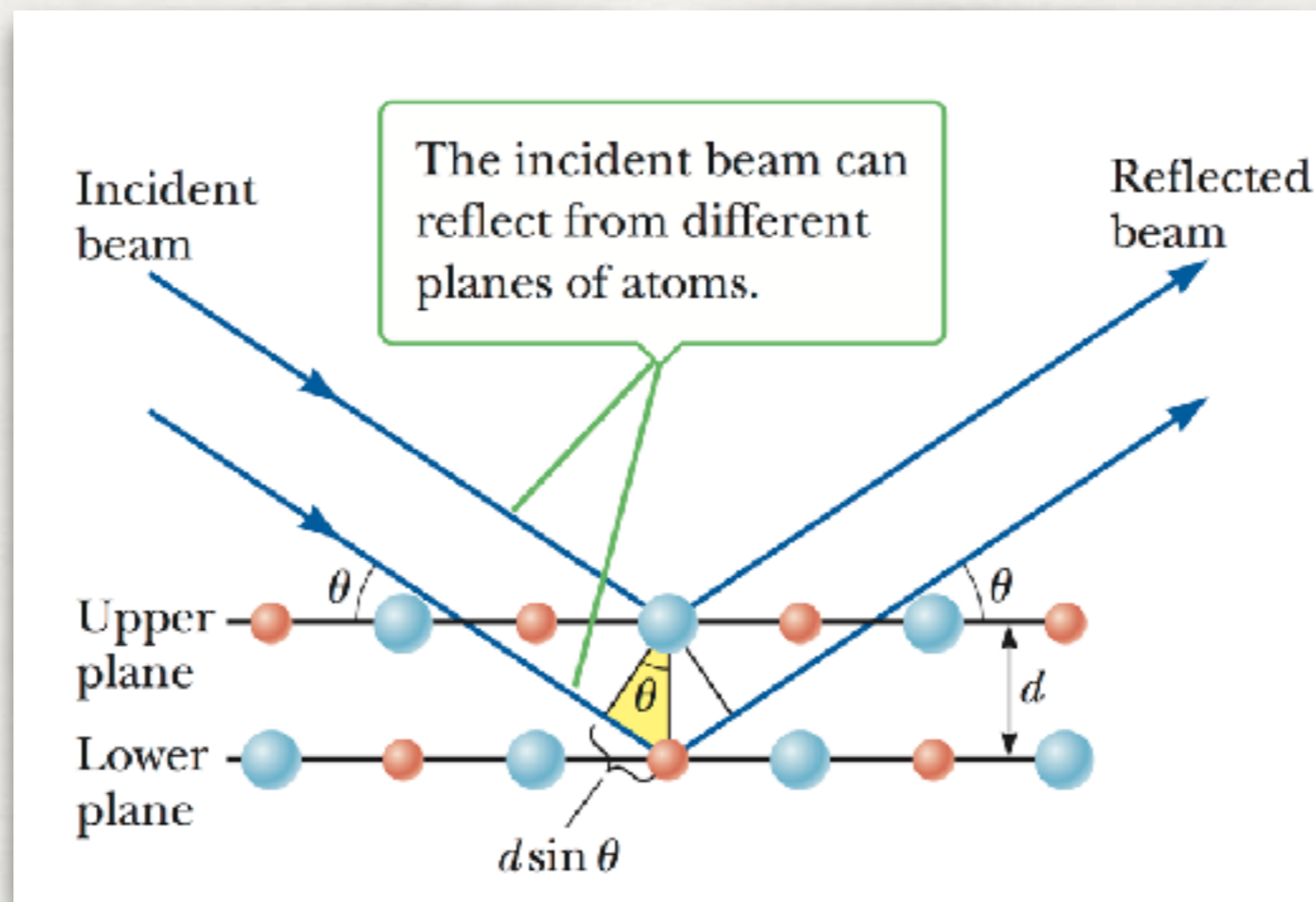
- da bi došlo do difrakcije valova, konstanta rešetke mora sumjerljiva s valnom duljinom vala
- kristali su 3D periodičke rešetke sastavljene od atoma
- međuatomska udaljenost u krutinama je reda 1Å (0.1 nm)
- valna duljina rendgenskog zračenja Cu je $\approx 1.54\text{ Å}$



kristalna struktura NaCl
 $a = 0.563\text{ nm}$



difrakcija u kristalu



Uvjet konstruktivne interferencije (difrakcije) :
 razlika u prijeđenim putovima dva vala mora biti jednaka $n \cdot \lambda$

Braggov zakon: $2d \cdot \sin \Theta = n \cdot \lambda, \quad n = 0, 1, 2, \dots$

- ovo je osnovna nedestruktivna tehnika za identifikaciju materijala i rješavanje nepoznatih kristalnih struktura
- omogućuje određivanje vrste i prostornog rasporeda atoma



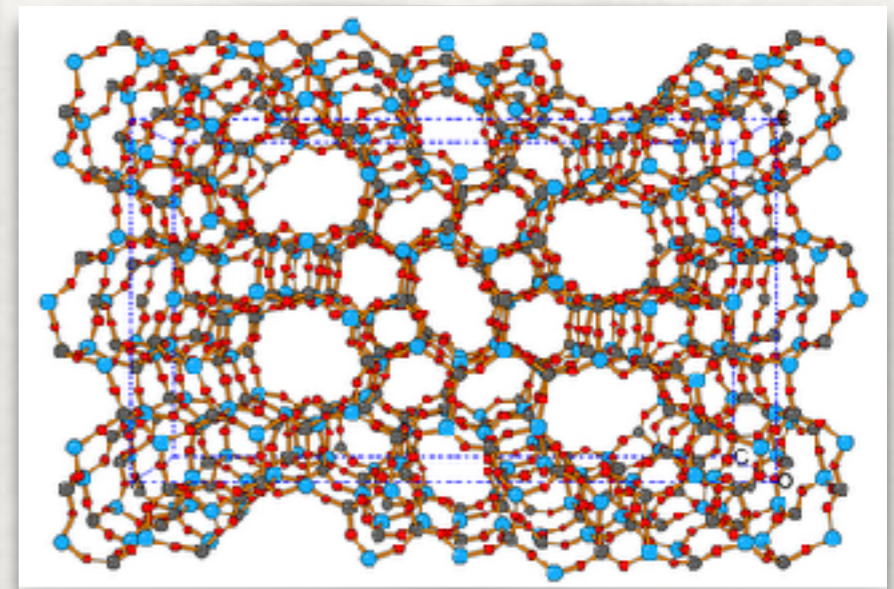
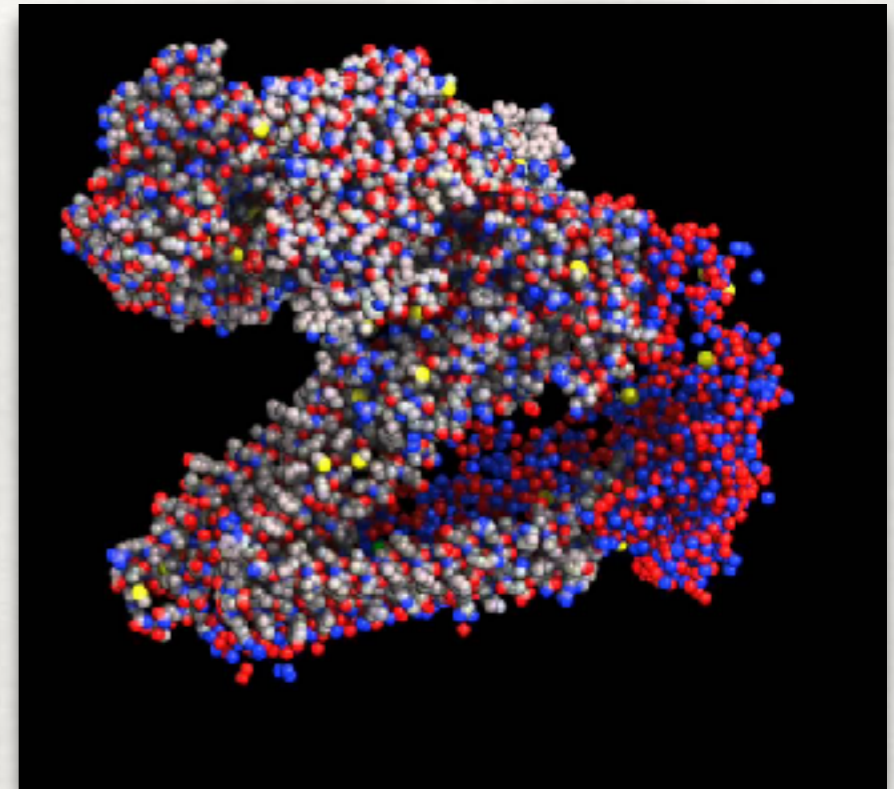
difrakcijska slika DNA



Rosalind Franklin
(1920-1958)



struktura DNA



komplicirane kristalne
strukture

COMPTONOV EFEKT

Daljnja potvrda čestične naravi svjetlosti (foton) došla iz eksperimenta koji je 1923. proveo Arthur H. Compton.

- U eksperimentu je Compton usmjerio snop rendgenskih zraka valne duljine λ_0 u grafit.
- Otkrio je da je valna duljina raspršenog snopa (nakon prolaza kroz grafit), λ , nešto veća od izvorne što znači da je energija raspršenog snopa manja.
- Iznos gubitka energije ovisio je o upadnom kutu zračenja.
- Promjena valne duljine između upadne i raspršene X-zrake naziva se *Comptonov pomak*.

Pretpostavka:

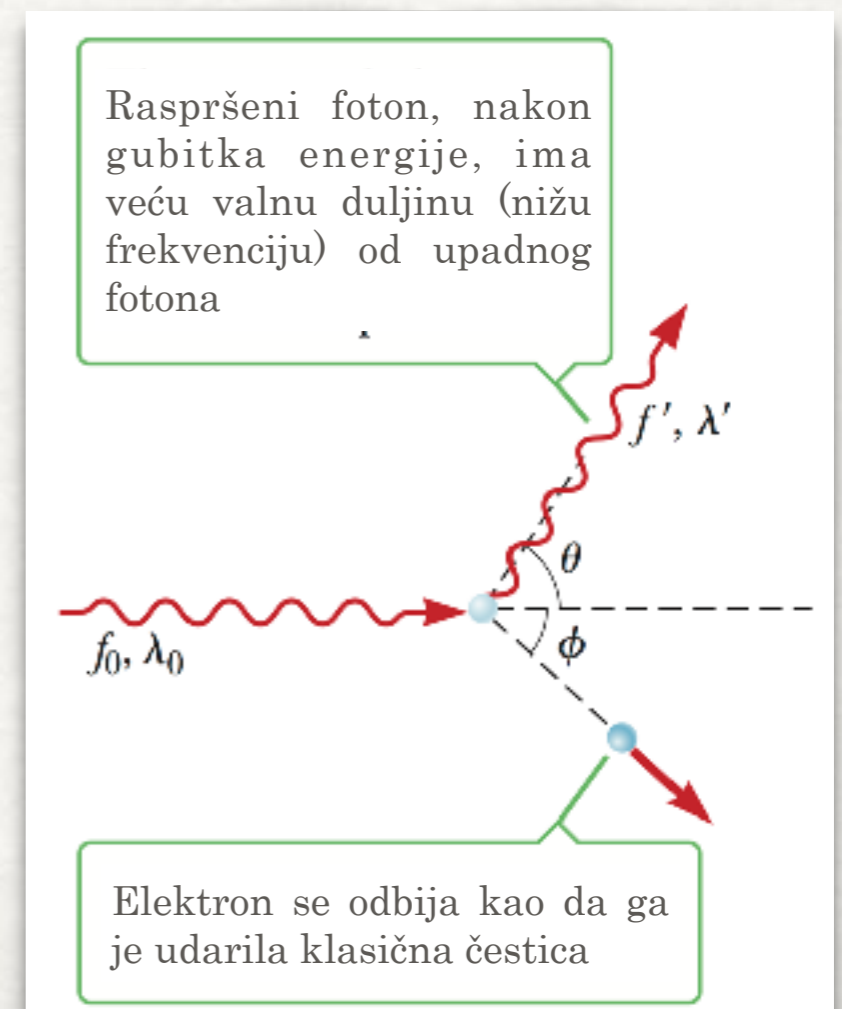
- foton se ponaša poput čestice
- sudar fotona s elektronom je poput sudara dvije klasične čestice
- foton nosi mjerljivu energiju i *impuls*
- i energija i impuls moraju biti očuvani u sudaru
- prilikom sudara foton predaje dio energije i impulsa elektronu (slika)

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta)$$

Comptonova valna duljina
(0.00243 nm)



Arthur H. Compton
(1892-1962)



DUALNA PRIRODA SVJETLOSTI I TVARI

- fenomeni poput fotoelektričnog efekta i Comptonovog efekta pokazuju da u slučaju međudjelovanja svjetlosti (ili nekog drugog elektromagnetskog vala) i tvari, svjetlost se ponaša kao da se sastoji od čestica energije hf i impulsa h/λ
- u drugim pak slučajevima svjetlost se ponaša kao val, npr. kod interferencije i difrakcije
- u svojoj doktorskoj disertaciji 1924. g. Louis de Brogli je postulirao da **budući da fotoni posjeduju karakteristike valova i čestica, možda svi oblici tvari posjeduju oba svojstva**
- u tadašnje doba, ova revolucionarna ideja nije imala eksperimentalnu potkrepu
- prema de Brogliu, elektroni također posjeduju karakteristike valova i tvari
- energija fotona je: $E = hf = h \frac{c}{\lambda}$
- impuls fotona možemo pisati kao: $p = \frac{E}{c} = \frac{hc}{c\lambda} = \frac{h}{\lambda}$
- iz ovoga je očito da valnu duljinu fotona možemo specificirati njegovim impulsom, odnosno: $\lambda = \frac{h}{p}$

- de Broglie je predložio da sve materijalne čestice s impulsom p imaju karakterističnu valnu duljinu $\lambda = h/p$
- budući da je impuls čestice mase m jednak $p = mv$, de Broglieva valna duljina je:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

- nadalje, de Broglie je postulirao da za frekvencije valova tvari (valovu povezani s česticama čija je masa u mirovanju različita od nule) vrijedi Einsteinova relacija za fotone, $E = hf$, pa je:

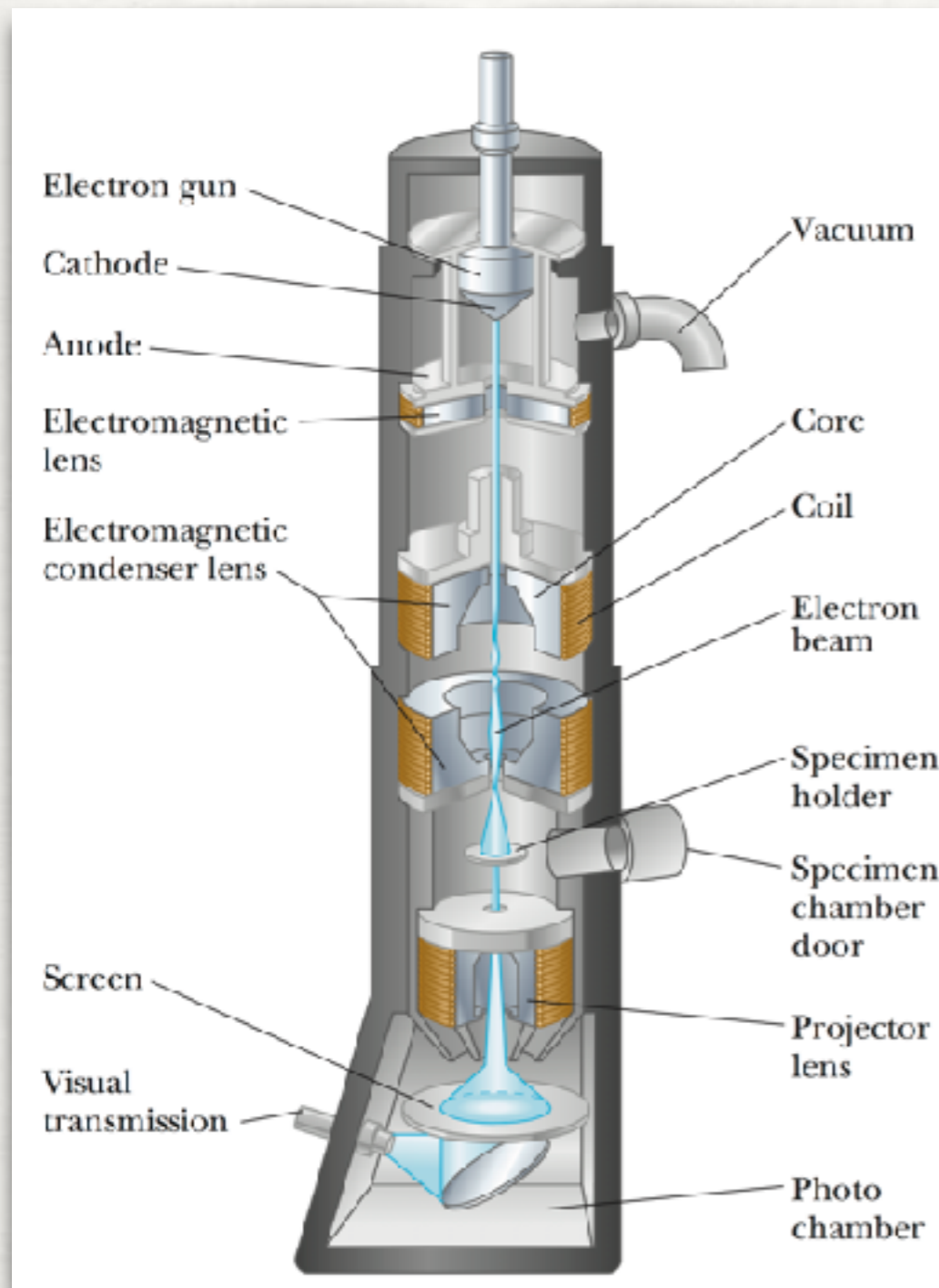
$$f = \frac{E}{h}$$

- iz ove dvije relacije očita je dualnost tvari, budući da se u obje pojavljuju čestični koncepti (energija i impuls), ali i valni koncepti (valna duljina i frekvencija)
- Davisson-Germerov eksperiment iz 1927. g. potvrdio je de Broglievu hipotezu
- u tom eksperimenti elektroni su korišteni za dobivanje difrakcijske slike nakon raspršenja u kristalu

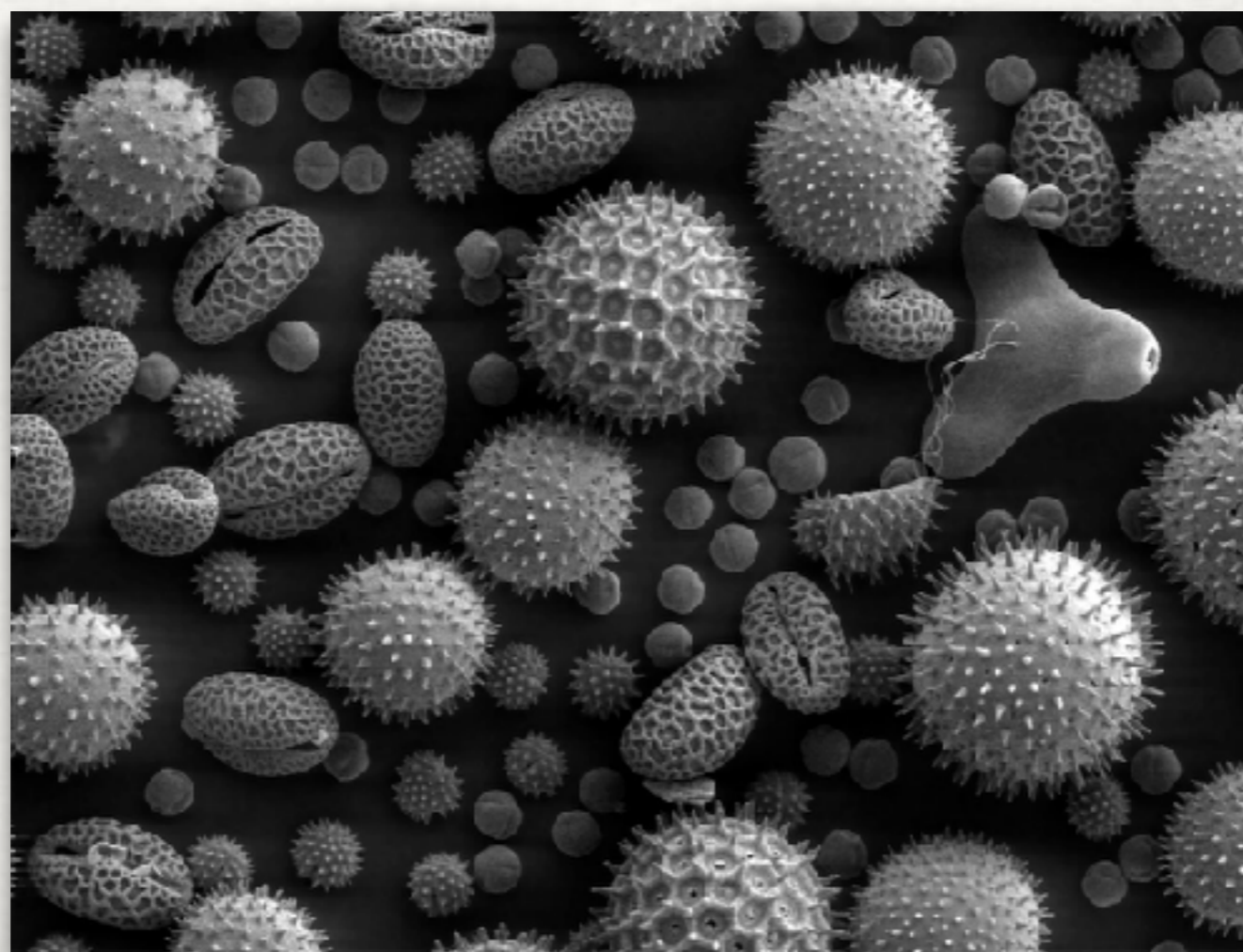
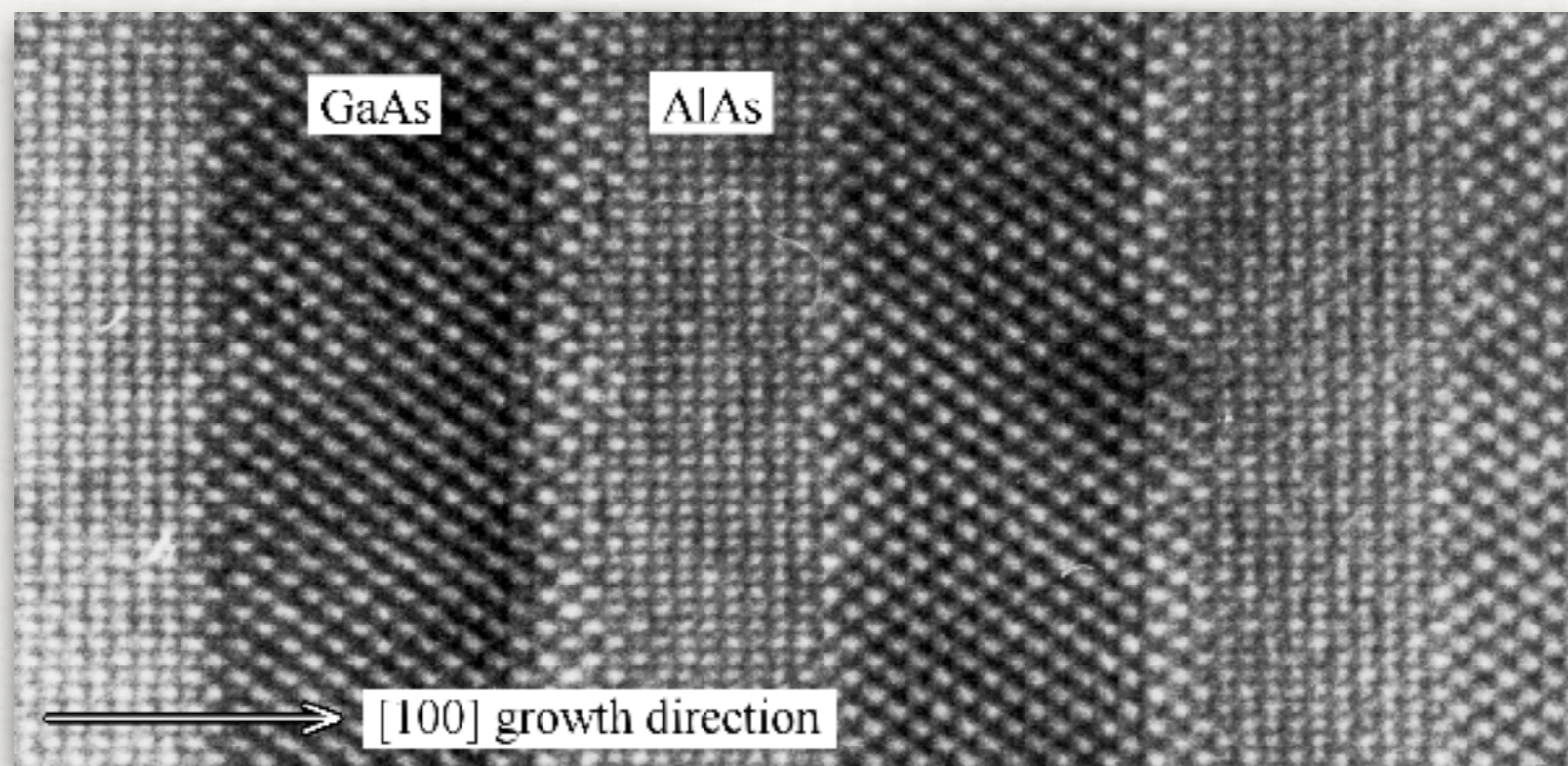
Louis de Broglie
(1892-1987)



PRIMJENA: ELEKTRONSKI MIKROSKOP

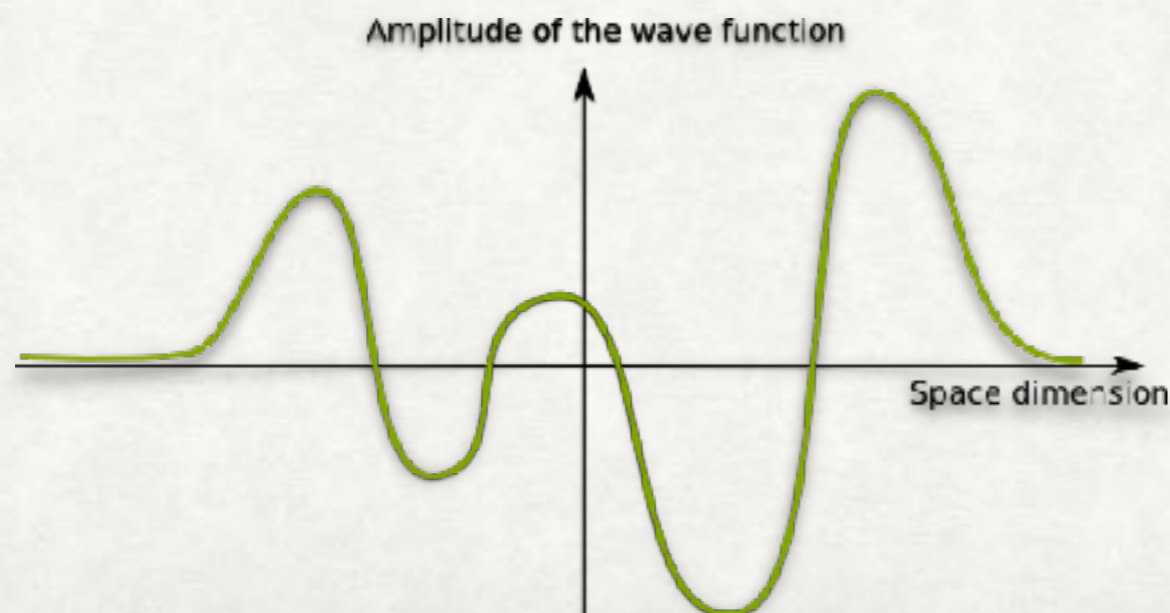


Visoko-razlučivi transmisijski elektronski mikroskop
Fizički odsjek, PMF



VALNA FUNKCIJA

- de Broglieva revolucionarna ideja o dualnosti val-materija uskoro postaje u potpunosti prihvaćena od strane znanstvene zajednice i temelj za shvaćanje subatomske svijeta
- 1926. g. austrijsko-njemački fizičar Erwin Schrödinger predložio je valnu jednadžbu koja opisuje na koji način se valovi tvari mijenjaju u prostoru i vremenu
- Schrödingerova valna jednadžba predstavlja temelj teorije kvantne mehanike
- po važnosti je u kvantnoj mehanici jednaka Newtonovim zakonima u klasičnoj mehanici
- uspješno je primijenjena na problem vodikovog atoma, i ostale brojne mikroskopske sustave
- rješenje S. J. je veličina Ψ koja se naziva valna funkcija
- svaka čestica predstavljena je valnom funkcijom Ψ koja ovisi o položaju i vremenu
- njen kvadrat, Ψ^2 , predstavlja vjerojatnost nalaženja čestice u nekom području



Erwin Schrödinger
(1887-1961)



RELACIJE NEODREĐENOSTI

- u slučaju mjerenja brzine i položaje čestice u određenom trenutku, uvijek postoje greške koje proizlaze iz nesavršenosti eksperimenta
- sa stajališta klasične mehanike, moguće je u potpunosti utočniti sve potrebne parametre i tako dobiti savršeno točne informacije o položaju i brzini čestice
- kvantna teorija, pak, tvrdi kako je to nemoguće
- 1927. g. Werner Heisenberg postavio je princip neodređenosti:

Ukoliko je položaj čestice određen s greškom Δx , a istovremeno je određen njen impuls s greškom Δp_x , tada umnožak tih dvaju neodređenosti ne može nikako biti manji od $h/4\pi$:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

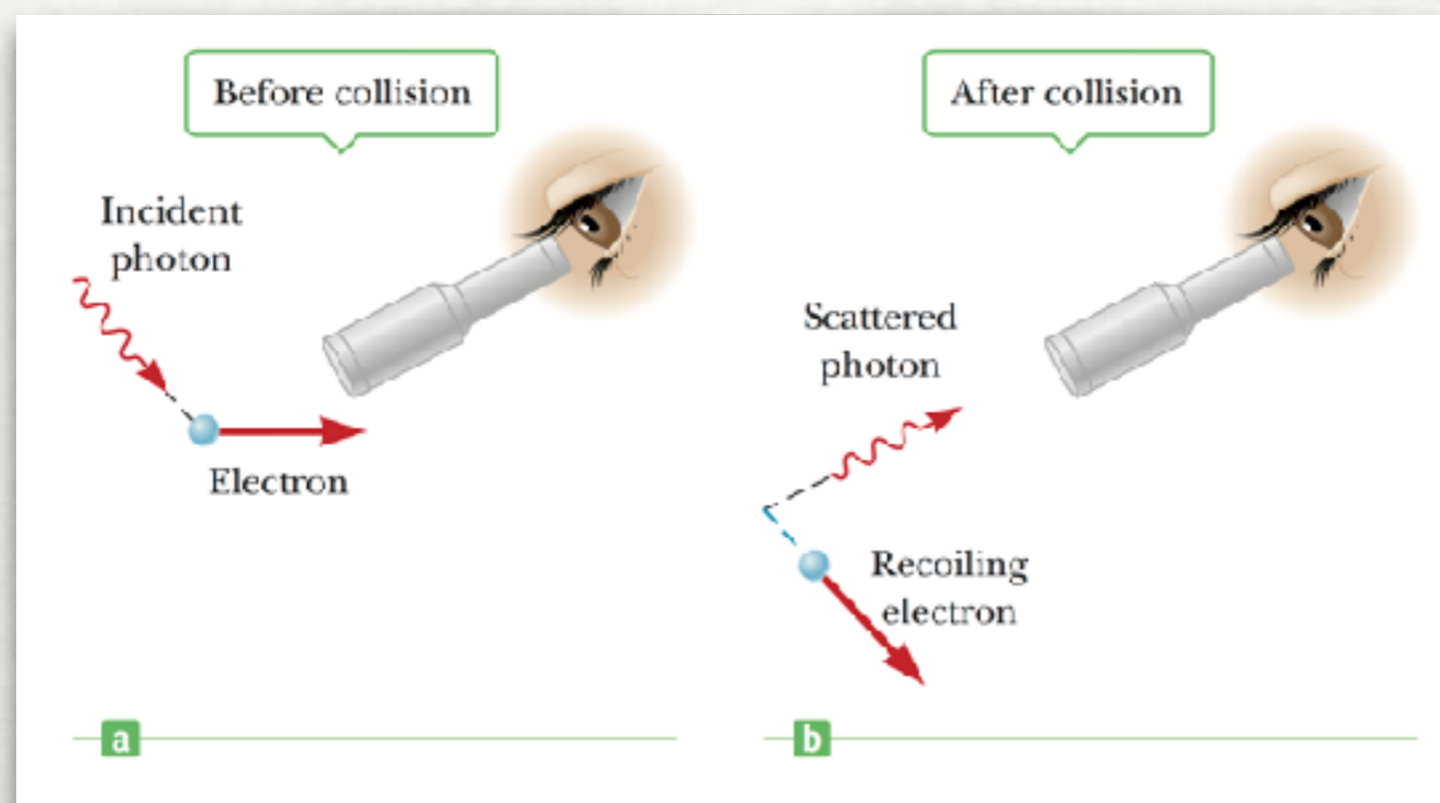
- drugim riječima, fizički je nemoguće istodobno odrediti točan položaj i impuls čestice
- ukoliko je Δx vrlo malen, tada je Δp_x vrlo velik i obrnuto



Werner Heisenberg
(1901-1976)



- da bismo razumjeli Heisenbergov princip neodređenosti, zamislimo sljedeći *misaoni* eksperiment (koji je zamislio sam Heisenberg):
 - želimo izmjeriti položaj i impuls elektrona što je moguće preciznije
 - to možemo učiniti promatrajući elektron pod jakim svjetlosnim mikroskopom
 - da bismo vidjeli elektron i odredili njegov položaj, najmanje jedan foton svjetlosti se mora odbiti od njega, proći kroz elektron i doći do našeg oka
 - no, u trenutku sudara s elektronom, foton mu predaje nepoznati dio svog impulsa
 - u procesu točnog određivanja položaja elektrona (tj. kada je $\Delta x \ll \lambda$), svjetlost koja nam omogućava to određivanje mijenja impuls elektrona za nepoznati iznos (time je $\Delta p_x \gg \hbar/\lambda$)



- upadni foton ima impuls h/λ
- kao posljedica sudara, foton predaje dio impulsa elektronu (x-smjer)
- neodređenost impulsa elektrona nakon sudara jednaka je impulsu fotona ($\Delta p_x = h/\lambda$)
- budući da foton posjeduje valna svojstva, očekujemo da položaj elektrona možemo odrediti unutar jedne valne duljine fotona, odnosno $\Delta x = \lambda$
- iz toga proizlazi:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \cdot \lambda = h$$

- to je minimalna vrijednost koju umnožak neodređenosti može poprimiti pa sigurno vrijedi:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

- razlika u odnosu na sofisticiranije račune koje je proveo Heisenberg je samo u numeričkom faktoru $1/4\pi$
- drugi način pisanja relacija neodređenosti je pomoću energije sustava koju se mjeri u trenutku t :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

- energija čestice ne može se izmjeriti precizno u vrlo kratkom vremenskom periodu



OPERATORI

- sve mjerljive veličine nazivaju se *observable*
- u kvantnoj fizici observable se opisuju valovima a ne diskretnim česticama
- observable se u K.F. prikazuju operatorima
- npr.:


$f(x)$	bilo koja funkcija položaja ili potencijala	$f(x)$
p_x	x komponenta impulsa p_x	$\frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
E	Energija (Hamiltonijan) vremenski neovisan	$\frac{p^2}{2m} + V(x)$
E	Energija (Hamiltonijan) vremenski ovisan	$ih \frac{\partial}{\partial t}$
KE	Kinetička energija	$\frac{-h^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

SCHRÖDINGEROVA JEDNADŽBA

- budući da su čestice pokazuju valna svojstva, pretpostavka je da valna jednađba može objasniti njihovo ponašanje
- takvu jednađbu je prvi otkrio Schrödinger
- u S.J. svojstvene vrijednosti valne jednađbe predstavljaju energijske razine kvantnomehaničkog sustava
- valne funkcije su raspodjele vjerojatnosti
- vremenski ovisna S.J.:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r,t) = \hat{H} \Psi(r,t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r,t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r,t) \right] \Psi(r,t)$$


$$\frac{p^2}{2m} = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{mv^2}{2}$$