

Nastanak kvantne mehanike

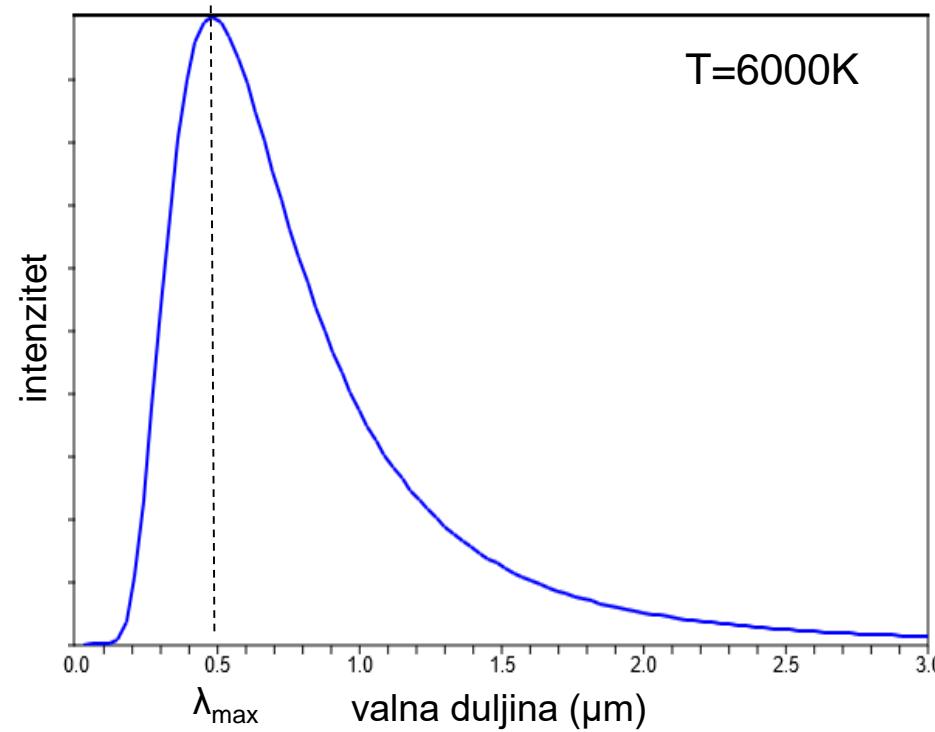
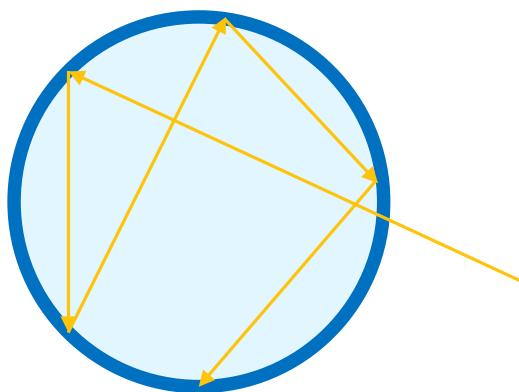
Kvantna teorija nikla je iz teškoća u koje je zapala klasična fizika.
Problemi koje klasična fizika nije mogla riješiti:

- **zračenje crnog tijela**
- **fotoelektrični efekt**
- **model atoma i linijski spektri**
- **Comptonov efekt**
- **ponašanje toplinskog kapaciteta čvrstih tijela na niskim temperaturama**
- **pokusi Michelsona i Morleya**

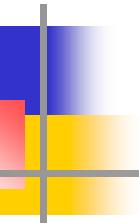
Jeans-Rayleighev zakon zračenja crnog tijela

Crno tijelo i njegovo zračenje

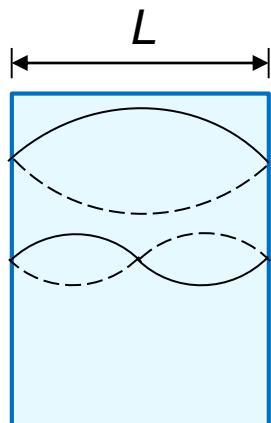
- Tijelo na bilo kojoj temperaturi emitira elektromagnetsko zračenje
- Crno tijelo je idealizirani sustav koji absorbira upadno zračenje svih valnih duljina
- Ako je zagrijano na određenu temperaturu, počinje zračiti elektromagnetske valove svih valnih duljina
- Šupljina je dobra aproksimacija crnom tijelu



- Eksperimentalna krivulja distribucije intenziteta zračenja po valnim duljinama



Oko 1900. godine Rayleigh i Jeans su pretpostavili da se zračenje unutar šupljine sastoji od stojnih elektromagnetskih valova. Izračunali su broj tih valova u određenom intervalu frekvencija, pomnožili s prosječnom energijom vala i tako odredili energiju.

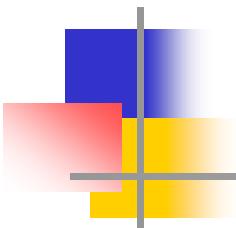


$$\text{dozvoljene valne duljine } \lambda = \frac{2L}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\text{valni broj } k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{2L} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\text{udaljenost između dva susjedna valna broja } \Delta k = \frac{2\pi}{2L} = \frac{\pi}{L}$$

$$\text{gustoća stojnih valova u k-prostoru } \frac{dn_k}{d^3 k} = \frac{1}{(\Delta k)^3} = \left(\frac{L}{\pi}\right)^3$$



Broj stojnih valova u intervalu od k do $k+dk$ je

$$dn_k = 2 \cdot 4\pi k^2 dk \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \cdot \frac{1}{8}$$

(uzimamo samo 1. oktant, a 2 zbog dvije moguće polarizacije vala)

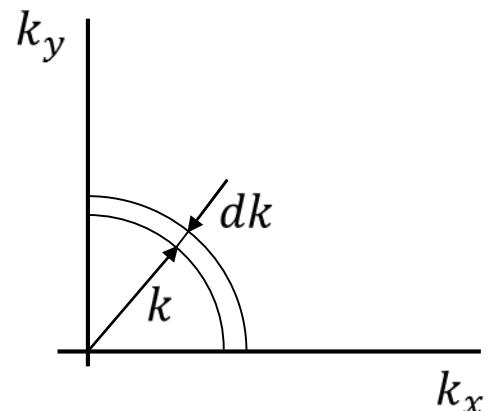
$$dn_k = V \frac{k^2 dk}{\pi^2}, \quad V = L^3$$

Disperzijska relacija elektromagnetskog vala u vakuumu $\omega = ck$

$$d\omega = cdk \longrightarrow dn_\omega = V \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$$

Prosječna energija harmoničkog oscilatora $k_B T$, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} J/K$

(Boltzmannova konstanta)



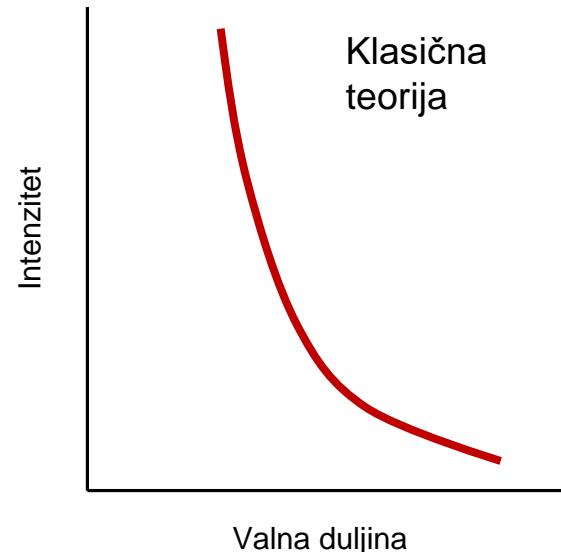
Nastanak kvantne mehanike

Energija zračenja spektra između frekvencija ω i $\omega+d\omega$

$$\langle E_\omega \rangle d n_\omega = k T V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$$

Rayleigh-Jeans zakon

- Klasična teorija nije mogla objasniti experimentalne podatke
 - Rayleigh-Jeans zakon vrijedio je pri velikim valnim duljinama
 - Ukupna energija zračenja (integral gornjeg izraza) po ω od 0 do ∞ divergira – **ulraljubičasta katastrofa**



Planckov zakon zračenja crnog tijela

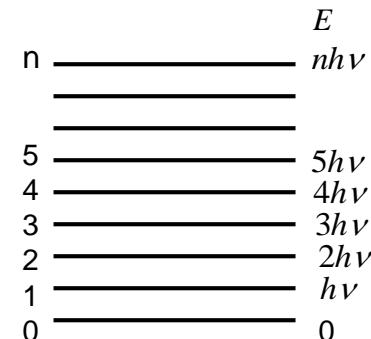
Planck je pretpostavio da je zračenje crnog tijela stvaraju oscilatori koji mogu imati samo diskretne energije

$$E_n = nh\nu$$

$n=0,1,2,3,\dots$ se naziva *kvantni broj*

ν je frekvencija osciliranja

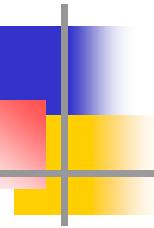
h je *Planckova konstanta*, $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$, $\hbar = h / 2\pi$



Boltzmannova raspodjela daje vjerojatnost da oscilator ima energiju $E_n = n\hbar\omega$

$$p_n = \frac{e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}$$

Nastanak kvantne mehanike



Srednja energija zračenja frekvencijom ω je $\langle E_\omega \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}$

$$\langle E_\omega \rangle = -\hbar\omega \frac{d}{dx} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}, \quad x = \frac{\hbar\omega}{kT}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = \frac{1}{1 - e^{-x}}$$

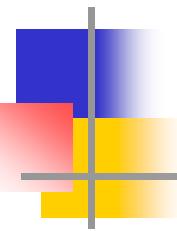
$$\langle E_\omega \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

Kako je $dn_\omega = V \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$ slijedi

$$\langle E_\omega \rangle dn_\omega = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$$

Planckov zakon

Nastanak kvantne mehanike



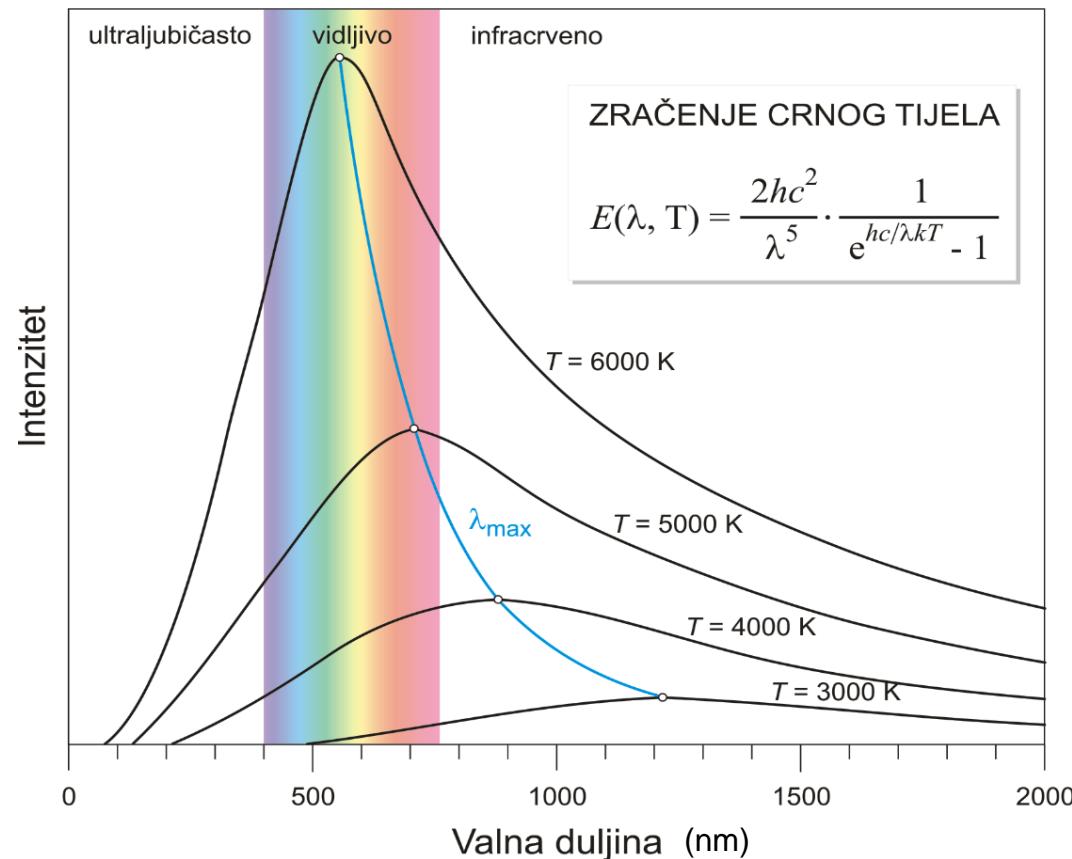
Planckov zakon zračenja se izvrsno slaže s eksperimentalnim rezultatima.

$$\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}, \quad \text{za } \hbar\omega \gg kT$$

Krivulja eksponencijalno pada za male valne duljine.

$$e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} = 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}, \quad \text{za } \hbar\omega \ll kT$$

→ Rayleigh-Jeans zakon



Bohrov model atoma vodika

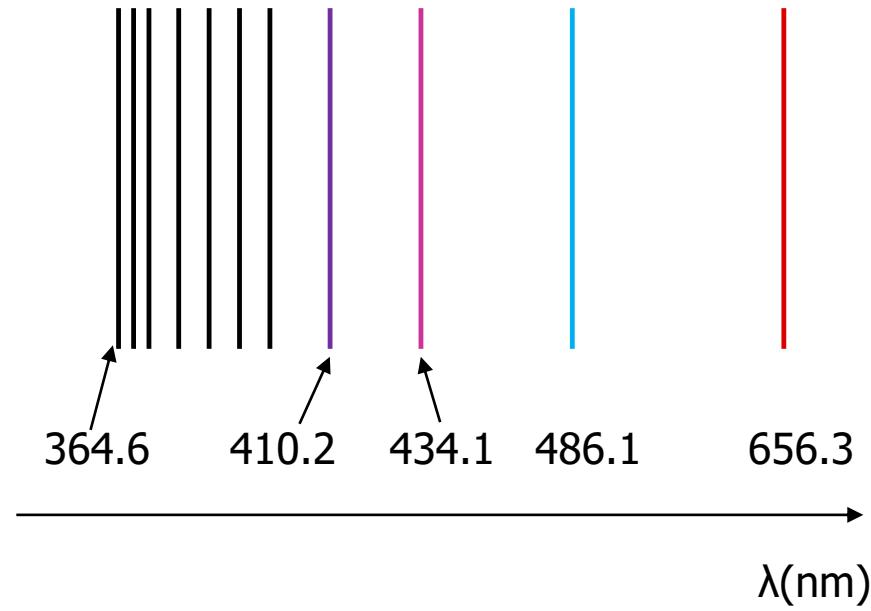
Emisijski spektar vodika

- Valne duljine vodikovih spektralnih linija

mogu se naći iz

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

- R_H je *Rydbergova konstanta*
 - $R_H = 1.0973732 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
- n je prirodan broj, $n = 1, 2, 3, \dots$
- Spektralne linije odgovaraju različitim vrijednostima od n
- Ovo je tzv. *Balmerova serija*
- Primjeri spektralnih linija su
 - $n = 3, \lambda = 656.3 \text{ nm}$
 - $n = 4, \lambda = 486.1 \text{ nm}$



Emisijski spektar vodika

Bohrovi postulati

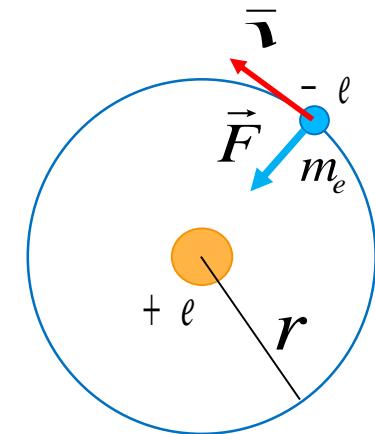
Elektron se giba po kružnoj orbiti oko protona pod utjecajem Coulombove privlačne sile

- Coulombova sila stvara centripetalnu akceleraciju
1. Samo određene orbite elektrona su stabilne
 - Ovo su orbite na kojima atom ne emitira elektromagnetsko zračenje
 - Stoga, energija atoma ostaje konstantna
 2. Atom emitira zračenje frekvencije f kad elektron skoči s početnog stanja veće energije u niže stanje

$$E_i - E_f = hf$$

3. Dozvoljene orbite elektrona moraju zadovoljavati uvjet da moment količine gibanja elektrona bude

$$m_e v r = n \hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



Radijusi i energije orbita

Radijus Bohrovih orbita je kvantiziran

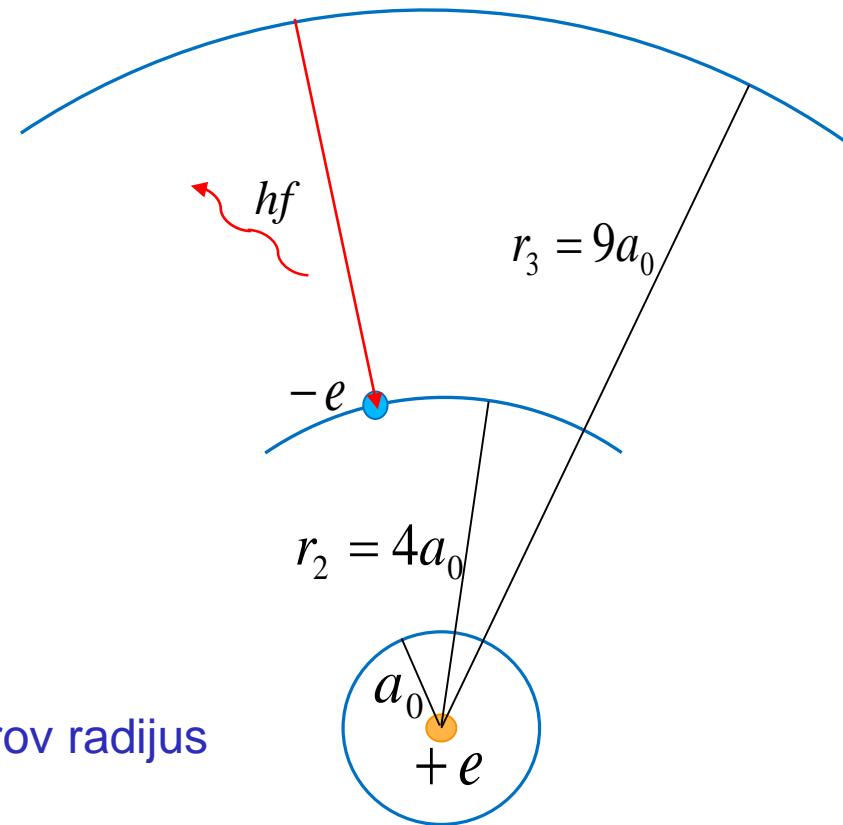
$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$m_e v r = n\hbar \quad \longrightarrow \quad v = \frac{n\hbar}{m_e r}$$

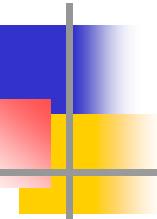
$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_e e^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Radijus prve staze $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \text{ \AA}$ - **Bohrov radijus**

- Radijus orbite se može izraziti preko Bohrovog radijusa
 - $r_n = n^2 a_0$



Nastanak kvantne mehanike



Ukupna energija elektrona u atomu vodika jednaka je zbroju kinetičke i potencijalne

$$E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Kako je $v = \frac{n\hbar}{m_e r}$

uvrštavanjem izraza za radijus n -te orbite u gornje izraze dobijamo ukupnu energiju elektrona u atomu u n -toj orbiti

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

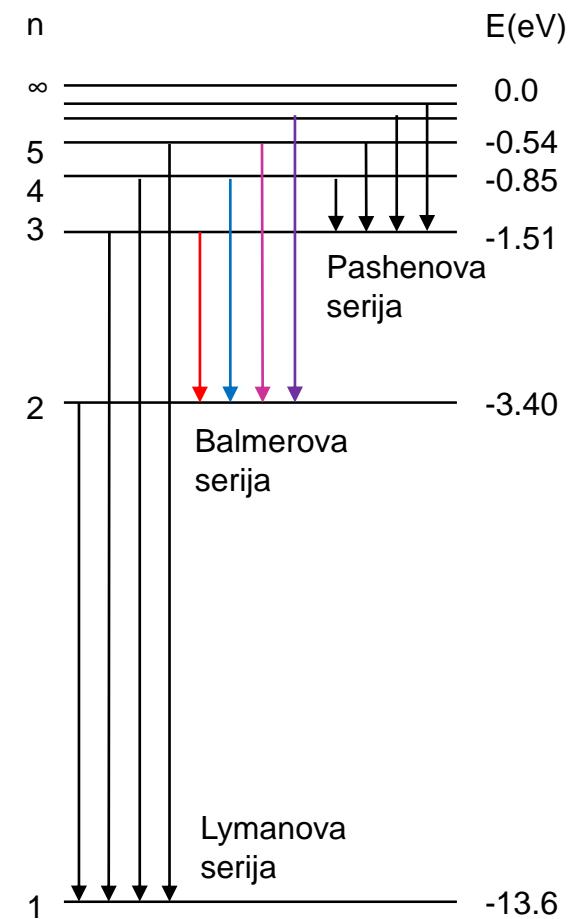
- Energija orbite je
 - $E_n = -13.6 \text{ eV}/ n^2$
- Stanje najniže energije se naziva *osnovno stanje*
 - Odgovara mu $n = 1$
 - Energija mu je -13.6 eV
- Sljedeći energijski nivo ima energiju -3.40 eV
- *Ionizacijska energija* je energija potrebna da se elektron oslobodi iz atoma
 - Ionizacijska energija vodika je 13.6 eV

Energijski nivoi

- Vrijednost R_H dobivena iz Bohrove analize odlično se slaže s eksperimentalnom vrijednošću
- Valne duljine svih spektralnih linija mogu se naći iz općeg izraza

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

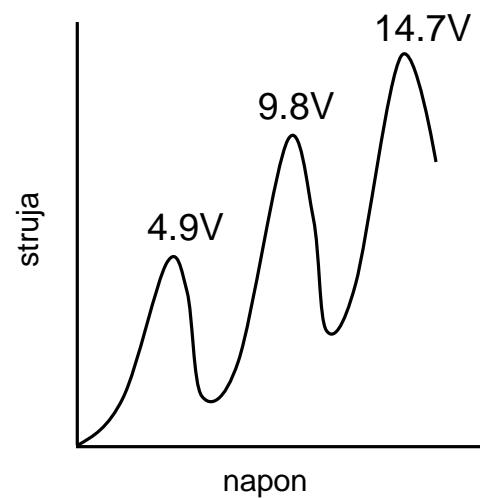
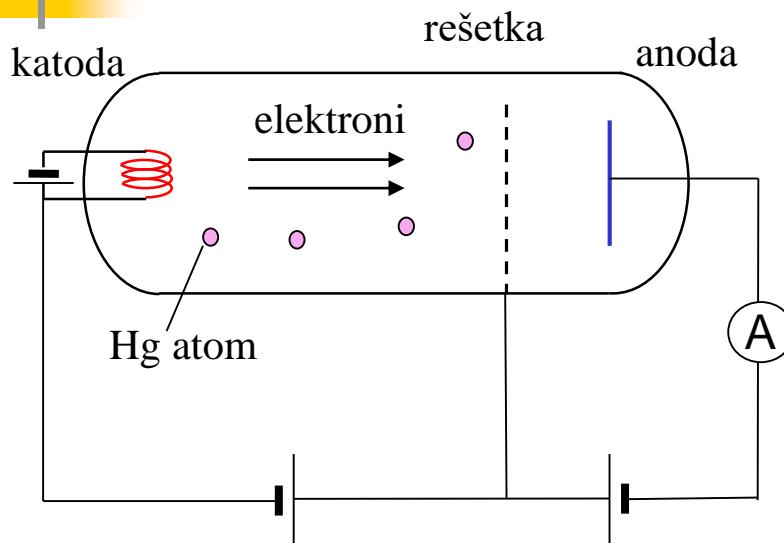
- Lymanova serija, $n_f = 1$
- Balmerova serija, $n_f = 2$
- Paschenova serija, $n_f = 3$
- Kad dođe do prijelaza iz stanja, n_i u stanje, n_f (gdje je $n_i > n_f$), emitira se foton
 - Foton ima frekvenciju $f = (E_i - E_f)/h$ i valnu duljinu λ



Izmjene Bohrove teorije

- Sommerfeld je proširio rezultate na eliptičke putanje
 - Zadržao je *glavni kvantni broj*, n
 - Uveo je *orbitalni kvantni broj*, ℓ
 - ℓ je prirodan broj od 0 do $n-1$
 - Sva stanja s istim glavnim kvantnim brojem tvore *ljusku*
 - Stanja s danim n i ℓ tvore *podljusku*
- Zeemanov efekt
 - Zeemanov efekt je cijepanje spektralnih linija u jakom magnetskom polju
 - Energija elektrona se lagano mijenja kad je atom u magnetskom polju
 - Novi kvantni broj, m_ℓ , nazvan *orbitalni magnetski kvantni broj*, morao se uvesti da se ovo objasni
 - m_ℓ je cijeli broj između $-\ell$ to $+\ell$
- Spektrometeri velike rezolucije pokazuju da su spektralne linije, u biti, dvije vrlo bliske linije, i kad nema magnetskog polja. Ovo cijepanje naziva se *fina struktura*.
 - Novi kvantni broj, m_s , nazvan *spinski magnetski kvantni broj*, je uveden da objasni finu strukturu

Franck-Hertzov eksperiment



- Franck-Hertzov eksperiment je jedna od prvih direktnih eksperimentalnih potvrda kvantizacije energije u Bohrovom modelu atoma. Franck i Hertz svojim su eksperimentom 1914. godine pokazali da uzorak žive apsorbira samo diskretne količine energije.
- Energija ionizacije živinog atoma je 4.9eV . Kod napona 4.9V elektron na svom putu od katode do anode dobije, neposredno ispred anode, dovoljno energije da ionizira druge atome žive. Na taj način poveća se broj elektrona koji stignu na anodu, te anodna struja kod 4.9 V naglo poraste.

Nastanak kvantne mehanike



Dodatni materijali

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/blackbody-spectrum>

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/hydrogen-atom>