

## Valovi materije

### Valna svojstva čestica

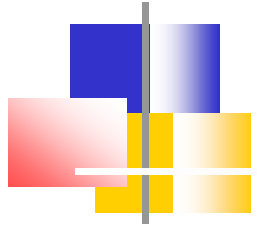
- 1924. Louis de Broglie postulirao je da *zato što zračenje ima valna i čestična svojstva, možda i svi oblici materije imaju oba svojstva*
- Nadalje, frekvencije i valne duljine tvari mogu se odrediti
- *de Broglieva valna duljina* čestice je

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

- Frekvencija valova materije je

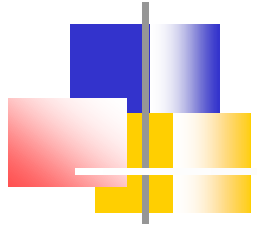
$$f = \frac{E}{h}$$





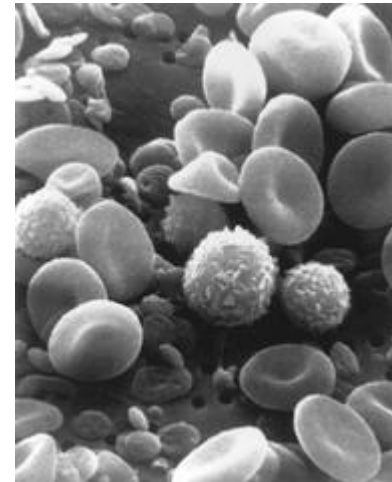
## Eksperiment Davissona i Germera

- Oni su raspršili niskoenergijske elektrone na kristalu nikla
- Slijedila su difrakcijska mjerenja na drugim materijalima
- Valna duljina elektrona izračunata iz difrakcijskih podataka slagala se s očekivanom de Broglievom valnom duljinom
- Ovo je potvrdilo valnu prirodu elektrona
- Drugi eksperimenti su potvrdili valnu prirodu drugih čestica



## Elektronski mikroskop

- Elektronski mikroskop ovisi o valnim svojstvima elektrona
- Mikroskop može samo razlučiti detalje koji su samo malo manji od valne duljine zračenja koje se koristi za obasjavanje objekta
- Elektroni se mogu ubrzati na velike energije i imati male valne duljine



Slika krvnih stanica dobivena pretražnim elektronskim mikroskopom

National Cancer Institute

Bruce Wetzell and Harry Schaefer (Photographers)

## Valna funkcija



- 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

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

- Rješenja Schrödingerove valne jednadžbe su **valne funkcije,  $\Psi$**
- Valna funkcija ovisi o položaju i vremenu
- Reducirana Planckova konstanta  $\hbar = h / 2\pi$
- **Vrijednost  $|\Psi|^2$**  na nekom položaju i u danom trenutku vremena je **proporcionalna vjerojatnosti pronalaženja čestice na tom položaju u tom trenutku**
- Jedan od prvih uspjeha kvantne mehanike bio rješenje valne jednadžbe vodikova atoma

## Princip neodređenosti



- Pri mjerenjima, uvijek postoje eksperimentalne neodređenosti
  - Klasična mehanika ne daje u osnovi nikakve zapreke krajnjem poboljšanju u mjerenjima
  - Klasična mehanika dozvoljava mjerenja s proizvoljno malim neodređenostima
- 1927 Heisenberg je uveo princip neodređenosti
  - Ako je mjerenje položaja čestice izvedeno s preciznošću  $\Delta x$  i istovremeno je mjerenje količine gibanja izvedeno s preciznošću  $\Delta p_x$ , tada produkt dviju neodređenosti ne može biti manji od  $h/4\pi$ ,

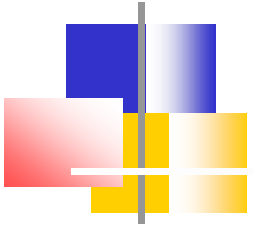
- Princip neodređenosti-matematički,

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

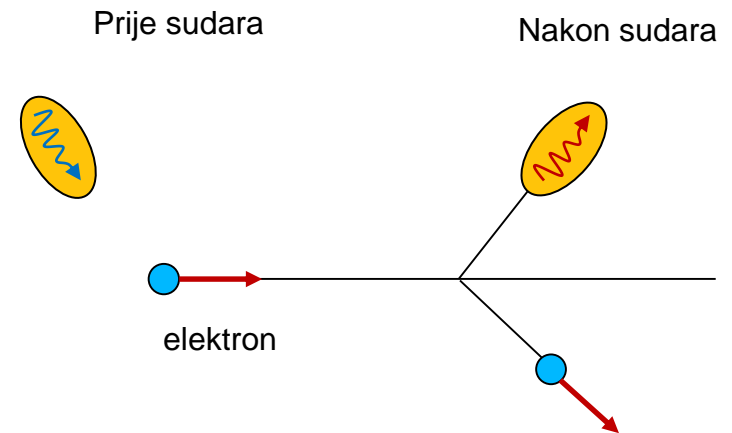
- Fizički je nemoguće mjeriti istodobno do na proizvoljnu točnost položaj i količinu gibanja čestice
- Drugi oblik ovog principa govori o energiji i vremenu:

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

# Valovi materije



- 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

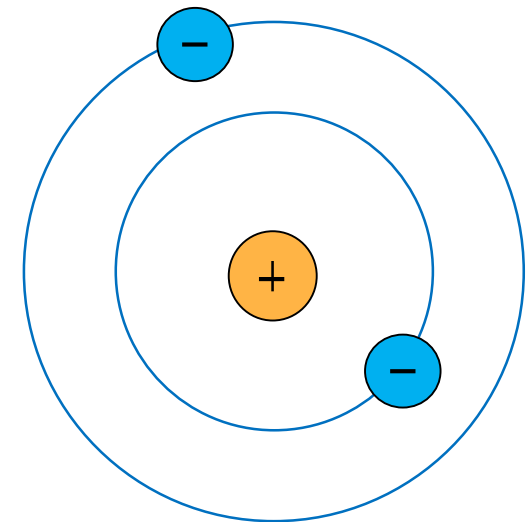


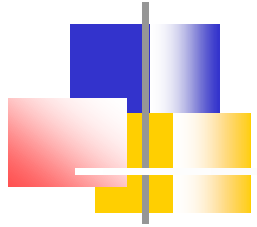
## Struktura atoma

### Rani modeli atoma

- Model pudinga

J. J. Thomson je 1898. pretpostavio da se naboji obaju predznaka nalaze jednoliko raspoređeni po cijelom volumenu atoma
- Rutherfordov model
  - Planetarni model
  - Zasnovan na rezultatima eksperimenata u kojima su se  $\alpha$ -zrake raspršivale na tankim listićima zlata i drugih kovina
  - Pozitivan naboj je koncentriran u centru atom, nazvanom jezgra (*nucleus*)
  - Elektroni kruže oko jezgre kao planeti oko Sunca





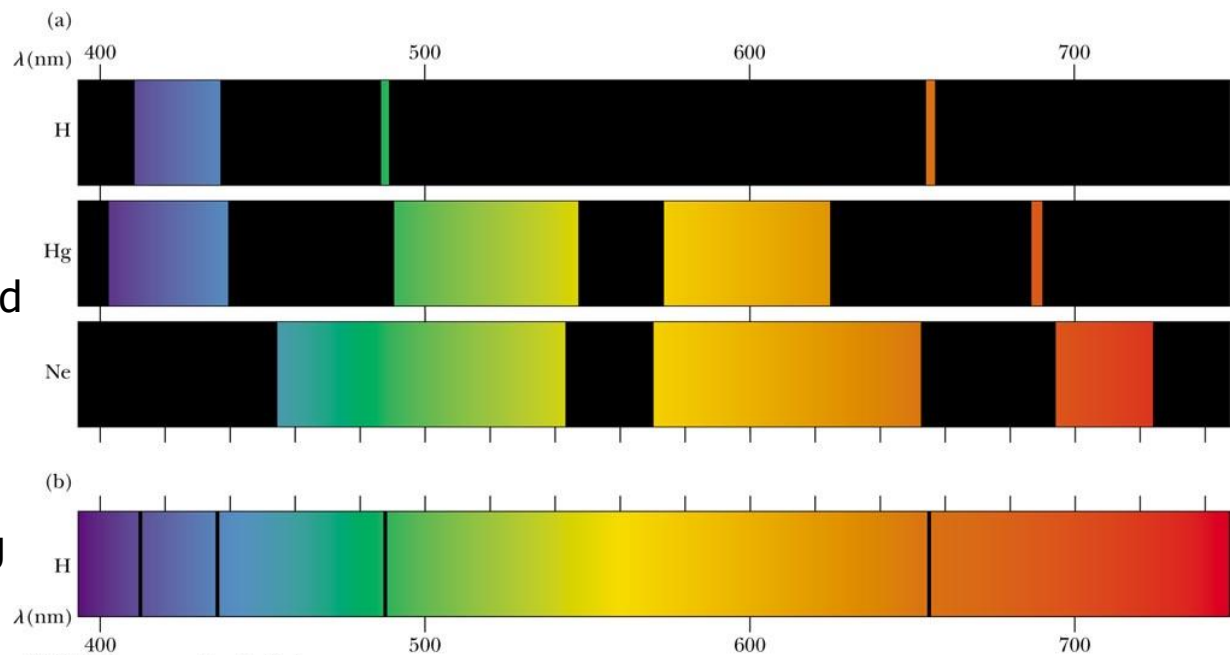
## Problemi s Rutherfordovim modelom

- Atomi emitiraju određene diskretne karakteristične frekvencije elektromagnetskog zračenja
  - Rutherfordov model nije ovo mogao objasniti
- Rutherfordovi elektroni imaju centripetalnu akceleraciju i morali bi zračiti elektromagnetske valove pripadne frekvencije
  - Ovo znači da bi elektroni gubili energiju
  - Radijus bi stoga jednoliko padao
  - Elektron bi u konačnici pao na jezgru za  $10^{-12} s$ 
    - Ovo se ne događa



## Emisijski i apsorpcijski spektri

- Ako plin na niskom tlaku stavimo na razliku potencijala (napon), plin emitira svjetlo karakteristično za njega
- Kad se emitirano svjetlo analizira sa spektrometerom, uočavaju se serije diskretnih svijetlih linija
  - Svaka linija ima različitu valnu duljinu i boju
  - Ova serija linija naziva se *emisijski spektar*
- Element može i apsorbirati svjetlo određene valne duljine
- Apсорpcijski spektar može se dobiti pusti li se kontinuirano zračenje kroz pare plina
- Apсорpcijski spektar sastoji se od serije tamnih linija na kontinuiranom spektru
  - Tamne linije apсорpcijskog spektra podudaraju se sa svijetlim linijama emisijskog spektra



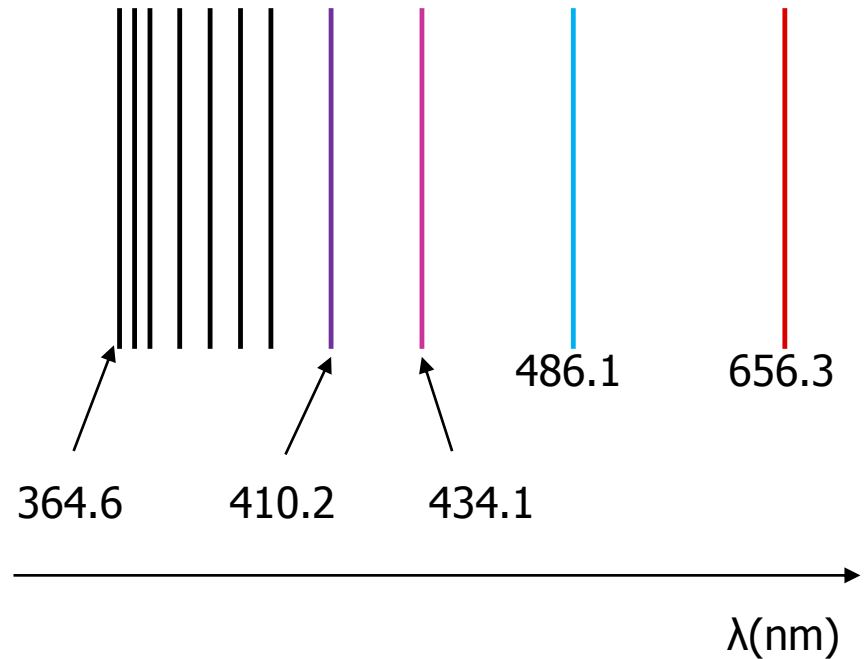
# Struktura atoma

## 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

## Bohrov model atoma vodika

- Elektron se giba po kružnoj orbiti oko protona pod utjecajem Coulombove privlačne sile
  - Coulombova sila stvara centripetalnu akceleraciju
- Samo određene orbite elektrona su stabilne
  - Ovo su orbite na kojima atom ne emitira elektromagnetsko zračenje
  - Stoga, energija atoma ostaje konstantna
- Atom emitira zračenje frekvencije  $f$  kad elektron skoči s početnog stanja veće energije u niže stanje

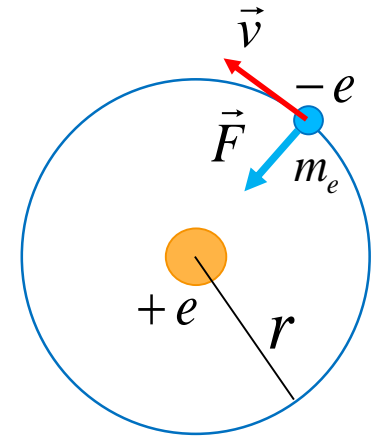
$$E_i - E_f = hf$$

- Dozvoljene orbite elektrona moraju zadovoljavati uvjet da moment količine gibanja elektrona bude

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

- Radijus Bohrovih orbita je kvantiziran

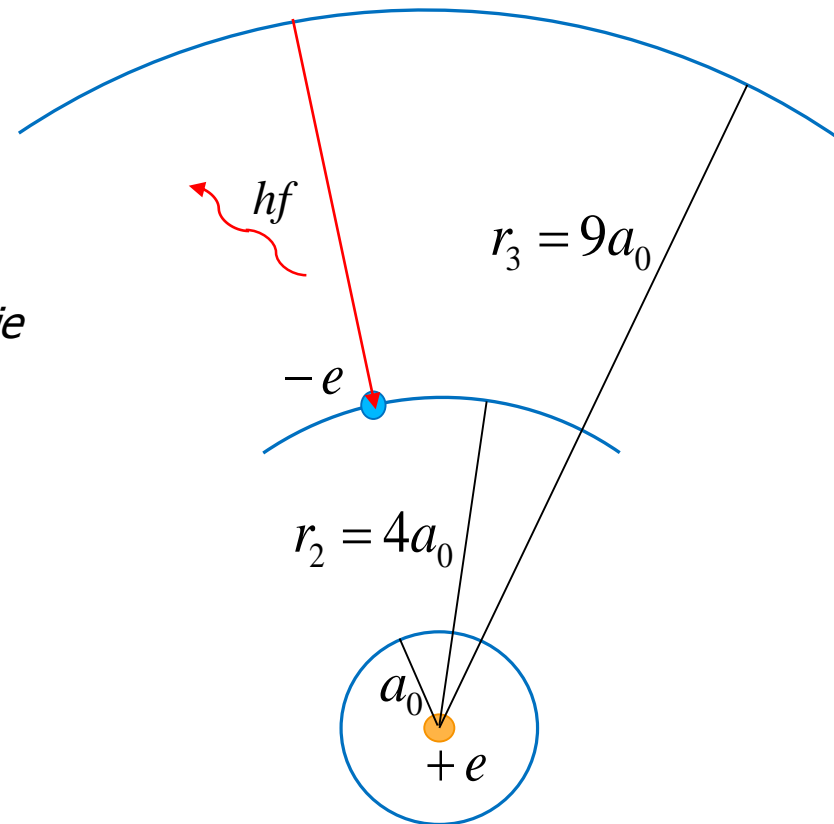
$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e k_e e^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



# Struktura atoma

## Radijusi i energije orbita

- Radijus orbite se može izraziti preko Bohrovog radijusa  $a_0 = 0.0529 \text{ nm}$ 
  - $r_n = n^2 a_0$
- 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  $-13.6 \text{ eV}$
- Sljedeći energijski nivo ima energiju  $-3.40 \text{ eV}$
- *Ionizacijska energija* je energija potrebna da se elektron oslobodi iz atoma
  - Ionizacijska energija vodika je  $13.6 \text{ eV}$



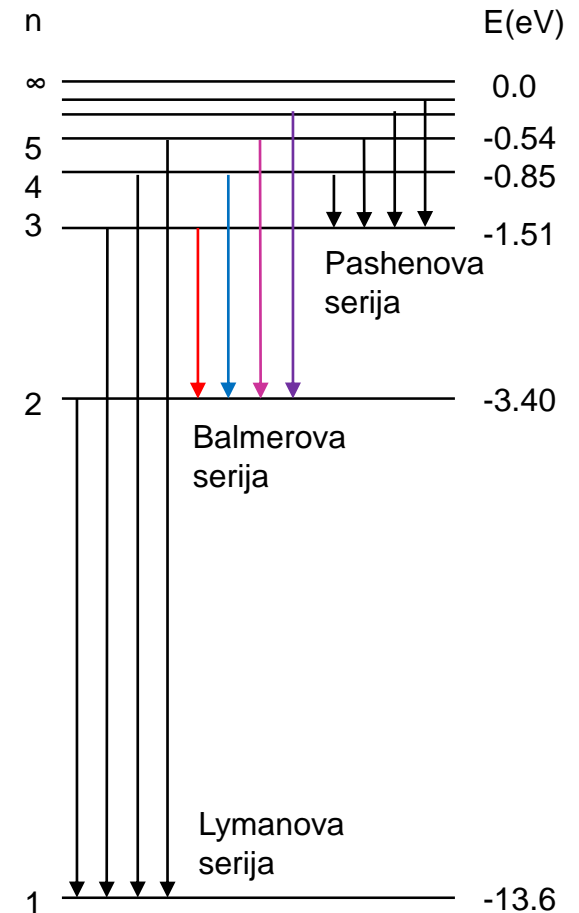
# Struktura atoma

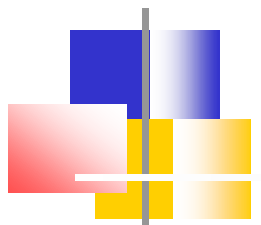
## Energijski nivoi

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

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

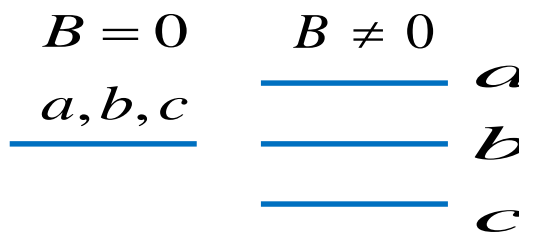
- Lymanova serija,  $n_f = 1$
- Balmerova serija,  $n_f = 2$
- Paschenova serija,  $n_f = 3$
- Kad dođe do prijelaza iz stanja,  $n_i$  u stanje,  $n_f$  (gdje je  $n_i > n_f$ ), emitira se foton
  - Foton ima frekvenciju  $f = (E_i - E_f)/h$  i valnu duljinu  $\lambda$



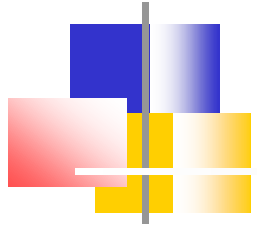


## Izmjene Bohrove teorije

- Sommerfeld je proširio rezultate na eliptičke putanje
  - Zadržao je *glavni kvantni broj*,  $n$
  - Uveo je *orbitalni kvantni broj*,  $\ell$ 
    - $\ell$  je prirodan broj od 0 do  $n-1$
  - Sva stanja s istim glavnim kvantnim brojem tvore *ljusku*
  - Stanja s danim  $n$  i  $\ell$  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,  $m_\ell$ , nazvan *orbitalni magnetski kvantni broj*, morao se uvesti da se ovo objasni
    - $m_\ell$  je cijeli broj između  $-\ell$  i  $+\ell$



# Struktura atoma

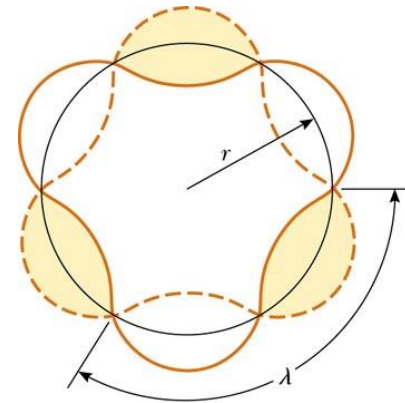


- Spektrometri velike rezolucije pokazuju da su spektralne linije, u biti, dvije vrlo bliske linije, i kad nema magnetskog polja
  - Ovo cijepanje naziva se  *fina struktura*
  - Novi kvantni broj,  $m_s$ , nazvan  *spinski magnetski kvantni broj* , je uveden da objasni finu strukturu

# Struktura atoma

## 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 pretpostavio da će orbite elektrona biti stabilne **jedino ako sadrže prirodan broj valnih duljina**



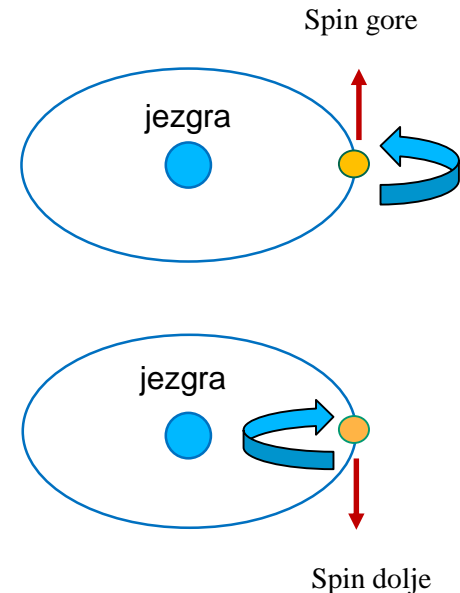
$$2\pi r = n\lambda, n = 1, 2, 3, \dots \quad \lambda = \frac{h}{m_e v} \quad \longrightarrow \quad m_e v r = n \frac{h}{2\pi}, n = 1, 2, 3, \dots$$

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



## Primjena kvantne mehanike na atom vodika

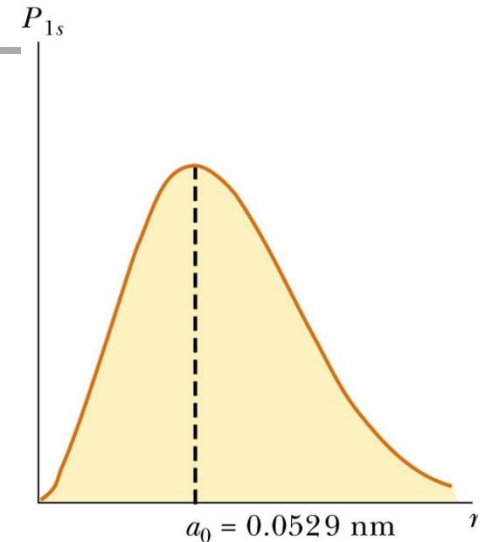
- Jedan od prvih uspjeha kvantne mehanike bio rješenje valne jednačbe vodikova atoma
- Značaj kvantne mehanike je da kvantni brojevi i ograničenja njihovih vrijednosti proizlaze direktno iz matematike, a ne iz pretpostavki napravljenih da bi se teorija slagala s eksperimentima
  - $n$  je prirodan broj
  - $\ell$  je prirodan broj između 0 i  $n-1$
  - $m_\ell$  je cijeli broj između  $-\ell$  to  $\ell$
- Stanje elektrona nije potpuno opisano valnom funkcijom, već elektron ima još jednu veličinu koja određuje njegovo kvantno stanje, a to je **spin**
- Spin elektrona iznosi  $1/2$
- postoje dva smjera za spin
  - Spin gore,  $m_s = 1/2$
  - Spin dolje,  $m_s = -1/2$



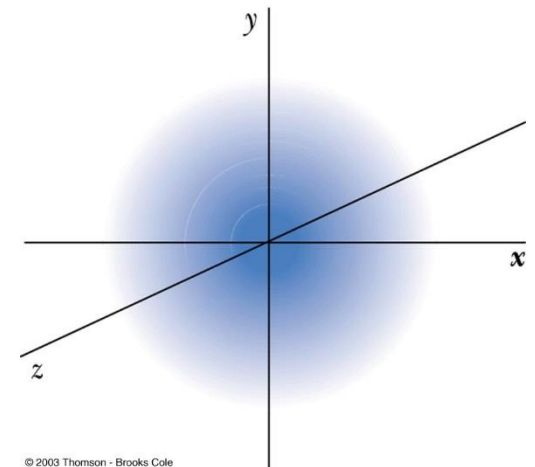
# Valovi materije

## Elektronski oblak

- Graf prikazuje rješenje valne jednačbe za vodik u osnovnom stanju
  - Krivulja ima maksimum na Bohrovom radijusu
  - Elektron nije ograničen na neku određenu udaljenost od jezgre
- *Vjerojatnost* nalaženja elektrona na Bohrovom radijusu je najveća
- Valna funkcija vodikovog atoma u osnovnom stanju je simetrična
  - Elektron se može naći u sferno simetričnom području oko jezgre
- Rezultat je interpretiran promatrajući elektron kao oblak koji okružuje jezgru
  - Najgušći dio reprezentira najveću vjerojatnost nalaženja elektrona

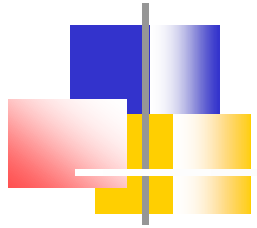


© 2003 Thomson - Brooks Cole

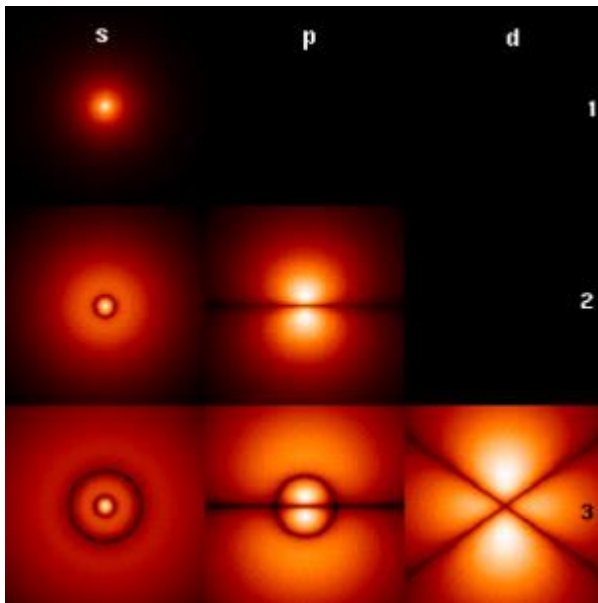


© 2003 Thomson - Brooks Cole

# Valovi materije

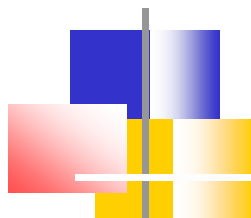


- Elektronski oblaci u pobuđenim stanjima atoma vodika



[http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic\\_orbit](http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbit)

# Valovi materije



- Paulijev princip: dva elektrona u atomu ne mogu nikada biti u istom kvantnom stanju
  - Drugim riječima, dva elektrona u istom atomu ne mogu imati iste vrijednosti  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$ , and  $m_s$

- Vodik (jedan elektron),  $1s^1$
- Helij (dva elektrona),  $1s^2$
- Litij (tri elektrona),  $1s^2 2s^1$

## PERIODNI SUSTAV ELEMENATA

PERIODA	SKUPINA																									
	1 IA	2 IIA		3 IIIB 4 IVB 5 VIB 6 VIIB 7 VIIIB 8 9 VIIIIB 10										11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA					
1	H 1.0079 VODIK																				He 4.0026 HELIJ					
2	Li 6.941 LITIJ	Be 9.0122 BERILIJ																		B 10.811 BOR	C 12.011 UGLJIK	N 14.007 DUŠIK	O 15.999 KISIK	F 18.998 FLUOR	Ne 20.180 NEON	
3	Na 22.990 NATRIJ	Mg 24.305 MAGNEZIJ																			Al 26.982 KALIJ	Si 28.086 KALCIJ	P 30.974 FOSFOR	S 32.065 SUMPOR	Cl 35.453 KLOJ	Ar 39.948 ARGON
4	K 39.098 KALIJ	Ca 40.078 KALCIJ	Sc 44.956 SKANDIJ	Ti 47.867 TITANIJ	V 50.942 VANADIJ	Cr 51.996 KROM	Mn 54.938 MANGAN	Fe 55.845 ŽELJEZO	Co 58.933 KOBALT	Ni 58.693 NIKAL	Cu 63.546 BAKAR	Zn 65.39 CINK	Ga 69.723 GALIJ	Ge 72.64 GERMANIJ	As 74.922 ARSEN	Se 78.96 SELENIJ	Br 79.904 BROM	Kr 83.80 KRIPTON								
5	Rb 85.468 RUBIDIJ	Sr 87.62 STRONCIJ	Y 88.906 ITRIJ	Zr 91.224 CIRKONIJ	Nb 92.906 NIOBJ	Mo 95.94 MOLIBDEN	Tc 98.906 TEHNECIJ	Ru 101.07 RUTENIJ	Rh 102.91 RODIJ	Pd 106.42 PALADIJ	Ag 107.87 SREBRO	Cd 112.41 KADMIJ	In 114.82 INDIJ	Sn 118.71 KOBITAR	Sb 121.76 ANTIMON	Te 127.60 TELURIJ	I 126.90 JOD	Xe 131.29 KSENON								
6	Cs 132.91 CEZIJ	Ba 137.33 BARIJ	La-Lu 57-71 Lantanoidi	Hf 178.49 HAFNIJ	Ta 180.95 TANTAL	W 183.84 VOLFRAM	Re 186.21 RENIJ	Os 190.23 OSMIJ	Ir 192.22 IRIDIJ	Pt 195.08 PLATINA	Au 196.97 ZLATO	Hg 200.59 ŽIVA	Tl 204.38 TALIJ	Pb 207.2 LOVO	Bi 208.98 BIZMUT	Po 209 POLONIJ	At 210 ASTAT	Rn 222 RADON								
7	Fr 223 FRANCIJ	Ra 226 RADIJ	Ac-Lr 89-103 Aktinoidi	Rf 104 RUTHERFORDIJ	Db 105 DUBNIJ	Sg 106 SEABORGIJ	Bh 107 BOHRIJ	Hs 108 HASSIJ	Mt 109 MEITNERIJ	Uun 110 UNUNILIJ	Uuu 111 UNUNILIJ	Uub 112 UNUNILIJ														

<http://www.skole.hr/upload/portalezaskole/newsattach/152/PSE.jpg>

<http://www.periodni.com>

(1) Hrvatska nomenklatura anorganske kemije, ed. V. Simion, Školska knjiga, Zagreb, 1996. Pure Appl. Chem., 68, 2471-2473 (1997) za imena elemenata od rednog broja 104 do 109.

(2) Pure Appl. Chem., 73, No. 4, 687-683 (2001) Relativne atomske mase su zacrkružane na pet značajnih znamenki. Za elemente koji nemaju stabilnih nuklida u zagrađenima je dan maseni broj najduže živećeg izotopa. Izuzetak su Th, Pa i U koji imaju karakterističan izotopski sastav u zemljinoj kori.

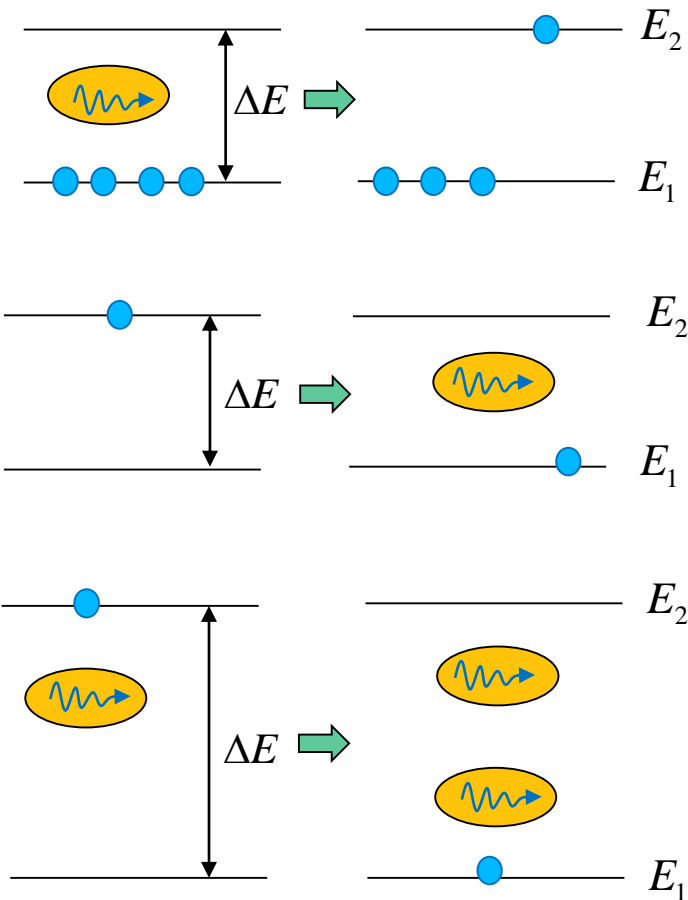
LANTANOIDI														
57 138.91 La LANTAN	58 140.12 Ce CERIJ	59 140.91 Pr PRASEODIMIJ	60 144.24 Nd NEODIMIJ	61 (145) Pm PROMETIJ	62 150.36 Sm SAMARIJ	63 151.96 Eu EUROPIJ	64 157.25 Gd GADOLINIJ	65 158.93 Tb TERBIJ	66 162.50 Dy DISPROZIJ	67 164.93 Ho HOLMIJ	68 167.26 Er ERBIJ	69 168.93 Tm TULIJ	70 173.04 Yb ITERBIJ	71 174.97 Lu LUTECIJ

AKTINOIDI														
89 (227) Ac AKTINIJ	90 232.04 Th TORIJ	91 231.04 Pa PROTAKTINIJ	92 238.03 U URANIJ	93 (237) Np NEPTUNIJ	94 (244) Pu PLUTONIJ	95 (243) Am AMERICIJ	96 (247) Cm KURIJ	97 (247) Bk BERKELIJ	98 (251) Cf KALIFORNIJ	99 (252) Es EINSTEINIJ	100 (257) Fm FERMIJ	101 (258) Md MENDELEVIJ	102 (259) No NOBELIJ	103 (262) Lr LAWRENCIJ

## Energijski prijelazi

- Plave točke reprezentiraju elektrone
- Kad je foton energije  $hf$  apsorbiran, jedan elektron skoči na viši energijski nivo. Ovo se naziva *stimulirana apsorpcija*
  - Viši nivoi se nazivaju *pobuđena stanja*
  - $\Delta E = hf = E_2 - E_1$
- Kad je elektron u pobuđenom stanju, on će se vratiti u stanje niže energije emitirajući foton energije  $hf = E_2 - E_1$
- Ovaj proces se naziva *spontana emisija*
- Atom u pobuđenom stanju i upadni foton
- Upadni atom povećava vjerojatnost da će se elektron vratiti u osnovno stanje
- U konačnici postoje dva fotona, emitirani i upadni
- Emitirani foton je u fazi s upadnim
- Ovo se naziva *stimulirana emisija*





## Inverzija napučenosti

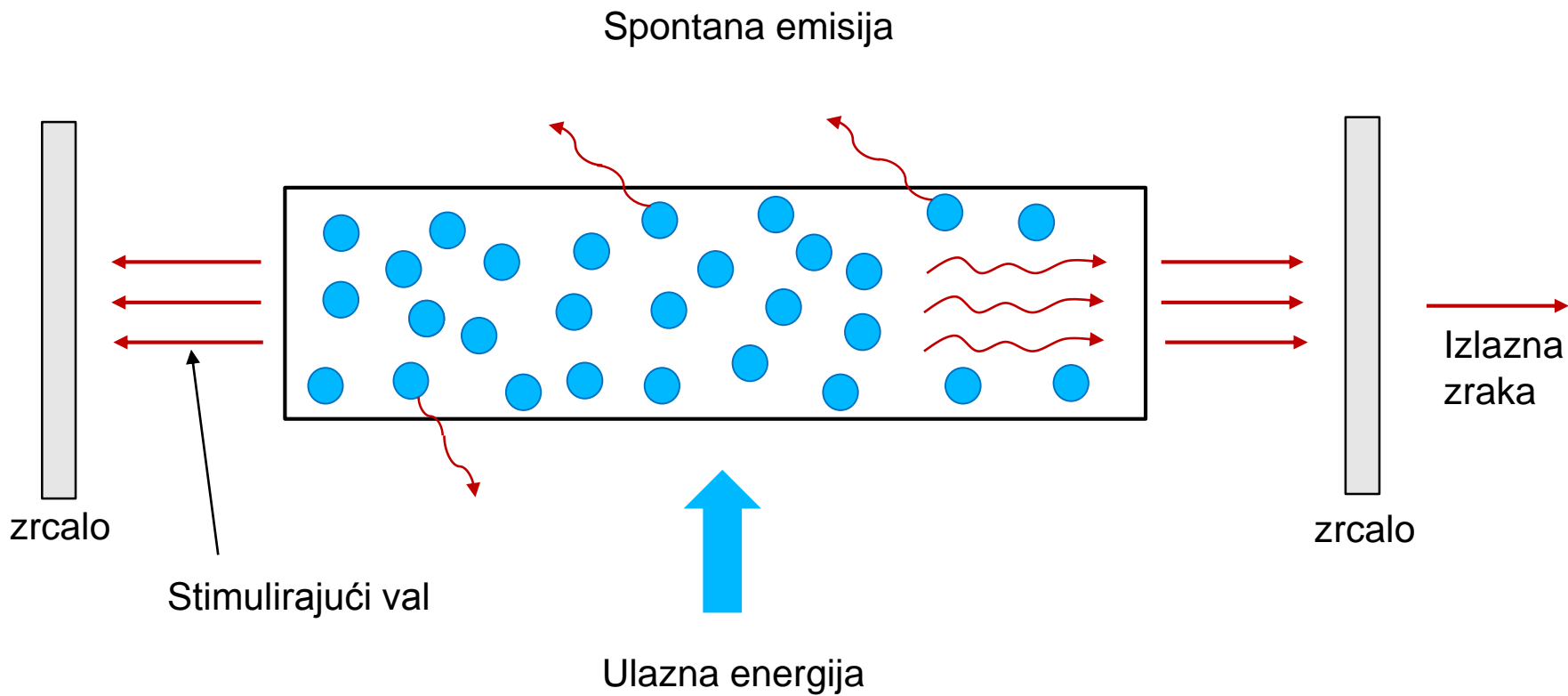
---

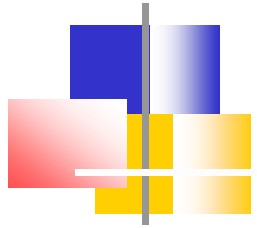
- Kad svjetlo pada na sustav atoma stimulirana emisija i apsorpcija su jednako vjerojatne
- Općenito, dolazi do veće ukupne apsorpcije jer je većina atoma u osnovnom stanju
- Ako možemo dovesti da je više atoma u pobuđenom stanju, može doći do veće ukupne emisije
  - Ovo se naziva *inverzija napučenosti*

## Laser

- Da bi dobili djelovanje lasera, tri uvjeta moraju biti ispunjena
  - Sustav mora biti u stanju inverzije napučenosti
  - Pobuđena stanja sustava moraju biti u *metastabilnom stanju*
    - Njegovo vrijeme života mora biti state dugo u odnosu na normalno vrijeme života pobuđenog stanja
  - Emitirani fotoni moraju biti zadržani u sustavu dovoljno dugo da bi mogli stimulirati daljnje emisije pobuđenih atoma
    - Ovo se postiže koristeći reflektirajuća zrcala

# Stvaranje laserske zrake





## Dodatni materijali

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/rutherford-scattering>

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

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/lasers>