

De Broglieva hipoteza o valovima materije



- 1924, Louis de Broglie postulirao je da *zato što zračenje ima valna i čestična svojstva, možda i svi oblici materije imaju oba svojstva*
- Npr. za foton

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda}, p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$$

- de Broglie je predložio da ovaj izraz vrijedi za svaku česticu. Dakle, frekvencije i valne duljine tvari mogu se odrediti
- *de Broglieva valna duljina* čestice je

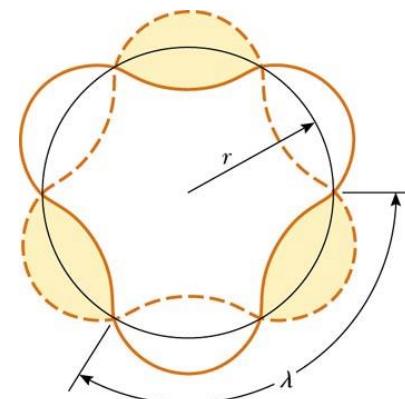
$$\boxed{\lambda = \frac{h}{mv}}$$

- de Broglie je postulirao da sve čestice zadovoljavaju Einsteinovu relaciju $E = hf$
- Dakle, frekvencija valova materije je

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

de Broglievi valovi u atomu vodika

- Jedan od Bohrovih postulata bio je da je moment količine gibanja elektrona kvantiziran, ali nije bilo objašnjena zašto
- de Broglie je prepostavio da će orbite elektrona biti stabilne jedino ako sadrže prirodan broj valnih duljina



$$2\pi r = n\lambda, n = 1, 2, 3, \dots , \quad \lambda = \frac{h}{m_e v} \quad \longrightarrow \quad m_e v r = n \frac{h}{2\pi}, n = 1, 2, 3, \dots$$

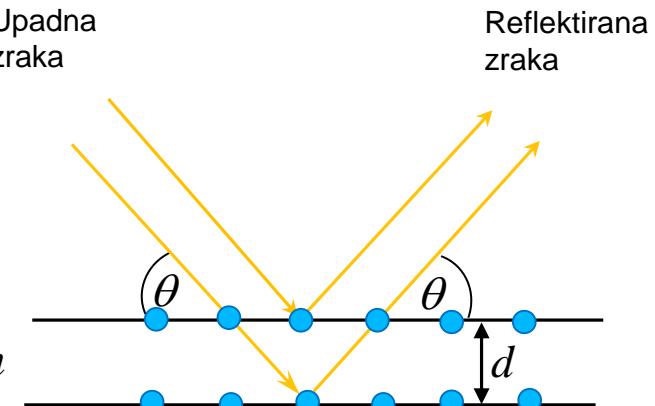
Ovo je bio prvi uvjerljiv argument da je valna priroda tvari u temeljima ponašanja atomskog sistema.

Eksperimentalna potvrda valne prirode tvari - ogib elektrona

- Najjači dokaz da je nešto val je ako možemo načiniti ogib ili difrakciju (zakretanje iza ugla). Pri ogibu intenzitet svjetlosti se može pojačati ili smanjiti.
- 1927. godine Davisson i Germer uočili su da pri refleksiji katodnih zraka (elektrona) na kristalima nikla dolazi do pojačavanja samo kod određenih kuteva koji zadovoljavaju Braggov uvjet za ogib rendgenskih zraka. Slijedila su difrakcijska mjerena na drugim materijalima.
 - Zraka koja se reflektira s donje površine putuje dalje nego ona koja se reflektira s gornje površine.
 - Ako je razlika puta jednaka nekom prirodnom višekratniku valne duljine, dolazi do konstruktivne interferencije.
 - *Braggov zakon* daje uvjet konstruktivne interferencije

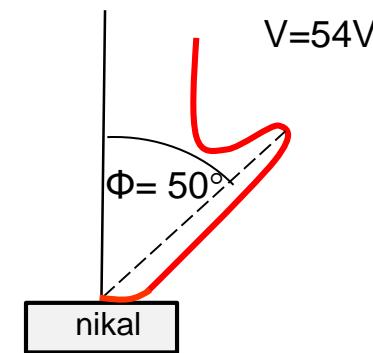
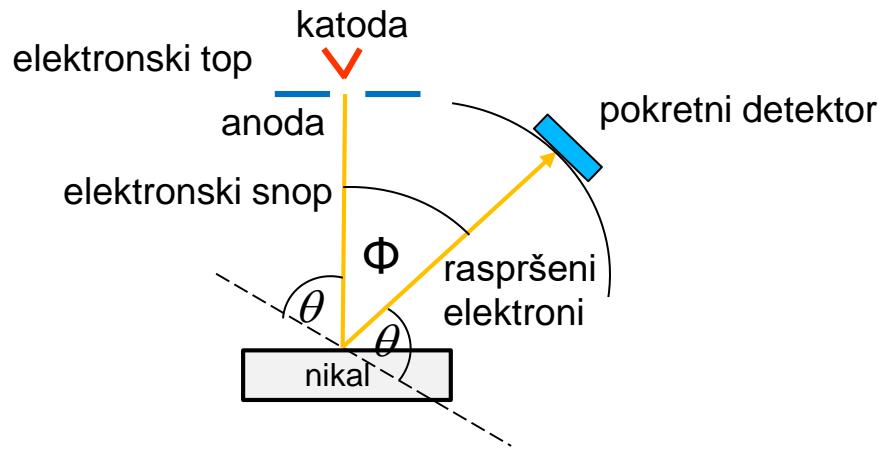
$$2d \sin \theta = m\lambda, m = 1, 2, 3\dots$$

$$d \approx 10^{-10} m$$



Eksperiment Davissona i Germera

- Iz pokusa su dobili prvi maksimum za $\theta=65^\circ$ pri naponu između katode i anode 54V, a kako je za nikal $d=0.91\text{\AA}$ pomoću Braggovog zakona dobili su valnu duljinu elektrona $\lambda=1.65\text{\AA}$.
- de Broglieva teorija: $\lambda=\frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} = 1.66\text{\AA}$
- Valna duljina elektrona izračunata iz difrakcijskih podataka slagala se s očekivanom de Broglievom valnom duljinom.
- Rezultati Davissona i Germera potvrdili su valnu prirodu elektrona.

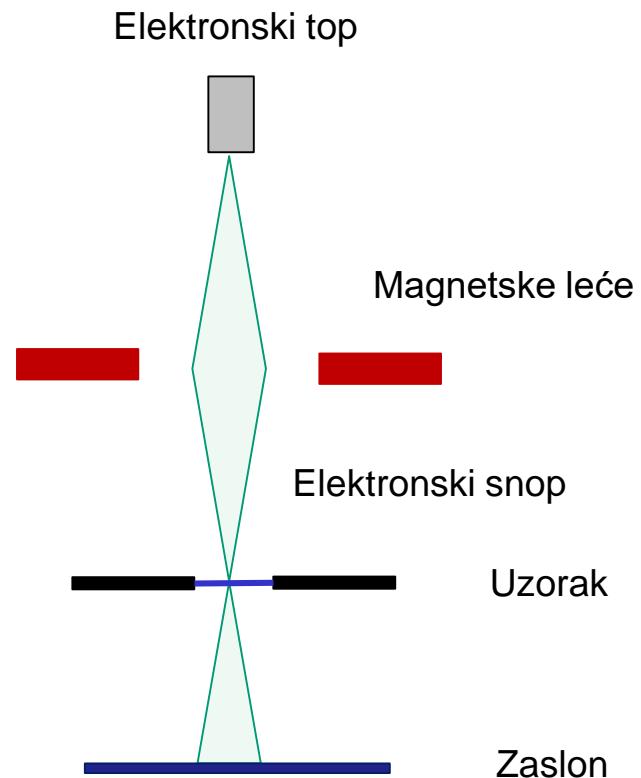


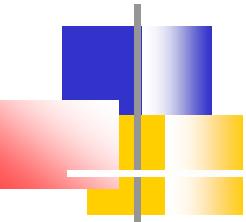
Elektronski mikroskop

- Elektronski mikroskop ovisi o valnim svojstvima elektrona
- Mikroskop može razlučiti detalje koji su malo manji od valne duljine zračenja koje se koristi za obasjavanje objekta. Kod običnog mikroskopa je ograničenje valna duljina svjetlosti (reda veličine $1\mu\text{m}$)
- Elektroni se mogu ubrzati na velike energije i imati male valne duljine (valna duljina se smanjuje tako da se brzina elektrona povećava)

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

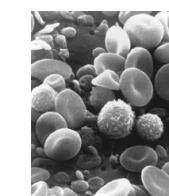
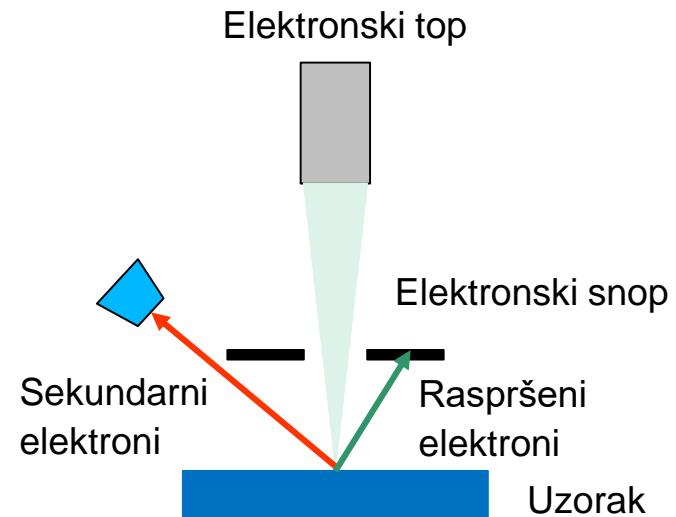
- Elektronski mikroskop na temelju ogiba elektrona su načinili oko 1934. Bories i Ruska





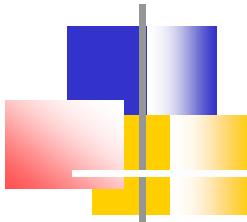
Pretražni (scanning) elektronski mikroskop

- Pretražni elektronski mikroskop je uređaj kojim se može doći do atomskih dimenzija
- Radi na načelu da stvorimo vrlo dobro fokusirani snop elektrona (na 1nm promjera) koji pretražuje površinu uzorka
- Elektroni se na uzorku raspršuju, te izbacuju i sekundarne elektrone
- Rasprešeni i sekundarni elektroni idu u pojačalo
- Kako pomičemo snop mijenja se broj raspršenih i sekundarnih elektrona, preko pojačala mijenja se svjetlost i tama na ekranu. Iz mrlja svjetla i tame treba stvoriti sliku
- Mogu se promatrati objekti na nekoliko nanometara, npr. dijelovi stanice i fina struktura metala i kristalnih materijala



Slika krvnih stanica

National Cancer Institute
Bruce Wetzel and Harry Schaefer (Photographers)



Schrödingerova valna kvantna mehanika

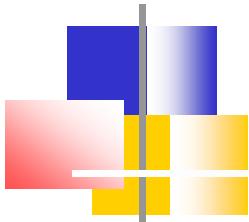
- 1926. Schrödinger je predložio **valnu jednadžbu** koja opisuje način na koji se valovi materije mijenjaju u prostoru i vremenu.
- **Schrödingerova valna jednadžba** je ključni element u kvantnoj mehanici

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

- **Hamiltonov operator je** $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t)$, gdje je $V(\vec{r}, t)$ potencijalna energija. Stoga je

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

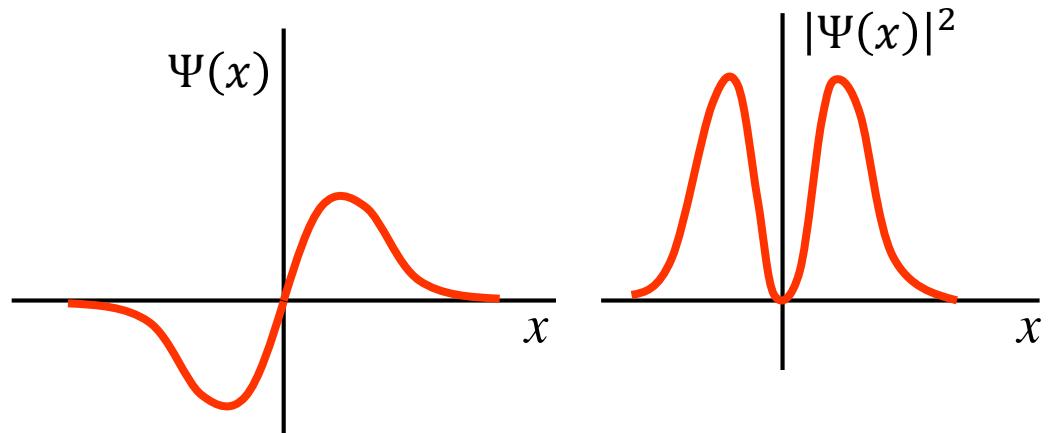
- Rješenja Schrödingerove valne jednadžbe su **valne funkcije**, $\Psi(\vec{r}, t)$ koje ovise o položaju i vremenu.



- Vrijednost $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ na nekom položaju i u danom trenutku vremena je proporcionalna vjerojatnosti pronalaženja čestice na tom položaju u tom trenutku
- Normalizacija valne funkcije

$$\int \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)d^3r = \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

- Jedan od prvih uspjeha kvantne mehanike bio rješenje valne jednadžbe vodikova atoma.
- Značaj kvantne mehanike je da kvantni brojevi i ograničenja njihovih vrijednosti proizlaze direktno iz matematike, a ne iz pretpostavki napravljenih da bi se teorija slagala s eksperimentima.
- Primjer valne funkcije i njene gustoće vjerojatnosti



Vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba

- Ograničimo li se na specijalan tip potencijala koji ovisi samo o položaju \vec{r} , a ne ovisi o vremenu Schrödingerova jednadžba postaje

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

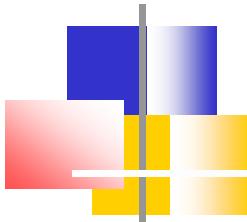
- Separacijom $\Psi(\vec{r},t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \Psi(\vec{r})$ dobijamo vremenski neovisnu Schrödingerovu jednadžbu

$$E\Psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r})$$

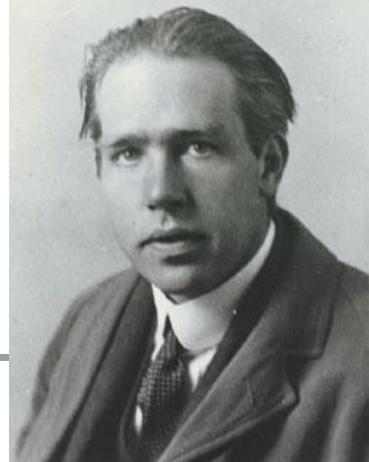
odnosno

$$E\Psi(\vec{r}) = \hat{H}\Psi(\vec{r}), \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

Ova jednadžba zapravo je problem vlastitih vrijednosti u kojem je ukupna energija čestice E vlastita vrijednost operatora ukupne energije \hat{H} .



Bohrov princip komplementarnosti

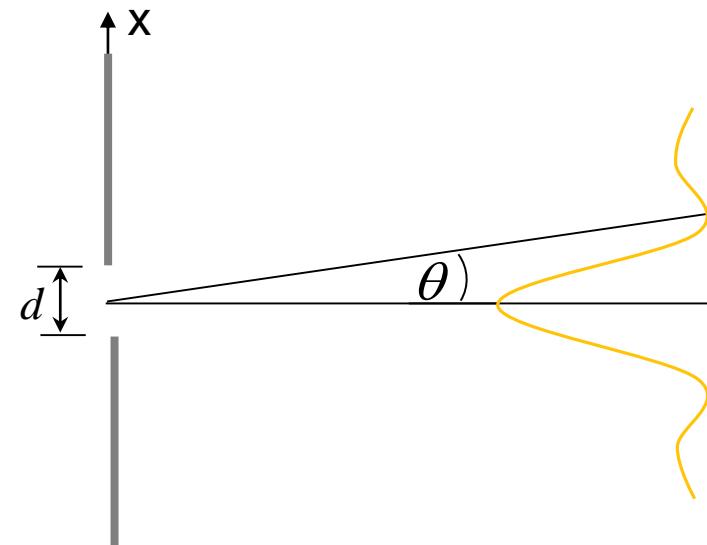


- Prikladan opis stvarnosti na atomskoj razini traži primjenu dvaju različitih modela, valnog i čestičnog, da bi se objasnilo ponašanje tvari i zračenja, te njihovo međudjelovanje
- Problem je da su čestični i valni model međusobno suprotni, a ipak nam oba trebaju.
- Suprotni su u tome što se val prostire po jednom velikom prostoru, a čestica je točkasta.
- 1928. godine Niels Bohr je uočio da mi nikad istovremeno ne koristimo oba modela i na taj način njhove suprotnosti ne dolaze do izražaja, te formulirao princip komplementarnosti:

Valni i čestični opis stvarnosti su komplementarni. Oba služe za opisivanje ponašanja elektromagnetskog zračenja i atomskih čestica, ali se oni nikad ne primjenjuju istovremeno u istom fizikalnom eksperimentu.

Princip neodređenosti

- Pri mjeranjima, uvijek postoje eksperimentalne neodređenosti
 - Klasična mehanika ne daje u osnovi nikakve zapreke krajnjem poboljšanju u mjeranjima
 - Klasična mehanika dozvoljava mjerena s proizvoljno malim neodređenostima
 - Kvantna mehanika predviđa da postoji zapreka mjerjenja s proizvoljno malim neodređenostima
 - Promotrimo ogib česice valne duljine λ na pukotini širine d (slika)
 - Širina pukotine daje neodređenost u poznavanju položaja $\Delta x = d$
 - $\Delta p_x = 2p \sin \theta$ predstavlja neodređenost u poznavanju x komponente količine gibanja



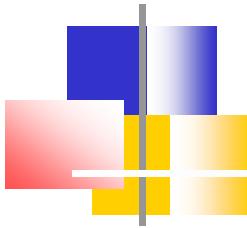
$$\lambda/2 = d \sin \theta \quad \text{prvi minimum}$$

$\lambda = \frac{h}{p}$ de Broglie

$$2p \sin \theta d = h, \quad \Delta p_x = 2p \sin \theta, \quad \Delta x = d$$

$$\Delta x \Delta p_x \approx h$$

Nastanak kvantne mehanike

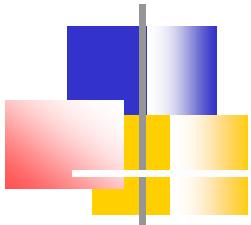


- 1927 Heisenberg je uveo princip neodređenosti
 - Ako je mjerjenje položaja čestice izvedeno s preciznošću Δx i istovremeno je mjerjenje količine gibanja izvedeno s preciznošću Δp_x , tada produkt dviju neodređenosti ne može biti manji od $h/4\pi$,

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

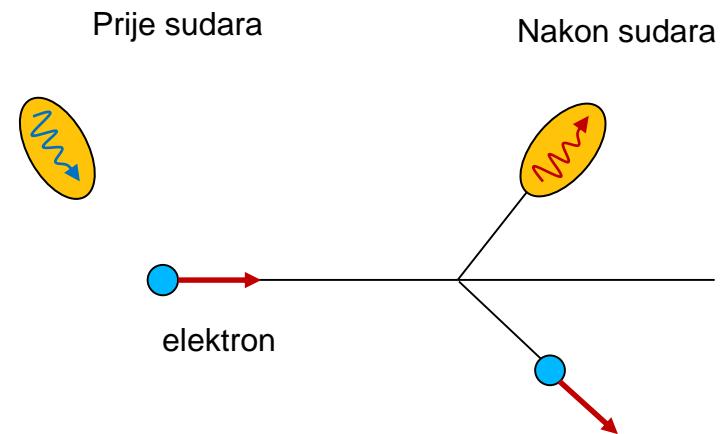
- Fizički je nemoguće mjeriti istodobno do na proizvoljnu točnost položaj i količinu gibanja čestice
- Varijable vezane nejednadžbom neodređenosti zovu se konjugirane varijable
- Drugi oblik ovog principa govori o energiji i vremenu:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$
- Stanje koje postoji vrlo kratko ne može imati definiranu energiju. Npr. nestabilna stanja u atomima i uopće u kvantnim sustavima - za atom u pobuđenom stanju (Δt malo) ΔE nije točno određeno, atom u osnovnom stanju $\Delta E=0$ (vrijeme beskonačno)



Misaoni eksperiment za gledanje elektrona moćnim mikroskopom

- Zamislimo eksperiment kojim bi vidjeli elektron s moćnim mikroskopom
- Da bi vidjeli elektron, bar jedan foton mora se od njega odbiti
- Za vrijeme odbijanja, količina gibanja je prenijeta s fotona na elektron
- Stoga, svjetlo koje omogućava da točno odredimo položaj elektrona mijenja njegovu količinu gibanja



Nastanak kvantne mehanike



Dodatni materijali

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/davisson-germer>